

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

Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН

(КМУ-XXIII)

17 июня 2020, г. Красноярск

Тезисы докладов



Красноярск 2020



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

Тезисы докладов

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

17 июня 2020 года, г. Красноярск

Красноярск
2020

УДК 50(082)
ББК Б.я431
М43

М43 Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIII): тезисы докладов (Красноярск, 17 июня 2020 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2020. – 92 с.

ISBN 978-5-6042995-9-3

ISBN 978-5-6042995-9-3

© Авторы, содержание тезисов, 2020
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2020

**Тезисы докладов междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIII),
17 июня 2020 г., г. Красноярск**

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

Оргкомитет

Василий Филиппович Шабанов, академик РАН, председатель Оргкомитета

Александр Артурович Шпедт, д.с.-х. н., зам. Председателя Оргкомитета,
ФИЦ КНЦ СО РАН;

Светлана Николаевна Софронова, к.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН;

Дмитрий Александрович Балаев, д.ф.-м.н., ИФ СО РАН;

Надежда Николаевна Сущик, д.б.н., ИБФ СО РАН;

Владимир Михайлович Садовский, д.ф.-м.н., профессор, ИВМ СО РАН;

Александр Александрович Онучин, д.б.н., профессор, ИЛ СО РАН;

Оксана Павловна Таран, д.х.н., профессор РАН, ИХХТ СО РАН;

Эдуард Вильямович Каспаров, д.м.н., профессор, НИИ МПС;

Анатолий Иосифович Рубайло, д.х.н., профессор, КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН;

Иван Викторович Петерсон, к.х.н., ИХХТ СО РАН (учёный секретарь
Оргкомитета).

Программный комитет

Иван Викторович Петерсон, к.х.н., ФИЦ КНЦ СО РАН (Председатель
комитета);

Ю.В. Князев, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН;

С.В. Козлова, ИВМ СО РАН;

Е.В. Еремеева, к.б.н., ИБФ СО РАН;

О.В. Перетягтько, к.м.н., НИИ МПС;

Д.С. Цикалов, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН (учёный секретарь комитета).

Содержание

Секция «Физика»	9
<i>Н.А. Бельская, Н.В. Казак.</i> Структура и магнитные свойства $Mn_{3-x}Mg_xVO_5$ ($x = 1.6, 1.8$) монокристаллов.....	10
<i>О.Н. Драганюк, В.С. Жандун.</i> Теоретическое исследование магнитных и электронных свойств Гейслеровский сплавов Mn_2FeSi и Fe_2MnSi	11
<i>М.В. Зотова, Е.И. Шнейдер.</i> Роль электрон-фононного взаимодействия в сильно коррелированных системах.....	12
<i>Д.А. Иконников.</i> Управление дифракцией пучков света с орбитальным угловым моментом	13
<i>М.С. Костерев.</i> Анализ эффективности использования технологий адаптивного управления зоной радиопокрытия базовой станции в системах сотовой связи IMT-2020 (5G)	14
<i>В.И. Кузьмин, С. Г. Овчинников.</i> Эволюция псевдощели и ближнего магнитного порядка с допированием и температурой в двумерной модели Хаббарда.....	15
<i>А.В. Лукьяненко, А.С. Тарасов.</i> Роль технологии формирования планарных структур в науке	16
<i>А.В. Немцев.</i> Сравнительное ab initio исследование магнитных, электронных и оптических свойств шпинелей AB_2O_4 ($A, B = Mn, Fe$)	17
<i>И.С. Пичковский.</i> Кластеризация посредством квантового отжига на трёхуровневых элементах кутритах.....	18
<i>В.В. Соколов.</i> Магнитный круговой дихроизм и поглощение $HoFe_3(VO_3)_4$ в области f-f переходов $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ и 5F_3	19
<i>В.А. Шестаков, М.М. Коршунов.</i> Лондоновская глубина проникновения в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями.....	20
<i>А.С. Шинкоренко.</i> Электронные свойства и поведение под давлением соединений тетраборатов CuB_4O_7 и MnB_4O_7	21
Секция «Химия и химические технологии»	23
<i>М.Ю. Белаиш.</i> Свойства азот-, калий- и фосфор-содержащих биокomпозитных удобрений на основе коры сосны	24
<i>Р.В. Борисов.</i> Обогащение бедных промпродуктов аффинажного производства гидromеталлургическим методом	25
<i>Д.О. Вигуль.</i> Влияние кислотного предгидролиза на процесс окисления древесины сосны (<i>pinus sylvestris</i>) в ванилин и целлюлозу	26

<i>Д.В. Зимонин.</i> Редокс-индуцированные превращения фенилвинилиденовых ReFePt кластеров с фосфорсодержащими лигандами	27
<i>В.А. Ионин.</i> Влияние процессов механической активации на экстракцию веществ с добавленной стоимостью из коры.....	28
<i>Е.А. Киришева.</i> Синтез феррит-гранатов гадолиния и иттербия с применением анионообменного осаждения.....	29
<i>М.А. Лутошкин.</i> Изучение взаимодействия редкоземельных металлов с флавоноидами	30
<i>А.В. Мирошникова.</i> Исследование влияния Ni-содержащих катализаторов на термические превращения этаноллигнина в среде сверхкритического этанола	31
<i>Т.С. Неделина.</i> Редокс-свойства моноядерных комплексов родия (I) и их связь с природой лигандов	32
<i>В.В. Сычев.</i> Каталитическое гидрирование левоулиновой кислоты до гамма-валеролактона на Ru/C катализаторах	33
<i>Е.С. Роговенко.</i> Исследование He- и H ₂ -проницаемости стеклокристаллических мембранных материалов на основе алюмосиликатных ценосфер.....	34
<i>Е.В. Черемискина.</i> Получение методом химического осаждения металлических покрытий 3d металлов (Fe, Co, Ni) с помощью арабиногалактана.....	35
Секция «Био- и медицинские технологии».....	37
<i>П.Ю. Андрущенко.</i> Использование чешуи в качестве маркера жилых и мигрирующих особей сибирского хариуса на участке нижнего бьефа Красноярской ГЭС.....	38
<i>Д.В. Гульнов.</i> Анализ равновесной денатурации бактериальной люциферазы двух типов	39
<i>А.В. Зуева.</i> Действие малых доз γ -излучения на проростки семян лука Allium сера.....	40
<i>К.А. Кистерский.</i> Оценка физико-механических и структурных свойств полигидроксиалканоатов для биоинженерии твердых тканей.....	41
<i>В.С. Кобзева.</i> Кинетическое исследование стадийности биолюминесцентной реакции, катализируемой бактериальной люциферазой	42
<i>В.И. Лоншакова-Мукина.</i> Температурная инактивация бутирилхолинэстеразы в крахмальном и желатиновом гелях.....	43
<i>А.А. Никифоров.</i> Анализ структурных характеристик белка, влияющих на время жизни флуоресценции: пример карбоксиангидразы быка	44
<i>Н.С. Панамарев.</i> Получение гибридного белка сурвивин-обелин и исследование его свойств как биоспецифического биолюминесцентного репортера.....	45
<i>Е. Д. Посохина.</i> Получение и изучение каталитических свойств композита на основе нановолокон оксида алюминия и наноалмазов	46
<i>К.Н. Стоянов.</i> Состав и содержание жирных кислот в якутской лошади и её основных кормовых ресурсах	47

<i>Г.И. Антонов.</i> Применение опилочно-почвенных субстратов разного типа в условиях лесопитомника э/х «Погорельский Бор».....	48
<i>М.А. Малинчик.</i> Ассоциация генетического полиморфизма IL13 rs1800925 с риском развития детской бронхиальной астмы	49
Секция «Математическое моделирование»	51
<i>И.Р. Адаев.</i> Система тестов для сравнения методов численного решения уравнений движения искусственных спутников Земли.....	52
<i>О.С. Володько.</i> Численное моделирование внутренних волн в соленом стратифицированном озере.....	53
<i>А.В. Дергунов.</i> Исследование метеорологических условий Красноярска в январе-феврале 2020 года во время действия режимов НМУ	54
<i>Д.Ю. Донцов.</i> Определение тематики интернет-ресурсов с помощью анализа данных логов прокси-сервера.....	55
<i>Е.А. Ефимов.</i> Разработка и исследование математической модели импульсного сейсмоисточника.....	56
<i>А.А. Ефремов.</i> Численный метод решения задачи о ценообразовании срочного американского опциона продаж	57
<i>С.А. Загарских.</i> Моделирование управления эвакуацией при пожаре из здания средней образовательной школы.....	58
<i>В.И. Закомирный, В.С. Герасимов, А.Е. Ершов.</i> Расширенная модель дискретного взаимодействия для точного моделирования оптических свойств атомарно малых наночастиц	59
<i>Е.С. Калинин.</i> Исследование влияния исполнения подвесного потолка на динамику распространения опасных факторов пожара при помощи компьютерного моделирования	60
<i>С.В. Козлова.</i> Численное моделирование разделения бинарной смеси с аномальным эффектом термодиффузии в цилиндрической колонне	61
<i>К.В. Краснощеков.</i> Методы оценки качества атмосферного воздуха по спутниковым данным	62
<i>А.И. Кром.</i> Математическое моделирование ионной проводимости в нанопористых мембранах: сравнение между 1D и 2D моделями.....	63
<i>А.С. Кругляков.</i> Спектральный анализ сейсмических данных и разделение частот для выявления нефтегазовых залежей	64
<i>М.И. Малимонов.</i> Использование javascript-библиотек в подсистеме визуализации экологических данных.....	65
<i>В.А. Миронов.</i> Сравнение оценок сейсмической опасности от отечественного и зарубежного программного обеспечения	66
<i>В.А. Моисейченко.</i> Пример применения компьютерного моделирования эвакуации с ледовой арены при пожаре	67
<i>А.А. Молявко.</i> Применение свёрточных функций и быстрого преобразования Фурье к анализу нуклеотидных последовательностей	68

<i>И.Е. Петраков.</i> Моделирование плоского напряженного состояния многослойной пластины из волокнистого композита	69
<i>А.А. Пушкарёв</i> Методы и программное обеспечение для представления и анализа геопространственных данных оперативного мониторинга.....	70
<i>М.В. Рыбков.</i> Об эффективности контроля устойчивости при интегрировании жестких задач	71
<i>И.В. Смолехо.</i> Учёт особенностей электрического поля при воздействии на жидкий кристалл	72
<i>Г.К. Сурихин.</i> Распределенная информационная система анализа и визуализации источников интернет-угроз	73
<i>Д.В. Хоров, В.Д. Перехрест.</i> Программный комплекс численного исследования жестких задач	74
Секция «Школы РАН».....	75
<i>С. Колесов, А. Раткуль, К. Борисова, Е. Мордвинова, В.Д. Беленюк.</i> Исследование поверхностных белков нейтрофилов	76
<i>Е. Карпова, Е. Круглик, С. Гладкова, Е. Курбатова, Б. Малюков, Д. Сикилинда, В.В. Красицкая.</i> Установление связей между пространственной структурой и функцией макромолекулы на примере зелёного флуоресцентного белка, иммуноглобулина g и ДНК аптамера к тромбину.....	77
<i>М. Трошина, П. Медяник, О. Мациборук, Е. Доперук, А. Рябова, К. Сошина, М. Иванова, Е. Д. Осипова.</i> Исследование эффективности выделения ДНК из биологического материала человека, полученного из разных источников	78
<i>М. Лаврентьева, М. Подборская, Д. Дворянкина, В. Садовский, И. Калашиников, О.В. Перетяцько.</i> Морфологическое строение пищевых изделий из мяса	79
<i>М. Буданин, Г. Гольшев, В.А. Горбатенко, А.Ю. Горелов, А. Доленко, Е. Копань, В.В. Терешкина.</i> Титриметрическое определение витамина С в продуктах питания.....	80
<i>А.В. Захарченко, Ю.М. Лисицына, Е.С. Ленкова, Ю.А. Болдина, С.С. Михайлова.</i> Заменители чая, полезные свойства и антиоксидантная активность	81
<i>С.Д. Лебедева, Н.А. Дмитриева, Г.М. Величко, Я.С. Мельшина.</i> Определение тяжёлых металлов в косметических средствах.....	82
<i>В.В. Иванченко.</i> Роторно-поршневой двигатель.....	83
<i>А.С. Пономаренко, А.В. Дудкина, А.А. Штода.</i> Синтез простейших кристаллов.....	84
<i>И.И. Похабов, Н.А. Поляков, А.В. Шашков.</i> Двигатель внешнего сгорания.....	85
<i>А.А. Умаров, А.И. Каркавин.</i> Электромагнитная пушка	86

Секция «Физика»

Структура и магнитные свойства $Mn_{3-x}Mg_xVO_5$ ($x = 1.6, 1.8$)

монокристаллов

Н. А. Бельская¹, Н. В. Казак²

СибГУ им. М.Ф. Решетнева¹

Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН²

Монокристаллы $Mn_{1.4}Mg_{1.6}VO_5$ и $Mn_{1.2}Mg_{1.8}VO_5$ были выращены раствор-расплавным методом в системе $Vi_2Mo_3O_{12} + V_2O_3 + Na_2O + MgO + Mn_2O_3$. Кристаллическая структура была решена в деталях. Обнаружено, что монокристаллы $Mn_{1.4}Mg_{1.6}VO_5$ кристаллизуются в ромбической симметрии ($R\bar{3}m(55)$) с параметрами решетки $a=18.3332(14)$ Å, $b=12.5173(10)$ Å, $c=3.0385(2)$ Å, $V=697.28(9)$ Å³ и изоструктурны минералу «орто-пинакиолит». Металлические ионы занимают неэквивалентных кристаллографических позиций в октаэдрической координации. Соединяясь через общие ребра октаэдров $(Mg/Mn)O_6$ формируют зигзагообразные стенки, распространяющиеся вдоль короткого кристаллографического направления. Монокристалл $Mn_{1.2}Mg_{1.8}VO_5$ изоструктурен минералу «халсит» и обладает моноклинной симметрией ($P2/m$). Параметры решетки $a=5.3266(4)$ Å, $b=3.0180(2)$ Å, $c=10.8743(7)$ Å, $\beta=95.274(2)$ Å, $V=174.07(2)$ Å³. В данной структуре имеется пять неэквивалентных кристаллографических позиций, занятых ионами Mg^{2+} , Mn^{2+} , and Mn^{3+} в октаэдрической координации. Наличие структурных единиц с наименьшим (~2.6 Å) и наибольшим (~3.5 Å) межионным расстоянием ставит эти объекты в один ряд с варвикитами и людвигитами 3d-металлов, демонстрирующими каскад магнитных трансформаций.

Действительно, проведенные измерения магнитных и термодинамических свойств новых соединений, выявили общие особенности магнитного поведения. Обнаружено что $Mn_{1.2}Mg_{1.8}VO_5$ и $Mn_{1.4}Mg_{1.6}VO_5$ испытывают несколько магнитных переходов при понижении температуры. Первый переход возникает при температуре близкой к 90 К и, вероятно, связан замораживанием магнитных моментов в магнитной подструктуре с наименьшим межионным расстоянием («dyad» в варвикитах, «triad» в людвигитах, «pentad» в ортопинакиолите и «∞-wall» в халсите). При ~7 К намагниченность и теплоемкость показывают аномалии, связанные с замораживанием магнитных моментов в объемном кристалле. Сравнительный анализ кристаллических структур и магнитного поведения показывает, что несмотря на многокомпонентность системы $Mn_{3-x}Mg_xVO_5$, структурный ряд варвикит-ортопинакиолит-халсит-людвигит демонстрирует признаки определенного катионного и зарядового порядка, эффект которого возрастает с ростом концентрации ионов Mg^{2+} . Результаты обсуждаются в сравнении с ранее изученными оксидборатами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-02-00512, 20-02-00559).

Теоретическое исследование магнитных и электронных свойств Гейслеровский сплавов Mn_2FeSi и Fe_2MnSi

О. Н. Драганюк, В. С. Жандун

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

Гейслеровские сплавы активно изучаются в течение последнего десятилетия и являются яркими представителями современных материалов. Они обладают рядом интересных магнитных и электронных свойств, вследствие особенностей кристаллической структуры с несколькими неэквивалентными катионными позициями. Так, в некоторых сплавах наблюдаются спин-кроссовер под давлением и полуметаллические свойства. В представленной работе рассмотрены механизмы формирования магнитных и электронных свойств соединений Mn_2FeSi и Fe_2MnSi в двух кристаллических структурах Cu_2MnAl (регулярная структура) и Hg_2CuTi (обратная). Являясь магнитными полуметаллами, эти соединения весьма перспективны для создания приложений в микроэлектронике и спинтронике. Изучение роли локального окружения в формировании магнитного момента и микроскопических причин появления зонной щели в полуметаллах позволяет прогнозировать условия возникновения необходимых свойств.

Fe_2MnSi и Mn_2FeSi как в регулярной, так и в обратной структурах были исследованы методами DFT + GGA в рамках *ab initio* пакета VASP. Заметим, что наблюдаемые соединения кристаллизуются в различных структурах при нулевом давлении: регулярная структура предпочтительнее для Fe_2MnSi , а обратная структура - для Mn_2FeSi . Оба соединения являются полуметаллами в энергетически выгодных структурах со спиновыми состояниями вверх на уровне Ферми. Энергетическая зона непосредственно ниже энергии Ферми в основном заполнена t_{2g} -электронами атомов, находящихся на тетраэдрических позициях, и дисперсионное поведение именно этой зоны определяет появление щели. Так, в полуметаллах (Fe_2MnSi в регулярной структуре и Mn_2FeSi в обратной) эта зона находится вблизи уровня Ферми в точке G, а в металлах (Fe_2MnSi в обратной структуре и Mn_2FeSi в регулярной) она пересекает уровень Ферми в окрестности точек G и X, что приводит к исчезновению щели. В этом случае образуются дырочные карманы. Описанные свойства показали, что эти соединения имеют потенциал для дальнейших исследований и создания приложений.

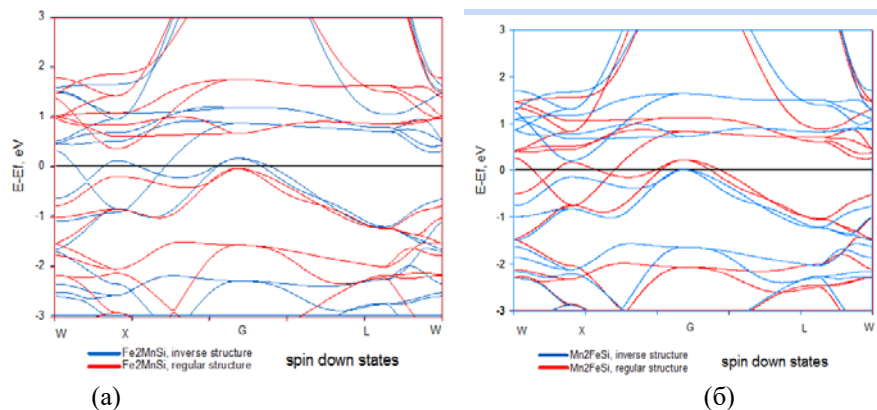


Рис. 1. Зонная структура для состояний со спином вниз (а) Fe_2MnSi и (б) Mn_2FeSi в регулярной (красный цвет) и обратной (синий цвет) структурах

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 19-42-240016: «Управление структурными, магнитными, электронными и оптическими свойствами при помощи давления и интеркалирования в функциональных соединениях со структурой шпинели, содержащих 3d ионы».

**Роль электрон-фононного взаимодействия
в сильно коррелированных системах**

М. В. Зотова¹, Е. И. Шнейдер²

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН*

В современной физике конденсированного состояния до сих пор остается нерешенной проблема природы высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Наибольшее обсуждение в ключе этой проблемы имеют два возможных механизма сверхпроводящего спаривания: спин-флуктуационный механизм и электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ). В то же время остается невыяснена природа псевдощелевого состояния, предшествующего ВТСП.

В настоящей работе в рамках кластерной теории возмущений [1] на основе двумерной pd -модель купратов с реалистичными параметрами [2], дополненной ЭФВ диагонального и недиагонального типов в узельном представлении, анализируется роль ЭФВ в сильно коррелированных системах. Конкуренция рассматриваемых вкладов ЭФВ приводит к трансформации зон квазичастичных возбуждений, а также усиливает корреляционные эффекты перераспределения спектрального веса между ними. На рис. 1а представлена фазовая диаграмма системы в пространстве параметров диагональное / недиагональное ЭФВ (λ_d/λ_{pd}). Красная линия обозначает переход системы из металлического состояния в диэлектрическое (D). Обнаружена смена типа проводимости металла с дырочного (hM) на электронный (eM, рис. 1d). Кроме того, при определенных параметрах ЭФВ (рис. 1а, PGS) дырочный карман (рис. 1b) трансформируется в экспериментально наблюдаемую псевощель (рис. 1c). Подобный тип эволюции электронной структуры был обнаружен ранее с допированием и температурой в работе [3]. Однако и ЭФВ может быть тем компонентом, что формирует псевдощелевое состояние, а также управляет фазовым состоянием системы.

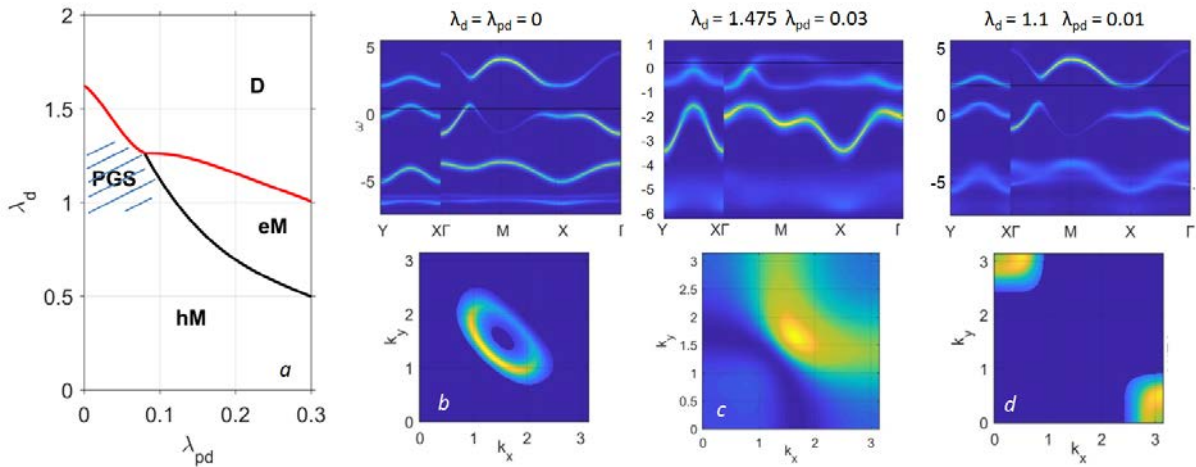


Рис. 1. а) Фазовая диаграмма; b)-d) Электронная структура и поверхность Ферми ($x=0.07, T=0K$)

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «№ 18-42-240017 Особенности электрон-фононной связи в высокотемпературных сверхпроводниках с сильными электронными корреляциями».

Литература:

- [1] E. I. Shneyder et al., JETP, V. 126, PP. 683 (2018).
- [2] M. M. Korshunov et al., Phys. Rev. B, V. 72, PP. 165104 (2005).
- [3] V. I. Kuz'min et al., Phys. Rev. B, V. 101, PP. 115141 (2020).

Управление дифракцией пучков света с орбитальным угловым моментом

Д. А. Иконников

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

В последнее время все больший интерес привлекают пучки света с орбитальным угловым моментом (ОУМ), в особенности в таких областях как квантовые коммуникации, сверхёмкая передача информации и оптические манипуляции [1-10]. Пучки света с орбитальным угловым моментом представляют собой пучки с азимутальной фазовой зависимостью $e^{il\varphi}$ [11-13], где l - орбитальный угловой момент, φ - азимутальный угол. Обычно такие пучки получают путем наложения фазовой модуляции $e^{il\varphi}$ на Гауссов пучок. В нашей недавней работе [14] был разработан и экспериментально продемонстрирован простой аналитический метод формирования дифракционных картин. Такой подход позволяет сформировать дискретную дифракционную картину, состоящую из набора дифракционных максимумов фиксированного порядка, путем использования квазипериодической дифракционной решетки. Этот метод может быть распространен на случай дифракции световых пучков, несущих ОУМ.

В данной работе нами был разработан и экспериментально продемонстрирован обобщенный подход к управлению дифракцией пучков, несущих орбитальный угловой момент. Несмотря на некоторые ограничения, развитый аналитический подход позволяет не только контролировать количество дифракционных максимумов в каждом порядке, их пространственные частоты и распределение интенсивности между ними, но также задавать определенный орбитальный угловой момент для каждого максимума. Подход может использоваться для генерации как одиночных пучков, так и множества пучков с суперпозицией нескольких орбитальных угловых моментов. К тому же, этот подход позволяет формировать свет в регулярные и нерегулярные двумерные массивы пучков с заданным орбитальным угловым моментом в каждой позиции. Разработанный подход дает новые возможности для развития квантовых коммуникаций, передачи информации и оптических манипуляций.

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

Литература:

- [1] A. Mair et al., Nature. V. 412. PP. 313-316 (2001).
- [2] A. C. Dada et al., Nature Physics, V. 7. PP. 677-680 (2015).
- [3] A. E. Willner et al., Adv. Opt. Photon. V. 7. PP. 66106 (2015).
- [4] M. Mirhosseini et al., New J. Phys. V. 17. PP. 033033 (2015).
- [5] A. Sit et al., Optica. V. 4. PP. 1006-1010 (2017).
- [6] S. Fu et al., Opt.Lett. V. 44 PP. 4753-4756 (2019).
- [7] N. B. Simpson, L. Allen and M. J. Padgett, J. of Modern Optics. V. 43. PP. 2485-2491 (1996).
- [8] D. G. Grier, Nature. V. 424. PP. 810-816 (2003).
- [9] S. H. Tao et al., Opt. Express. V. 13. PP. 7726-7731 (2005).
- [10] M. J. Padgett and R. Bowman, Nature Photonics. V. 5. PP. 343-348 (2011).
- [11] L. Allen et al., Phys. Rev. A. V. 45. P. 8185-8189 (1992).
- [12] A. M. Yao and M. J. Padgett, Adv. Opt. Photon. V. 2. PP. 161-204 (2011).
- [13] Y. Shen et al., Light Sci. Appl. V. 8. PP. 90 (2019).
- [14] D. A. Ikonnikov, V. G. Arkhipkin and A. M. Vyunishev, Laser Physics Letters. V. 16. PP. 126202 (2019).

Анализ эффективности использования технологий адаптивного управления зоной радиопокрытия базовой станции в системах сотовой связи IMT-2020 (5G)

М. С. Костерев

Институт инженерной физики и радиоэлектроники Сибирского федерального университета

На данный момент стремительно развиваются технологии в системах сотовой связи 5G. К моменту внедрения технологий в общество, необходимо иметь различные варианты реализации в системах сотовой связи.

На примере тестирования технологии 5G в стандарте McWill, было проведено исследование по изменению фазы при управлении диаграммой направленности различных конфигурациях антенных решеток (линейной и круговой) и сформулированы требования по необходимости управления диаграммой направленности.



Рис. 1. Базовая станция кольцевых AP

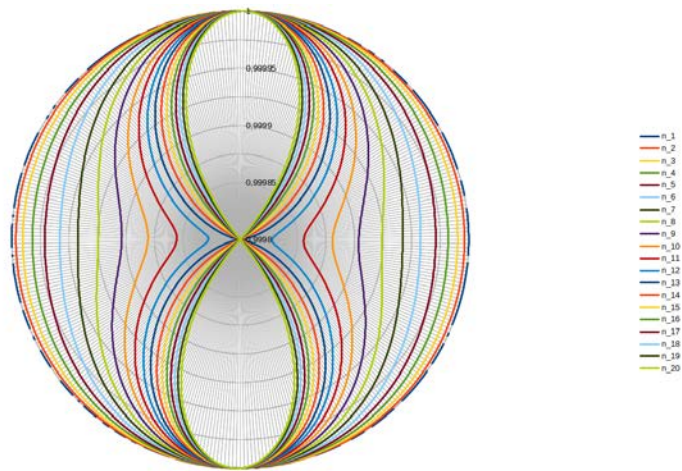


Рис. 2. Диаграмма направленности 8-элементных кольцевых AP антенной решётки с 1-20 вибраторами

Литература:

- [1] В.П. Кубанов. Направленные свойства антенных решеток. Федеральное агентство связи 9-11,24-27 (2015).
- [2] Р.С. Аверьянов, Г.О. Бокк, А.О. Шорин, Оптимизация размера кольцевой антенны и правила формирования территориальных кластеров для сотовой сети McWILL, 1-6 (2016).
- [3] Сайт Хабр. [Электрон. Ресурс]. URL: <https://habr.com> (дата обращения 25.03.2020).
- [4] Сайт Московский центр Карнеги. [Электрон. Ресурс]. URL: <https://carnegie.ru> (дата обращения 25.03.2020).

Эволюция псевдощели и ближнего магнитного порядка с допированием и температурой в двумерной модели Хаббарда

В. И. Кузьмин, С. Г. Овчинников

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

Проблема высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах является одной из нерешенных задач современной физики конденсированного состояния. Один из шагов к решению проблемы ВТСП – понять природу нормального состояния ВТСП купратов, в первую очередь, так называемого псевдощелевого состояния [1]. Природа псевдощели – один из наиболее обсуждаемых предметов в физике ВТСП [2].

В настоящей работе исследована эволюция электронного спектра с допированием и температурой в двумерной модели Хаббарда в нормальной фазе в рамках кластерной теории возмущений [6]. Полученные результаты говорят о том, что эволюция от слабого к сильному допированию сопровождается двумя переходами. Первый – от сильно псевдощелевого поведения, при котором спектральный вес на поверхности Ферми в антинодальном направлении практически нулевой, $A(\mathbf{k}_{an}, \omega = 0) \approx 0$, где \mathbf{k}_{an} – волновой вектор на поверхности Ферми в антинодальном направлении, к слабо псевдощелевому поведению, при котором $A(\mathbf{k}_{an}, \omega = 0) \ll A(\mathbf{k}_n, \omega = 0)$, где \mathbf{k}_n – волновой вектор на поверхности Ферми в нодальном направлении. Второй – от слабого псевдощелевого поведения к нормальному металлу. Данные переходы сопровождаются качественными изменениями в поведении спин-спиновой корреляционной функции с расстоянием. Качественно тот же тип эволюции электронной структуры и спиновых корреляторов мы наблюдаем и при повышении температуры [7].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00256.

Литература:

- [1] T. Timusk and B. Statt, Reports on Progress in Physics V. 62, P. 61 (1999).
- [2] M. R. Norman, D. Pines, and C. Kallin, Advances in Physics 54, 715 (2005).
- [3] N. Doiron-Leyraud et al., Nature (London) 447, 565 (2007).
- [4] A. Kordyuk, Low Temp. Phys. 41, 319 (2015).
- [5] N. Doiron-Leyraud et al., Phys. Rev. X 3, 021019 (2013).
- [6] D. Senechal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, Phys. Rev. Lett. 84, 522 (2000).
- [7] V. I. Kuz'min, M. A. Visotin, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B 101, 115141 (2020).

Роль технологии формирования планарных структур в науке.

А. В. Лукьяненко^{1,2}, А. С. Тарасов^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

²Сибирский Федеральный Университет, ИИФУРЭ

Структуры и устройства, совместимые с технологиями CMOS и SOI, в настоящее время интенсивно исследуются многими научными группами, поскольку различные эффекты, наблюдаемые в таких структурах, могут быть относительно легко реализованы в электронных устройствах. Основной тенденцией в развитии современной микроэлектроники является изготовление изделий с элементами субмикронных размеров. Технологии микроэлектроники очень полезны для исследовательских приложений. В настоящей работе мы представляем обзор методов микро- и наноразмерной модификации поверхности, позволяющих получать структуры для исследования различных физических явлений и успешно примененных нами для этих целей.

Многие серьёзные исследования фундаментального характера нуждаются в формировании специальной экспериментальной геометрии [1]. Оптическая литография – по праву может называться «классической» литографией. Целью процесса фотолитографии является перенос деталей рисунка фотошаблона на поверхность, покрытой слоем фоторезиста [2]. Является одним из основных приёмов, применяемых в планарной технологии. Из-за своей популярности, является самой недорогой и доступной из литографий, при прямом экспонировании позволяет создавать структуры размером до 1 мкм. Может применяться для формирования устройств из сплошных плёнок [3] или для создания масок, через которую производится осаждение материала на подложку [4].

Учитывая специфику применения в научно-исследовательской области, большое распространение получили методы литографии, использующие принцип прямой записи. Электронная литография позволяет добиваться рекордного разрешения и получать объекты размером до 10 нанометров. Так же, добиться высокого разрешения можно с помощью зондовых методов литографии. Перьевая нанолитография, использует зонд атомно-силового микроскопа для осаждения молекул полимера на подложку и формирования маски с разрешением до 15 нм. Основными достоинствами перьевой нанолитографии являются гибкость технологии и возможность быстрого контроля качества получаемых структур собственными инструментами литографа. Это позволяет использовать перьевую литографию как для создания единичных структур (на основе нанопроволок), так и для создания периодических массивов (микродиски) [5].

Исследование частично выполнено при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации в рамках гранта по созданию лабораторий мирового уровня (Соглашение № 075-15-2019-1886).

Литература:

- [1] Tarasov A. S. et al., Thin Solid Films. V. 642, PP. 20-24 (2017).
- [2] L.F. Thompson, C.G. Willson, M.J. Bowden, Introduction to Microlithography, 2nd Ed. American Chemical Society: Washington, DC, 1994.
- [3] Tarasov A. S. et al., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. V. 12, PP. 633-637 (2018)..
- [4] Kim P. D. et al., The European Physical Journal B. V. 91, PP. 90 (2018).
- [5] Smolyarova T. E. et al., Semiconductors. V. 52, PP. 675-677 (2018).

Сравнительное *ab initio* исследование магнитных, электронных и оптических свойств шпинелей AB_2O_4 ($A, B = Mn, Fe$)

А. В. Немцев

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

Соединения со структурой шпинели с общей формулой AB_2O_4 привлекают внимание ученых в связи с многообразием физических свойств, которые возникают, в данных соединениях за счет химического состава и различного упорядочения катионов [1]. В зависимости от кристаллической структуры и химического состава магнитные, электронные и оптические свойства данных соединений могут значительно меняться. Шпинель может иметь как нормальную структуру (AB_2O_4), так и обратную ($B[AB]O_4$).

В данной работе проведены *ab initio* расчеты и сравнение магнитных, электронных и оптических свойств кристаллов $FeMn_2O_4$ и $MnFe_2O_4$ в структуре прямой и обратной шпинели. Все расчеты проводились в рамках теории функционала плотности (DFT+GGA), реализованной в пакете VASP. Данные соединения являются ферримагнетиками с большим магнитным моментом ($\mu \sim 4 - 4.5 \mu_B$). Наиболее выгодной по энергии является нормальная структура шпинелей. Показано, что свойства соединений меняются в зависимости от катионов на позициях А и В. $FeMn_2O_4$ в структуре нормальной шпинели является полуметаллом, однако в структуре обратной шпинели появляется небольшая энергетическая щель, что согласуется с экспериментальными значениями (рисунок 1) [2,3]. Также стоит отметить, что в отличие от тетрагонального $FeMn_2O_4$, соединение $MnFe_2O_4$ имеет кубическую структуру и является диэлектриком.

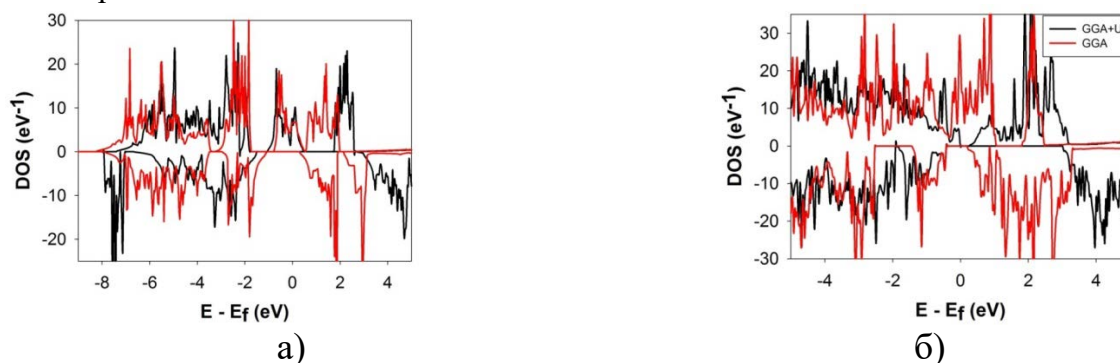


Рисунок 1 – Полная плотность электронных состояний для $FeMn_2O_4$ в структуре прямой (а) и обратной (б) шпинели.

В $FeMn_2O_4$ магнитный момент атома Mn, имеющий октаэдрическое окружение, показывает ярко выраженную зависимость от гидростатического давления, что приводит к резкому падению полной намагниченности при приложенном давлении выше 60 ГПа.

Благодарности:

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого Фонда науки по научно-исследовательскому проекту № 19-42-240016: "Управление структурными, магнитными, электронными и оптическими свойствами при помощи давления и интеркалирования в функциональных соединениях со структурой шпинели, содержащих 3d ионы".

Литература:

- [1] D. Fritsch and C. Ederer, Appl. Phys. Lett. V.99, PP. 081916 (2011).
- [2] J.A. Kulkarni and V.S. Darshane, Thermochim. Acta V.93, PP.473 (1985).
- [3] R. Nepal, Q. Zhang, S. Dai, W. Tian, S. E. Nagler, and R. Jin, Phys. Rev. B V.97, PP.024410 (2018).

Кластеризация посредством квантового отжига на трёхуровневых элементах кутритах

И. С. Пичковский

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

Задача кластеризации заключается в разбиении множества взвешенных данных на подмножества (группы). Для двухуровневых квантовых элементов - кубитов такая задача уже была решена [1]. В их варианте алгоритма для кодирования данных в группах необходимо использовать такое же количество кубитов, что и количество групп, на которые необходимо разбить множество. По моему мнению, это является расточительным. Применение же кутритов позволит сократить количество логических элементов для решения задачи, поскольку кутриты обладают большей скоростью роста гильбертова пространства при добавлении новых элементов [2], что позволяет закодировать больше групп.

В нашей работе в качестве данных будем рассматривать точки на двумерной плоскости. В качестве логического элемента будем использовать кутриты, представленные спинами с $S = 1$. Кодирование будем производить в состояниях $|1\rangle$, $|0\rangle$ и $|\bar{1}\rangle$ собственных проекций на ось Z , где $\bar{1}$ значение проекции спина -1 . Применим сверхплотное кодирование [3] для записи групп.

Для начала рассмотрим задачу, которая хорошо решается на кубитах – разбиение на две группы, используя состояния кутрита $|1\rangle$ и $|0\rangle$. Целевой гамильтониан для отжига [1] возьмем в виде следующей суммы по всем точкам:

$$H_p = \sum_i \sum_j R_{ij} \left[2 \left(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11| + |\bar{1}\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab| + |0\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab| + |\bar{1}1\rangle \sum_s \langle a,b| + |\bar{1}0\rangle \sum_s \langle ab,| + |\bar{1}\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab| \right) - 1 \right]$$

где R_{ij} расстояние между точками. Так как для решения этой задачи мы не используем полный спектр кутрита, то мы его ограничили с помощью слагаемых $|\bar{1}\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab| + |0\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab| + |\bar{1}1\rangle \sum_s \langle a,b| + |\bar{1}0\rangle \sum_s \langle ab,| + |\bar{1}\bar{1}\rangle \sum_s \langle ab|$, где $\sum_s \langle ab|$ - полный спектр состояний двух кутритов. При этом для сокращения необходимого числа кутритов и снятия вырождения, одной из точек заранее присваивается одно возможное априорное значение проекции.

Для кластеризации на три группы нет необходимости ограничивать спектр, поэтому целевой гамильтониан возьмем в виде:

$$H_p = \sum_i \sum_j R_{ij} \left[2 \left(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11| + |\bar{1}\bar{1}\rangle \langle \bar{1}\bar{1}| \right) - 1 \right]$$

Для кластеризации на 4 группы одного кутрита на точку уже недостаточно, поэтому необходимо использовать два кутрита, а кодировка осуществляется в их состояниях: $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|\bar{1}\bar{1}\rangle$ и $|01\rangle$. Будем ограничивать спектр так же, как и в случае разбиения на две группы.

Таким образом, было показано, что задача кластеризации может эффективно решаться на кутритах, при использовании меньшего числа элементов, чем при решении аналогичной задачи на кубитах.

Литература

[1] Kumar V. et al. Quantum annealing for combinatorial clustering, Quantum Information Processing. .V. 17. №. 2. P. 39(2018)

[2] Greentree A. D. et al., Physical review letters. V.92, №. 9, P. 097901(2004)

[3] Lloyd S., Mohseni M., Rebentrost P., arXiv preprint arXiv:1307.0411. (2013).

Магнитный круговой дихроизм и поглощение $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ в области f - f переходов $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ и 5F_3

В. В. Соколов

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

Измерены спектры магнитного кругового дихроизма (МКД) и поглощения $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ в области f - f переходов $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ (G-полоса) и 5F_3 (F-полоса) при температуре 90 К. Переходы из возбуждённых подуровней основного мультиплета идентифицированы на основании поляризации переходов с использованием правил отбора в симметрии D_3 . Заглавные буквы на рис. 1 и в таблице 1 обозначают переходы из основного состояния, а строчные буквы обозначают переходы из верхних подуровней основного мультиплета или вибронные переходы. Обнаружены аномально интенсивные вибронные линии (g_3 и g_6) электронных переходов из возбуждённых подуровней основного мультиплета, при том что сами электронные переходы не наблюдаются. Это указывает на то, что переходы разрешаются по чётности нечётными компонентами колебаний.

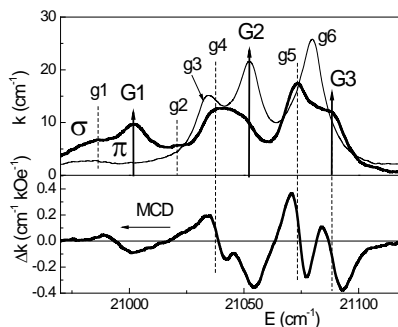


Рис. 1. Поляризованные спектры поглощения (k), МКД (Δk) перехода $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ при температуре 90 К.

Таблица 1. Δg_C измеренные экспериментально и Δg_{CM} теоретические значения изменения фактора Ланде.

Линия	E (cm^{-1})	Δg_C	Δg_{CM}
G3	21090	-10.1	-12
g5	21073	-4.1	-2
F3	20570	-12.3	-12.5
f2	20464	+4.5	+5
f5	20500	+1.8	+5

С помощью спектров МКД и поглощения определены Зеемановские расщепления переходов согласно формуле $\Delta\omega_0 = 2 \frac{\Delta k_{dm}}{k_m} |\omega_m - \omega_0|$, где Δk_{dm} и ω_m – это величина и положение экстремумов диамагнитной линии МКД соответственно, а k_m – амплитуда поглощения α -линии. По Зеемановскому расщеплению переходов в магнитном поле были найдены экспериментальные изменения фактора Ланде Δg_C при переходах (Табл. 1).

Электронные состояния в одноосных кристаллах могут быть описаны в первом приближении волновыми функциями $|J, \pm M_J\rangle$ свободного атома и кристаллического квантового числа μ . Между значениями μ и M_J существует следующее соответствие [1]:

$$M_J = 0 \quad \pm 1 \quad \pm 2 \quad (\pm 3)_{1,2} \quad \pm 4 \quad \pm 5 \quad (\pm 6)_{1,2} \quad \pm 7 \quad \pm 8 \quad (1)$$

$$\mu = 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad (2)$$

Теоретический фактор Ланде g_{CM} дублета равен: $g_{CM} = 2gM_J$, где g – фактор Ланде свободного иона. Сравнение теоретического Δg_{CM} и экспериментального Δg_C – в Табл.1.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ грант № 19-02-00034, а также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: № 19-42-240003 «Влияние локального окружения на магнитооптические свойства f - f переходов в редкоземельных алюмоборатах и ферроборатах».

Литература:

[1] М.А. El'yashevitch, Spectra of rear earths, Moscow, GIT-TL, 1953 (in Russian).

Лондоновская глубина проникновения в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями

В. А. Шестаков, М. М. Коршунов

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

При рассмотрении сверхпроводимости сверхпроводников на основе железа в двухзонной модели в рамках спин-флуктуационного механизма возникает следующий эффект при внесении немагнитных примесей в систему: при увеличении интенсивности рассеяния на примесях Γ , пропорциональной концентрации примесей, сверхпроводящий параметр порядка в одной из зон меняет знак, в то время как в пределах другой зоны параметр порядка сохраняет свой знак. Это соответствует переходу из состояния с s_{\pm} параметром порядка в s_{++} состояние [1-4].

Расчёты лондоновской глубины проникновения $\lambda_L(T, \Gamma)$ в сверхпроводящем состоянии показывают, что на наличие перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями может указывать поведение $\lambda_L(T, \Gamma)$ при низких температурах, $T < 0.1T_{c0}$. А именно, (I) характер изменения наклона графиков $\Delta\lambda_L(T) = \lambda_L(T) - \lambda_L(0)$ с введением примесей; (II) скачок в зависимости $\lambda_L(T=0)$ от концентрации примесей; (III) изменению характера температурной зависимости $\lambda_L^2(0)/\lambda_L^2(T)$. Это открывает возможности для экспериментального подтверждения существования рассматриваемого перехода [5].

Исследование выполнено при финансовой поддержке: РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90109, РФФИ и Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта "Эффекты электронных корреляций и многоорбитальная физика в соединениях железа и купратах" № 19-42-240007, фонда развития теоретической и математической физики «Базис».

Литература:

- [1] D. V. Efremov et al., Phys. Rev. B. V. 84. PP. 180512-1--180512-4 (2011).
- [2] М. М. Коршунов, Ю. Н. Тогушова, О. В. Долгов., УФН, Т. 186, № 12. С. 1315--1347 (2016).
- [3] Z. J. Yao et al., Phys. Rev. B. V.86. PP.184515-1--184515-6 (2012).
- [4] H. Chen et al., Phys. Rev. B. V. 88. PP. 184509-1--184509-11 (2013).
- [5] G. Ghigo et al., Phys. Rev. Lett. V. 121. PP.107001-1--107001-6 (2018).

Электронные свойства и поведение под давлением соединений тетраборатов CuB_4O_7 и MnB_4O_7

А. С. Шинкоренко

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

В данной работе была проведена оценка возможности формирования новой фазы с нецентросимметричной пространственной группой симметрии $P6_522$ [1] в соединениях тетраборатов CuB_4O_7 [2] и MnB_4O_7 [2,3], а также вычислены плотности электронных состояний в структурах с группами симметрии $Pbca$, $Cmcm$, $Pmn2_1$, $P6_522$, на основе которых определена ширина запрещенной зоны этих соединений.

Используя программный пакет VASP [4] с псевдопотенциалами PAW-PBE и метод GGA+U [5] в приближении Дударева ($U=4.5$ eV) были вычислены плотности электронных состояний соединений тетраборатов CuB_4O_7 и MnB_4O_7 и определена ширина запрещенной зоны ΔE , результаты приведены в Таблице 1. Наибольшая ширина запрещенной зоны в структуре $Cmcm$, наименьшая в $Pmn2_1$.

Таблица 1. Вычисленные ширины запрещенной зоны.

ΔE , eV	$Pbca$	$Cmcm$	$Pmn2_1$	$P6_522$
CuB_4O_7	1.9	2.1	1.2	1.4
MnB_4O_7	4.9	5.4	4.3	5

Чтобы оценить величины давления, при которых соединения CuB_4O_7 и MnB_4O_7 могут существовать в фазах $Pbca$, $Cmcm$, $Pmn2_1$, $P6_522$, производилась релаксация параметров ячейки и координат ионов при определенных значениях гидростатического давления. При каждом давлении сравнивались значения энтальпии $H = E + PV$ (где E - полная энергия кристалла, P - давление, V - объем ячейки) приходящейся на одну формульную единицу. Зависимости энтальпии от давления для соединений CuB_4O_7 и MnB_4O_7 представлены на Рис. 1. Как видно энтальпии фаз с симметриями $Pmn2_1$, $P6_522$ являются энергетически не выгодными при любых давлениях и можно сделать вывод что эти соединения не могут формироваться в данных фазах. А энергетическая выгодность фазы $Cmcm$ согласуется с экспериментом (данные фазы получены экспериментально при давлении 7.5 GPa и температуре 550 C⁰ и 1100 C⁰) при давлениях в тетраборате меди и марганца 1,5 GPa и 3,2 GPa, соответственно.

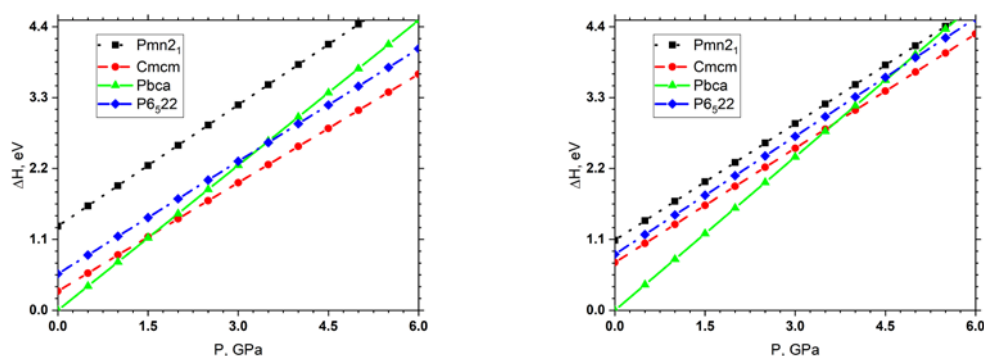


Рис. 1. Зависимость разницы энтальпии соединений CuB_4O_7 (слева) и MnB_4O_7 (справа) в четырех структурах от давления, точкой отсчета является энергия соединений в фазе с группой симметрии $Pbca$ при нулевом давлении.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00919.

Литература:

- [1] M. K. Schmitt, O. Janka, O. Niehaus, et. al Inorg. Chem., V.56, (2017).
- [2] J. S. Knyrim, J. Friedrichs, S. Neumair, F. Roeßner et al. Solid State Sciences V.10, PP.168 (2008).
- [3] S. C. Abrahams, J. L. Bernstein, P. Gibart et al., The J. of Chem. Phys., V. 60, N.5, (1974).
- [4] G. Kresse, J. Hafner. Phys. Rev. B V.47, PP.558 (1993)
- [5] S.L. Dudarev, G.A. Botton, S.Y. Savrasov, et al., Phys. Rev. B V.57, PP.1505 (1998).

Секция «Химия и химические технологии»

Свойства азот-, калий- и фосфор-содержащих биокомпозитных удобрений на основе коры сосны

М. Ю. Белаиш

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Сосна относится к основным хвойным лесобразующим породам на территории России и по распространенности занимает второе место после лиственницы. При получении древесины на перерабатывающих предприятиях накапливаются многотоннажные отходы, причем на долю коры приходится в среднем до 11 % от общего объема ствола сосны. Политика рационального природопользования требует квалифицированной переработки таких отходов - уникального, практически неисчерпаемого сырья для получения различных функциональных материалов [1-3].

Перспективным направлением является получение органоминеральных удобрений на основе древесных отходов, поскольку их применение приводит к улучшению структуры почвы и ее физико-химических свойств. Биоразложение древесной составляющей способствует улучшению гумусного статуса почв.

Сырьем для получения пористых подложек служила воздушно-сухая кора сосны с размером частиц 1 – 3 мм. Пористые подложки получали двумя способами: обработкой коры 1.0 %-ым водным раствором NaOH и последовательной экстракцией органическими растворителями - гексаном, диэтиловым эфиром и этанолом.

Нанесение минеральных компонентов (мочевины - $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ и дигидрофосфата калия - $\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$) проводили пропиткой пористых подложек водным раствором мочевины, а затем – раствором $\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$. Объемы пропиточных растворов соответствовали влагоемкости подложек, которые определяли по ГОСТ 24160-80.

Пористые подложки, полученные обработкой коры сосны щелочью или экстрагированием органическими растворителями, являются основным компонентом биокомпозитных удобрений и применяются в качестве носителя минеральных веществ – мочевины и дигидрофосфата калия.

В результате проделанной работы была показана возможность получения биокомпозитных удобрений с повышенной водостойкостью методом пропитки подложек из коры сосны растворами мочевины и дигидрофосфата калия. Установлено, что в результате обработки биокомпозитных удобрений водой в течение 15 суток удаляется не более 54.4 % азота, 74.3 % фосфора и 58.4 % калия (% от их исходного содержания), что обеспечивает эффект их пролонгированного действия.

Эксперименты по проращиванию семян овса сорта «Мегион» выявили ростостимулирующее действие биокомпозитных удобрений из коры сосны.

Проведенные исследования показывают перспективность разработанных удобрений в качестве альтернативы традиционным водорастворимым удобрениям и свидетельствуют о возможности использования как исходной коры сосны, так и отходов ее экстракционной переработки.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект АААА-А17-117021310219-4) с использованием оборудования КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН.

Благодарности: научному руководителю, зам. директора, д.х.н. Н. В. Чеснокову; к.т.н., Е. В. Веприковой; к.т.н., с.н.с. И. П. Иванову; м.н.с. И. В. Корольковой; д.х.н., профе. РАН О. П. Таран.

Литература:

- [1] Б. Н. Кузнецов, В. А. Левданский, С. А. Кузнецова Химически продукты из древесной коры: монография. Красноярск: Сиб. фед. ун-т, 2012. 260 с.
- [2] А. И. Бутылкина, В. А. Левданский, Б. Н. Кузнецов. Изучение состава экстрактивных веществ, выделенных из коры сосны различными методами. Химия растительного сырья. № 2. С. 77-82 (2011).
- [3] Z. Pasztoy, I. R. Mohacsine, G. Gorbacheva, Z. Borcsok. The utilization of tree bark. BioResources. V.11, PP. 7859-7888 (2016).

Обогащение бедных промпродуктов аффинажного производства гидрометаллургическим методом

Р. В. Борисов

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

В процессе переработки аффинажными предприятиями концентратов металлов платиновой группы образуются значительные количества гидроксидных осадков, которые содержат крайне низкие количества благородных металлов, что не позволяет перевести их в отходы [1-3]. Извлечение благородных металлов на данном этапе существующими методами практически не осуществимо. Данные продукты представлены большим количеством разнообразных химических соединений, главным образом, оксидами и гидроксидами цветных металлов. К преобладающим в гидроксидных осадках примесным элементам можно отнести теллур (40-50%), свинец (5-20%), олово (5-20%), селен (2-5%) [2]. Содержание металлов платиновой группы не превышает 0.2 %.

Цель настоящей работы заключалась в установлении возможности удаления примесных элементов из бедных промежуточных продуктов с остаточными содержаниями металлов платиновой группы менее 0.2 масс.%.

При щелочной обработке исходного продукта в автоклавных условиях наблюдается глубокое разложение (94-96%) исследуемого материала, которое обусловлено, главным образом, растворением теллура, селена свинца, мышьяка и сурьмы. При температуре 180°C, после щелочной обработки материала с добавкой формиата натрия, в растворе выщелачивания драгоценные металлы не регистрируются. Результаты электронной микроскопии с рентгеноспектральным анализом показывают наличие в различных точках образца значительных количеств благородных металлов, которые в исходном материале обнаружить не удалось. Рентгенофлуоресцентным анализом надежно идентифицируются нерегистрируемые в исходном образце родий и золото. Несмотря на высокую степень растворения свинца в конечном продукте его содержание значительно, и составляет от 40 до 50 масс.%. Для более глубокого извлечения свинца апробирована возможность его доизвлечения растворами уксусной кислоты с добавками восстановителя при 130°C. Глубина разложения составила 30 – 40 %, преимущественно за счет растворения свинца. Результаты определения содержания основных компонентов в осадках после последовательного щелочного и уксуснокислого выщелачивания свидетельствуют об эффективности предложенного способа.

Таким образом, суммарное содержание благородных металлов в твердой фазе, после автоклавной обработки в две стадии, возрастает с 0.5 до 15-18 масс.% за счет перехода в раствор примесных элементов - теллура, свинца, олова, селена, мышьяка. Полученный обогащенный продукт может быть переработан по действующим технологиям аффинажа, а растворы выщелачивания могут быть направлены на производство товарных теллура и свинца.

Автор выражает признательность и благодарность с.н.с., к.х.н., О.В. Белоусову, зав. лаб., к.т.н. А.М. Жижаеву (ИХХТ СО РАН) и зав. кафедрой МЦМ, проф., д.х.н. Н.В. Белоусовой (СФУ). Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект АААА-А17-117021310220-0) с использованием оборудования КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] S.A. Temerov, K.M. Strukalev and A.G. Ryzhov, *Tsvetnye Metally*, V.2, PP.39 (2019)
- [2] O.V. Belousov, N.V. Belousova., R.V. Borisov and A.I. Ryumin, *Russ. J. Appl. Chem.* V. 92(2), PP.186 (2019)
- [3] N.V. Belousova., O.V. Belousov, R.V. Borisov, N.V.Grizan and A.I. Ryumin, *Russ. J. Appl. Chem.* V.91(4), PP.550 (2018)

Влияние кислотного предгидролиза на процесс окисления древесины сосны (*Pinus sylvestris*) в ванилин и целлюлозу

Д. О. Вигуль

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Возможности переработки компонентов древесины в продукты тонкого органического синтеза активно исследуются и ориентированы на замещение нефтяного сырья возобновляемым растительным [1]. Лигнины могут служить неисчерпаемыми источниками для получения ароматических оксиальдегидов, которые являются ценным сырьем для фармацевтической, пищевой и парфюмерной промышленности.

Нативные лигнины хвойных пород при окислении в щелочной среде дают до 20-28 мас. % ванилина в расчете на лигнин [2, 3]. Среди нерешенных проблем окисления лигнинов в ароматические альдегиды необходимо отметить очень высокий расход щелочи в процессах. Цель настоящей работы заключается в выявлении роли кислотно-каталитического предгидролиза гемицеллюлоз в процессе окисления хвойной древесины в ванилин и целлюлозу.

Были изучены два вида процессов окисления древесины: двухступенчатый процесс превращения древесины путем ее предгидролиза для удаления гемицеллюлоз и последующего окисления полученной лигноцеллюлозы в ванилин (Схема 1) и трехступенчатый процесс окисления лигноцеллюлозы (Схема 2).

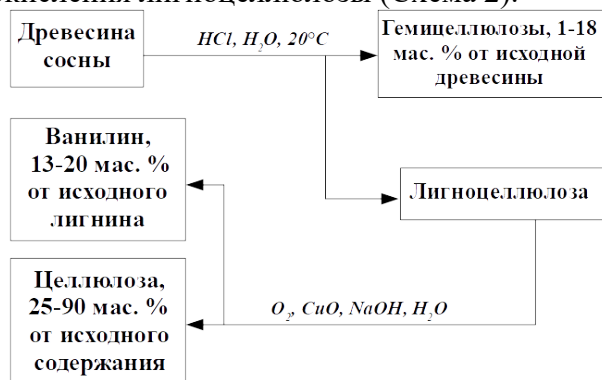


Схема 1. Переработка сосновой древесины в ванилин, целлюлозу и гемицеллюлозу.

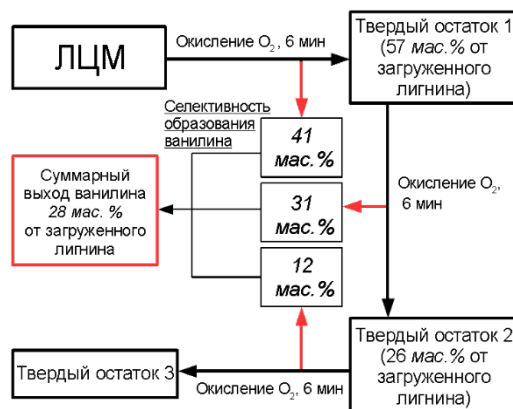


Схема 2. Процесс ступенчатого окисления лигноцеллюлозы в ванилин.

Установлено, что даже частичное удаление гемицеллюлоз позволяет сократить расход гидроксида натрия при окислении предгидролизованной лигноцеллюлозы в ванилин в два раза по сравнению с окислением исходной древесины. Достигнутые расходы щелочи 3,7-5,2 кг в расчете на кг ванилина в 2-5 раз превосходят литературные данные.

Показано, что нативный лигнин древесины сосны неоднороден в процессе его окисления в ванилин, а кислотно-каталитический предгидролиз древесины приводит к дополнительной дифференциации лигнина на быстро и селективно окисляющуюся в ванилин фракцию и менее активную фракцию, не окисляющуюся в условиях дефицита щелочи в реакционной массе.

Выражаю благодарность научному руководителю Тарабанько В.Е. и соавторам Кайгородову К.Л., Тарабанько Н.В., Челбиной Ю.В., Смирновой М.А.

Литература.

[1] Варфоломеев С.Д., Моисеев И.И., Мясоедов Б.Ф., Химические аспекты. Вестник РАН. Т. 79. № 7. С. 595- 604 (2009).

[2] Tarabanko V.E., Tarabanko N., Int. J. of Molecular Sciences. V. 18. P. 2421 (2017).

[3] Brauns F.E., Brauns D.A., Chemistry of lignin, Academic Press, New York-London (1960).

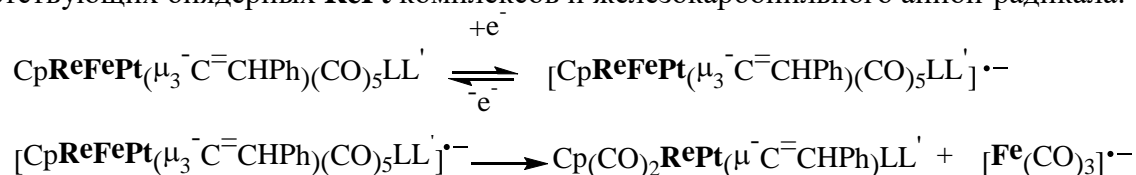
Редокс-индуцированные превращения фенилвинилиденовых **ReFePt** кластеров с фосфорсодержащими лигандами

Д. В. Зимонин

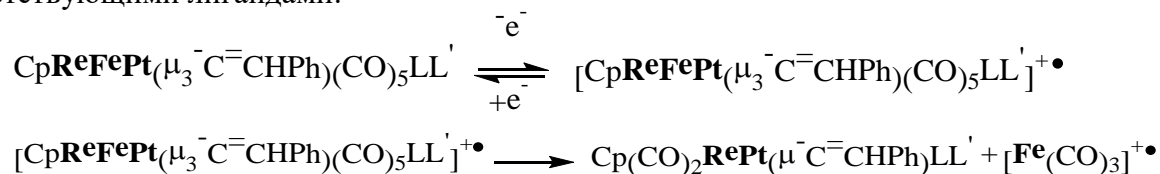
Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Методами классической полярографии на ртутном капельном электроде (р.к.э.), циклической вольтамперометрии на платиновом (Pt) и стеклоуглеродном (СУ) электродах и электролиза при контролируемом потенциале (ЭКП) в ацетонитриле изучены редокс-свойства гетерометаллических фенилвинилиденовых кластеров $\text{Cp}(\text{CO})_5\text{ReFePt}(\mu_3\text{-C=CHPh})\text{LL}'$ [**M** = **Pt**; L = CO, L' = PPh₃ (**1**); L = CO, L' = P(OPrⁱ)₃ (**2**), L = CO, L' = P(OEt)₃ (**3**); L = L' = P(OPrⁱ)₃ (**4**); L = L' = P(OEt)₃ (**5**); LL' = PPh₂(CH₂)_nPPh₂ [n = 2 (dppe) (**6**), n = 3 (dppp) (**7**)]. Трехъядерные **ReFePt** кластеры синтезированы на основе биядерных фенилвинилиденовых **RePt** комплексов, редокс-свойства которых изучены ранее [1, 2].

Показано, что одноэлектронное восстановление трехъядерных кластеров **1-7** протекает квазиобратимо и приводит к образованию анион-радикалов **1⁻-7⁻**, распадающихся до соответствующих биядерных **RePt** комплексов и железокарбонильного анион-радикала:



Окисляются **ReFePt** кластеры **1-7** на Pt и СУ электродах с образованием на первой квазиобратимой одноэлектронной стадии относительно устойчивых катион-радикалов **1⁺-7⁺**, претерпевающих дальнейшие превращения до биядерных **RePt** комплексов с соответствующими лигандами:



Полученные результаты электрохимического изучения кластеров **1-7** хорошо согласуются с данными исследования катион-радикалов **2⁺**, **5⁺**, **7⁺** методом ЭПР спектроскопии. Найдено, что распределение спиновой плотности неспаренного электрона в катион-радикалах **2⁺**, **5⁺**, **7⁺** соответствует ее локализации на атомах железа (85-90%) и платины (10-15%).

Таким образом, установлено, что редокс-превращения трехъядерных фенилвинилиденовых **ReFePt** кластеров протекают с фрагментацией металлоостова.

Благодарности.

Научный руководитель: д.х.н. Бурмакина Г. В., соавтор: к.х.н. Верпекин В. В. Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (Проект №АААА-А17-117021310221-7) с использованием оборудования КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] Бурмакина Г.В. et al., Журнал СФУ. Химия. V.6(1), PP.51-59 (2013)
[2] Verpekin V.V. et al., J. Mol. Structure. V.1163, PP.308-31 (2018)

Влияние процессов механической активации на экстракцию веществ с добавленной стоимостью из коры

В. А. Ионин

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Проведен ряд исследований с целью разработки методов валоризации продуктов из коры, ввиду существующей тенденции накопления кородревесных отходов [1, 2]. Целью данного исследования является разработка комплексной экстракционно-каталитической переработки коры сосны с использованием методов механической активации для выделения веществ с повышенной стоимостью [3, 4].

В данной работе применялись предварительно измельченные образцы коры сосны, полученные с использованием различных методов активации (активация на барабанной мельнице, а также применение методики «парового взрыва»). Для каждого образца проводилось выделение веществ по известному принципу [5] последовательной экстракции растворителями с возрастающей полярностью.

После совершения механической активации каждый из образцов коры обрабатывался гексаном в экстракторе Сокслета с последующим омылением с использованием спиртового раствора гидроксида натрия при нагревании и экстракцией диэтиловым эфиром в делительной воронке. Использование методов механической активации показало увеличение выхода смолистых веществ по сравнению с необработанной корой.

После удаления смолистых веществ из остатков коры образцов извлекали дубильные вещества с использованием этилового с последующей промывкой образца при гидромодуле 20 и постоянным перемешивании. В используемых условиях экстракция дубильных веществ из коры сосны, обработанной механической активацией, приводила к более высоким выходам требуемого состава дубильных веществ, подтвержденным методами ВЭЖХ.

Остатки коры образцов подвергались обработке 1%-ным раствором кислоты с последующей фильтрацией и осаждением изопропиловым спиртом. Вязкость полученных пектинов определяли с использованием вискозиметра Оствальда. Для определения уронидной составляющей применяли методы ИК-спектроскопии.

Проведенная работа показала интенсифицирующее воздействие методов механической активации на экстракционные процессы веществ древесных отходов сосновой коры с использованием методов «зеленой» химии.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 19-43-240011.

Руководитель: д.х.н. Таран О.П., ИХХТ СО РАН

Соавторы: к.т.н. Веприкова Е.В. Белаш М.Ю., ИХХТ СО РАН.

Литература

[1] Krasutsky, P., Natural product reports, V.23, PP.919-942 (2007)

[2] Li, B., et al., RSC Adv., V.6 (2016)

[3] Tai, K., et al., Food Chemistry, V.293, PP.92-102 (2019).

[4] Wusigale, L. Liang, and Y. Luo, Trends in Food Science & Technology, 2020.

[5] Urban, J., et al., Agricultural and Forest Meteorology, V.271, PP.64-72 (2019).

Синтез феррит-гранатов гадолиния и иттербия с применением анионообменного осаждения

Е. А. Киришнева

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Феррит-гранаты гадолиния ($Gd_3Fe_5O_{12}$) и иттербия ($Yb_3Fe_5O_{12}$) – это ферромагнитные полупроводниковые вещества, обладающие ярко выраженными магнитными и оптическими свойствами, благодаря чему данные материалы находят широкое применение в магнитооптике, лазерной и СВЧ-технике [1].

Для получения феррит-гранатов использовался реакционно-анионообменный метод. Целью работы являлось исследование влияния реакционных параметров на выход продуктов осаждения (смесь соответствующих гидроксидов РЗМ и железа (III)). Определение оптимальных условий синтеза $Gd_3Fe_5O_{12}$ и $Yb_3Fe_5O_{12}$, и изучение полученных продуктов.

Синтез прекурсоров $R_3Fe_5O_{12}$ ($R - Gd, Yb$) проводился по методике описанной в [2], однако помимо сильноосновных анионитов АВ-17-8 и Purolite А400 в ОН- и CO_3 -формах использовался анионит АВ-17-8 в ОН-форме, прошедший дополнительную очистку от карбонат ионов, сорбированных из воздуха (АВ-17-8 (ОН)*). Установлено, что при использовании данных анионитов независимо от формы и метода приготовления происходит практически полное осаждение металлов за 1 ч (при совместном осаждении железа (III) и РЗМ), однако выход осадка при н.у. неудовлетворителен (не более 79 % с использованием анионита АВ-17-8 (ОН)*). Для увеличения выхода осадка и уменьшения содержания металлов в фазе анионита использовали методику осаждения с температурным градиентом. За счет различных коэффициентов температурного расширения фаз ионита и поверхностного осадка скорость отслаивания последнего увеличивалась. Для получения граната прекурсоры обжигали при температурах $800\text{ }^{\circ}C - 1100\text{ }^{\circ}C$ в течение 4 ч. По данным РФА установили, что чистая фаза железо-гадолиниевого граната образуется только при температуре $1000\text{ }^{\circ}C$, а железо-иттербиевого – при $1100\text{ }^{\circ}C$. Размер полученных частиц, рассчитанный из рентгенографических данных, составил 96 нм (30 нм по результатам просвечивающей электронной микроскопии) для $Gd_3Fe_5O_{12}$ и 50 нм для $Yb_3Fe_5O_{12}$.

Таблица 1. Условия проведения синтеза и элементный состав осадков

Номер образца	Марка и форма анионита	Молярная доля металлов в анионите, %	Равновесная величина pH	Выход осадка, %	n_{Me}/n_{Fe}
Gd-Fe					
1	A-400 (ОН)	17	6,3	64	0,5
2	A-400 (CO_3)	27	6,7	50	0,5
3	АВ-17-8 (CO_3)	28	6,8	62	0,5
4	АВ-17-8 (ОН)	15	6,4	78	0,6
5**	АВ-17-8 (ОН)*	5	10,9	85	0,6
Yb-Fe					
6	АВ-17-8 (ОН)*	13	11,0	79	0,6
7**	АВ-17-8 (ОН)*	5	11,0	88	0,6
* – дополнительная обработка $Ca(OH)_2$					
** – осаждение с применением температурного градиента					

Работа выполнена совместно с М.В. Пантелеевой, Е.В. Пикуровой и Н.П. Евсевской. Научный руководитель С.В. Сайкова.

Литература:

[1] Nguyet D. T. T., Duong N. P., Satoh T., Anh L. N., Hien T. D., Journal of Magnetism and Magnetic Materials.. V.332. PP. 180-185 (2013).

[2] Сайкова С.В., Киришнева Е.А., Пантелеева М.В., Пикурова Е.В., Евсевская Н.П., ЖХХ. V.64, PP.1191-1198 (2019).

Изучение взаимодействия редкоземельных металлов с флавоноидами

М. А. Лутошкин

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Флавоноиды – широкий класс природных полифенольных антиоксидантов, повсеместно встречающиеся в растительном мире. Одно из важнейших свойств флавоноидов – наличие нескольких ОН-групп – делает их одними из самых эффективных хелатирующих агентов среди всех соединений, которые могут быть получены непосредственно из растительного сырья. Комплексообразующие свойства флавоноидов особенно ярко наблюдается для 3-гидроксифлавонов – основных представителей данного класса – кверцетина, морина и их производных. Кверцетин и морин могут образовывать довольно прочные хелаты в растворе с редкоземельными металлами, что является относительно редким свойством для антиоксидантов. Природа этих взаимодействий изучена для твердого состояния, но практически полностью отсутствовали статистически достоверные термодинамические данные о этих процессах в водных растворах.

В данной работе были получены данные о константах устойчивости для монокомплексов 16 редкоземельных металлов (Sc^{3+} , Y^{3+} , La^{3+} , Ce^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , Gd^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+} , Yb^{3+} , Lu^{3+}) с морином и кверцетином, а также их сульфо- и бромопроизводными [1-3].

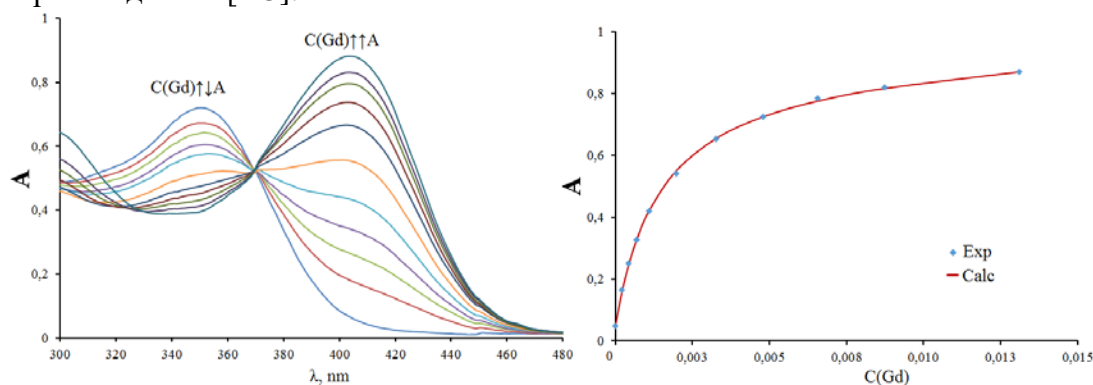


Рис. 1. Электронные спектры поглощения (слева) и оптическая плотность как функция концентрации металла (408 нм) для системы Гадолиний(III)-Морин при постоянной концентрации лиганда ($C(\text{Morin}) = 5.85 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) и переменной концентрации Gd(III) ($C = 0-0.012 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$), $\text{pH} = 2.60$; $I = 1.00(\text{NaCl}) \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

Полученные истинные константы устойчивости лежат в диапазоне 3-8 логарифмических единиц. Было найдено, что для каждого лиганда наблюдается линейное увеличение значений констант устойчивости с ионным радиусом металла, т.е. увеличение $\log K$ от La(III) до Lu(III) . Также, наблюдалась линейная взаимосвязь между ионными потенциалами и $\log K$, что свидетельствует о электростатической природе взаимодействий. Для более точной интерпретации были выполнены квантово-химические расчеты на уровне DFT с использованием различных базисных наборов, функционалов плотности и сольватационных моделей.

Научный руководитель: д.х.н., Кузнецов Б.Н.

Литература:

- [1] M.A. Lutoshkin, A.I. Petrov, B.N. Kuznetsov, A.S. Kazachenko, J. Sol. Chem. V.48, PP.676 (2019).
- [2] M.A. Lutoshkin, A.I. Petrov, B.N. Kuznetsov, A.S. Kazachenko, V.A. Levдansky, Main Group Chem. V.17, PP.17 (2018).
- [3] M.A. Lutoshkin, V.A. Levдanskiy, S.V. Baryshnikov, B.N. Kuznetsov, Chemical Papers, V.73, PP.1731 (2019).

Исследование влияния Ni-содержащих катализаторов на термические превращения этаноллигнина в среде сверхкритического этанола

А. В. Мирошникова

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Лигнин является одним из трех основных компонентов растительной биомассы, для которого ещё не предложены методы высокоэффективной переработки. Органосольвентные лигнины, в отличие от традиционных технических, образующихся на предприятиях целлюлозно-бумажной и гидролизной промышленности, не содержат серу - каталитический яд, снижающий эффективность термокаталитической переработки. Такие лигнины могут быть преобразованы в ценные низкомолекулярные вещества методом каталитической деполимеризации в сверхкритических растворителях [1].

Целью данной работы являлось изучение возможности получения мономерных продуктов методом термо-каталитического превращения этаноллигнина сосны в среде сверхкритического этанола в присутствии катализаторов NiCu/SiO₂ и NiCuMo/SiO₂ (с различным содержанием молибдена) при температурах 300 и 350 °С.

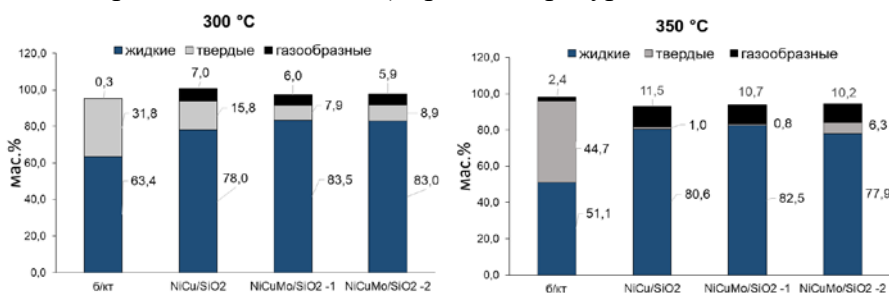


Рис. 1. Выходы продуктов термокаталитического превращения этаноллигнина сосны в сверхкритическом этаноле при 300 и 350 °С и продолжительности 1 ч.

Максимальный выход жидких продуктов, образующихся в процессе термо-каталитического превращения этаноллигнина сосны получен при температуре 300 °С в присутствии катализатора NiCuMo/SiO₂-1 (83,5 мас.%). При температуре процесса 350 °С этаноллигнин практически полностью превращается в жидкие и газообразные продукты в присутствии данного катализатора. Выход твердых продуктов не превышает 1 мас.% (рис. 1). Мономерные соединения, входящие в состав жидких продуктов представлены в основном гваяколом и его алкилпроизводными. Наиболее высокие выходы мономерных веществ получены при температуре процесса 300 °С в присутствии катализаторов, содержащих Mo. Увеличение температуры процесса до 350 °С инициирует реакции образования алкил производных фенола, пирокатехина и бензола, что свидетельствует о протекании реакций деметоксилирования, деметилирования и дегидратации.

Показана возможность получения низкомолекулярных мономерных продуктов в присутствии Ni-содержащих катализаторов при температурах 300 и 350 °С в процессе термо-каталитического превращения этаноллигнина, которые могут применяться в химической, парфюмерной и фармацевтической отраслях промышленности, а также в качестве компонентов моторных топлив.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-53-16001 в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (Проект АААА-А17-117021310218-7) (V.46.4.3).

Благодарность соавторам работы: Шарыпову В.И., Барышникову С.В., Маляру Ю.Н., Яковлеву В.А., Таран О.П., а также научному руководителю д.х.н. профессору Кузнецову Б.Н.

Литература:

[1] Kuznetsov B. N., Chesnokov N. V., Sudakova I. G., et al., *Catalysis Today*, V.309, PP.18-30 (2018).

Редокс-свойства моноядерных комплексов родия (I) и их связь с природой лигандов

Т. С. Неделина

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

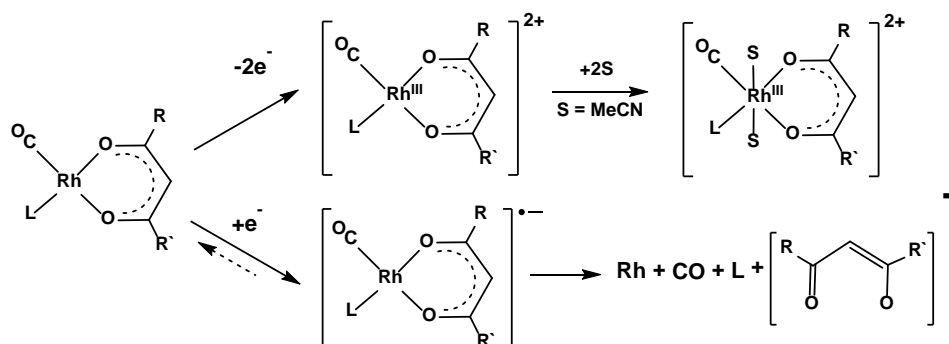
Моноядерные комплексы родия (I) широко используются в качестве катализаторов в реакциях превращения органических соединений. В зависимости от природы лигандного окружения они являются эффективными гомогенными катализаторами различных процессов [1]. Во всех этих процессах происходит изменение степени окисления атома родия (I). Поэтому изучение редокс-свойств комплексов родия и установление их связи с лигандным окружением атома металла, для которых успешно используются электрохимические методы, является актуальным.

Электрохимическое окисление моноядерных карбонилфосфиновых комплексов родия (I) с β -дикетонатными лигандами (O-O лиганды) хорошо изучено в литературе [2]. Однако, данные о редокс-свойствах дикарбонильных комплексов, а также родственных соединений родия (I) с хелатными лигандами, связанными с родием через атомы азота и кислорода (O-N лиганды), отсутствуют.

В настоящей работе методами классической полярографии на ртутном капельном электроде, циклической вольтамперометрии на платиновом и стеклоуглеродном электродах в ацетонитриле изучены редокс-свойства дикарбонильных и, для сравнения, карбонилфосфиновых комплексов родия (I), содержащих (O-O) лиганды (CO)(L)Rh(O-O) [L = CO или PPh₃, O-O = ацетилацетонат (acac), бензоилацетонат (ba), дибензоилметан (dbm), теноилтрифторацетонат (tta), трифторацетилацетонат (fta)], а также комплексов с O-N лигандами (CO)(L)Rh(N-O) [L = CO или PPh₃, N-O = 8-оксихинолят (8-oxq), 2-метил-8-оксихинолят (2-Me-8-oxq), пиколинат (pic)].

Показано, что значения потенциалов окисления изученных комплексов коррелируют с величиной рK_a свободных β -дикетонов, 8-оксихинолина и пиколина и смещаются в катодную область с увеличением значений рK_a. Замена одного из карбонильных лигандов в дикарбонильных комплексах (CO)₂Rh(O-O) и (CO)₂Rh(N-O) на трифенилфосфиновый лиганд приводит к смещению редокс-потенциалов (CO)(PPh₃)Rh(O-O) и (CO)(PPh₃)Rh(N-O) в катодную область в соответствии с большей электронодонорной способностью трифенилфосфинового лиганда по сравнению с карбонильным.

Установлено, что электрохимическое восстановление и окисление изученных моноядерных комплексов родия (I), на примере β -дикетонатных, протекает по следующей схеме:



Литература.

- [1] M. Cheong, T. Ziegler, *Organometallics*. V.24, PP.3053-3058 (2005).
- [2] J. Conradie, J.C. Swarts, *Eur. J. Inorg. Chem.* V.13, PP.2439-2449 (2011).

Каталитическое гидрирование леволиновой кислоты до гамма-валеролактона на Ru/C катализаторах

В. В. Сычев

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Гамма-валеролактон (ГВЛ) - одно из базовых химических соединений («platform chemicals»), которое может быть получено из леволиновой кислоты (ЛК) и алкиллевулинов (АЛ), производящихся из лигноцеллюлозной биомассы. ГВЛ отлично зарекомендовал себя как растворитель, может служить сырьем для получения биополимеров, биотоплив, применяется как в пищевой, так и в фармацевтической отраслях промышленности. [1]

Наночастицы рутения, нанесенные на активированные угли – наиболее эффективные катализаторы в процессах прямого гидрирования ЛК и АЛ до ГВЛ. Однако микропористость активированных углей может препятствовать транспорту субстрата и промежуточных продуктов к каталитически активным центрам.

Целью данной работы – разработка твердых катализаторов прямого гидрирования ЛК и АЛ до ГВЛ на основе мезопористого графитоподобного углеродного материала (УМ) Сибунит, несущего в качестве активного компонента наночастицы рутения.

На основе УМ Сибунит-4 приготовлена серия носителей различающихся по кислотности и размерам гранул. По методике, описанной в [2, 3] приготовлена серия катализаторов содержащих 1 или 3% рутения, катализаторы исследованы методами ПЭМ, адсорбции N₂, определены значения pH точки нулевого заряда (pH_{ТНЗ}).

Катализаторы испытаны в процессе прямого гидрирования ЛК до ГВЛ; изучена роль кислородсодержащих групп на поверхности УМ Сибунит-4 в данном процессе.

Таблица 1. Гидрирование ЛК до ГВЛ.

Катализатор	pH _{ТНЗ}	Конв. ЛК	Выход ГВЛ мол. %

Условия проведения процесса: 2.5 г ЛК, 0.125 г кат., 50 мл H₂O, 160°C, 195 мин.

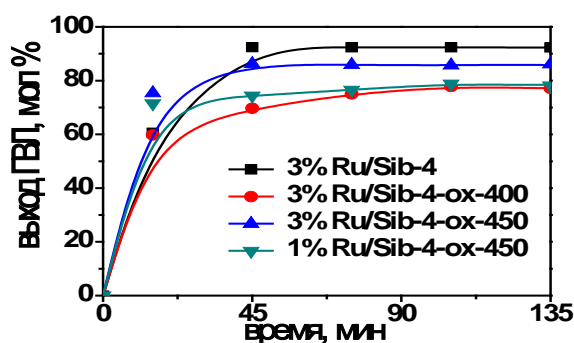


Рис. 1. Кинетика гидрирования ЛК до ГВЛ.

Продемонстрирована эффективность Ru-катализаторов на основе УМ Сибунит: максимальный выход ГВЛ составил 92 мол. %. Повышение кислотности носителя, вызванное увеличением температуры окислительной обработки УМ, и как следствие повышением концентрации поверхностных кислотных групп, приводит к увеличению скорости реакции и снижению выхода ГВЛ, за счет падения селективности процесса, при сохранении неизменно высоких значений конверсии ЛК.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 17-53-16027). Автор благодарит: с.н.с. ИХХТ СО РАН Барышникова С.В., н.с. ИФ СО РАН Волочаева М.Н., с.н.с. ИХХТ СО РАН Иванова И.П.

Научный руководитель: Таран Оксана Павловна, д.х.н., проф. РАН, директор ИХХТ СО РАН.

Литература:

- [1] Alonso, D.M., Wettstein S.G., Dumesic, J.A. Green Chem. V.15, PP.584 (2013).
- [2] Minh, D.P., et al., Applied Catalysis B: Environ. V.73, PP.236 (2007).
- [3] Taran, O.P., et al. Catalysis in Industry. V.5, PP.164 (2013).

Исследование He- и H₂-проницаемости стеклокристаллических мембранных материалов на основе алюмосиликатных ценосфер

Е. С. Роговенко

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Низкая энергоемкость мембранной технологии разделения и глубокой очистки газов имеет весомое преимущество по сравнению с традиционным криогенным методом. Основным критерием выбора мембранных материалов является сочетание высокой селективности и проницаемости, что обеспечивает эффективность процесса извлечения и глубокой очистки целевого компонента [1]. При создании газоразделительных мембран для получения высокочистого гелия наиболее перспективны высокоселективные материалы на основе непористых силикатных стекол.

Перспективными мембранными материалами являются ценосферы (полые стеклокристаллические алюмосиликатные микросферы), выделенные из летучих зол от пылевидного сжигания угля. Исследование He- и H₂-проницаемости стеклокристаллических мембранных материалов на основе ценосфер выполнено на морфологически однородных узких фракциях немагнитных непористых ценосфер в широком диапазоне изменения макрокомпонентного и фазового составов, с преобладающим содержанием глобул: кольцевого строения со сплошной оболочкой до 85% частиц, кольцевого строения с пористой оболочкой до 95% частиц и сетчатого строения до 57% частиц. Установлено, что лучшими значениями проницаемости стеклофазы обладают узкие фракции ценосфер с максимальным содержанием глобул сетчатого строения (57%) и минимальным содержанием ионов-модификаторов в стеклофазе ($G = 91$ мол.%). Превышение проницаемости относительно фракции ценосфер с оболочкой кольцевого строения близкого состава ($G = 90$ мол.%) составляет в случае He в 2 раза, а H₂ – в 7 раз. В сравнении с силикатным стеклом с близким значением $G = 92$ мол.% [2, 3] наблюдаемое превышение составляет один порядок в отношении He и полтора порядка – в отношении H₂, а в сравнении с кварцевым стеклом, в котором ионы-модификаторы отсутствуют, значения K_{He} практически совпадают, а K_{H_2} превышает кварцевое стекло почти на порядок. Значения селективности $\alpha(He/H_2)$ стеклокристаллических мембранных материалов на основе ценосфер находятся на высоком уровне и составляют при 280°C для ценосфер кольцевого строения 10-33, сетчатого – 7-24.

Таким образом, исследование диффузионных свойств стеклокристаллической оболочки ценосфер, отличающейся составом и строением, в отношении He и H₂ показало, что проницаемость определяется строением оболочки глобул, составом и расширенной структурой стеклофазы, облегчающими процесс диффузии газов. Существенным преимуществом стеклокристаллических мембранных материалов на основе ценосфер является сочетание высокой селективности и проницаемости, определяющее перспективность их использования в мембранной технологии выделения и глубокой очистки He и H₂.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект АААА-А17-117021310222-4). Автор выражает благодарность научному руководителю д.х.н. Аншицу А. Г. и соруководителю к.х.н. Фоменко Е. В. за помощь в обсуждении и интерпретации экспериментальных данных.

Литература:

- [1] R. W. Baker Membrane technology and applications. UK: Wiley & Sons Ltd, 2004,
- [2] V. O. Altomose, Appl. Phys. V.32, PP.1309 (1961),
- [3] R. T. Tsugawa, I. Moen, P. E. Roberts and P. C. Souers, Appl. Phys. V.47, PP.1987 (1976).

Получение методом химического осаждения металлических покрытий 3d металлов (Fe, Co, Ni) с помощью арабиногалактана

Е. В. Черемискина

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Метод химического осаждения является наиболее простым и экономичным способом нанесения металлических покрытий [1]. Процессу химического осаждения посвящено большое число обзоров и монографий [2]. Химические покрытия демонстрируют высокую твердость и коррозионную стойкость.

Зеленый синтез является не только экологически чистым. При данном подходе нет необходимости использовать высокие температуры, давление или дополнительные энергозатраты. Эти новые подходы можно реализовать в больших масштабах [3]. Используемые экстракты, как правило, нетоксичны, и выполняют функцию диспергирующего и покрывающего агента, сводя к минимуму процессы окисления и агломерации. Для получения ферромагнитных покрытий сплавов 3-d металлов был применен метод химического осаждения с использованием в качестве восстановителя природного полисахарида арабиногалактана, выделенного из лиственницы.

На рисунке 1 представлены результаты рентгенофазового анализа покрытий на медной подложке. На рентгенограммах присутствуют как отражения, соответствующие ферромагнитному сплаву, так и отражения, соответствующие медной подложке. Отражение при $2\Theta=27^\circ$ обусловлено отражениями от плотноупакованных плоскостей графитовой фазы. Это свидетельствует о том, что примесь углерода кристаллизуется в графитовые включения. Измерения элементного состава методом рентгенофлуоресцентного анализа также показали наличие углерода в покрытиях ~ 30 %.

Вероятно, образование металлического покрытия обусловлено каталитическим разложением полисахарида на поверхности подложки, в результате чего происходит восстановление ионов металла, а конечным продуктом разложения полисахарида является графит, регистрируемый методом рентгенофазового анализа.

Работа выполнена в рамках базового проекта МНЦИЭСО (АААА-А19-119022290043-7).

Литература:

- [1] A. Brenner and G. E. Riddell, J. Res. Natl. Bur. Stand. V.37, PP.31 (1946).
- [2] J. Sudagar, J. Lian, and W. Sha, J. Alloys Compd. V.571, PP.183 (2013).
- [3] S. Machado, S. L. Pinto, J. P. Grosso, H. P. A. Nouws, J. T. Albergaria, and C. Delerue-Matos, Sci. Total Environ. V.1, PP.445–446 (2013).

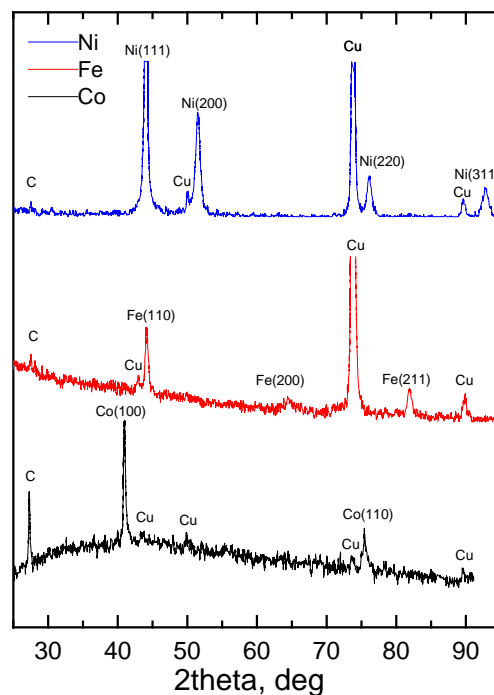


Рис. 1. Рентгенограммы покрытий FeC, CoC и NiC на медной подложке

Секция «Био- и медицинские технологии»

Использование чешуи в качестве маркера жилых и мигрирующих особей сибирского хариуса на участке нижнего бьефа Красноярской ГЭС

П. Ю. Андрущенко

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН;

Сибирский Федеральный Университет

Сибирский хариус является одним из наиболее массовых и изученных видов промысловых рыб среднего течения р. Енисей. В большинстве цитируемых работ авторами предполагается, что исследованные особи хариуса являются жилыми. Однако, хариусам, как и большинству видов лососеобразных, свойственны нерестовые миграции в придаточные водотоки [1]. Таким образом, считающаяся единой популяция сибирского хариуса в магистральном водотоке Енисея может быть представлена смесью жилых особей и рыб, рожденных или прошедших часть жизненного цикла в придаточном водотоке.

Прямые исследования миграций хариуса на участке среднего Енисея, в силу своей трудоемкости никогда не проводились, поэтому остается неизвестным соотношение жилых и мигрирующих особей. Разные траектории развития жилых и мигрирующих особей могут приводить к различиям в морфологии их чешуи (количества склеритов в годовых кольцах). Таким образом, задачей данной работы была проверка предположения о возможности использования чешуи сибирского хариуса в качестве маркера, позволяющего идентифицировать особей с разным жизненным циклом. Жилых и мигрирующих рыб мы делили по количеству склеритов во втором годовом кольце. Особей, имевших 15 и более склеритов, считали жилыми, а тех, у которых 14 и менее склеритов, считали мигрирующими. Всех анализируемых хариусов рассматривали в качестве одного вида – *Thymallus arcticus*, несмотря на существующее мнение о таксономическом разнообразии этого рода в бассейне Енисея [2].

Выборка сибирского хариуса была собрана в 2007-2018 гг. на двух участках среднего течения р. Енисей – в районе с. Хлопуново (438 экз.), вблизи устья р. Кан, и в районе с. Овсянка, вблизи устья р. Маны (39 экз.) Кроме основной выборки, использовали архивные материалы кафедры водных и наземных экосистем СФУ по хариусу, отловленному в крупных притоках Енисея: реках Амыл, Кан, Н. Тунгуска, Б. Хета.

Результаты исследования показали существенные различия в строении чешуи хариуса из основного русла среднего Енисея сравнительно с популяциями этого вида из притоков. До 30% от выборки хариусов, отловленных в р. Енисей, имела строение чешуи, аналогичное рыбам из притоков. Этим особям мы относим к мигрирующим. Для подтверждения данной гипотезы было измерено содержание ^{137}Cs в мышцах жилых и мигрирующих особей хариуса, отловленных в сентябре 2019 г. в р. Енисей вблизи устья р. Кан, с помощью гамма-спектрометра, которое показало, что содержание ^{137}Cs в мышцах жилых особей хариуса в шесть раз превышает содержание этого техногенного радионуклида в мышцах мигрирующих особей. Таким образом, увеличенное число склеритов во 2-4 годовых кольцах сибирского хариуса может считаться морфологическим маркером, отражающим специфику роста этого вида в среднем течении р. Енисей.

Литература:

[1]. Kristiansen H., Dølvig K. B., Environmental biology of fishes. V.47 (1), PP.43-50 (1996).

[2]. Книжин И.Б., [Журнал Сибирского федерального университета. Серия Биология](#). V.4(3). PP. 293-300 (2011).

Анализ равновесной денатурации бактериальной люциферазы двух типов

Д. В. Гульнов

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии СФУ

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Определение зависимости стабильности структуры белков от их аминокислотной последовательности остаётся актуальной научной проблемой современной биофизики. В данной работе было исследовано разворачивание мочевиной люцифераз *Photobacterium leiognathi* и *Vibrio harveyi*, принадлежащих, согласно филогенетическому анализу, к разным подсемействам бактериальных люцифераз [1]. Были использованы оптические методы, включающие абсорбционную спектроскопию кругового дихроизма, стационарную и время-разрешенную флуоресценцию, а так же электроферез в градиенте мочевины. Целью исследования являлось сравнение конформационной стабильности двух типов бактериальных люцифераз при денатурации мочевиной. Экспериментальные результаты были сопоставлены со структурными характеристиками белков, полученными вычислительными методами молекулярной динамики.

Было установлено, что оптическими методами могут быть обнаружены две стадии разворачивания из трех, описанных ранее в литературе [2]. Первый переход, соответствующий образованию неактивного димерного интермедиата люциферазы, происходит при концентрации мочевины < 2 М и может быть зарегистрирован по изменению характеристик флуоресценции белка (рис. 1). Второй переход – диссоциация субъединиц люциферазы, определяется только методом электрофереза в градиенте мочевины. Процесс разворачивания субъединиц люциферазы (третья стадия денатурации), происходящий при концентрации мочевины 3-5 М, оказался хорошо виден с помощью всех использованных методов. Сопоставление полученных экспериментальных данных с результатами молекулярного моделирования показало, что разница кривых перехода для двух белков обусловлена их структурой и не является следствием разного количества триптофановых остатков в их составе.

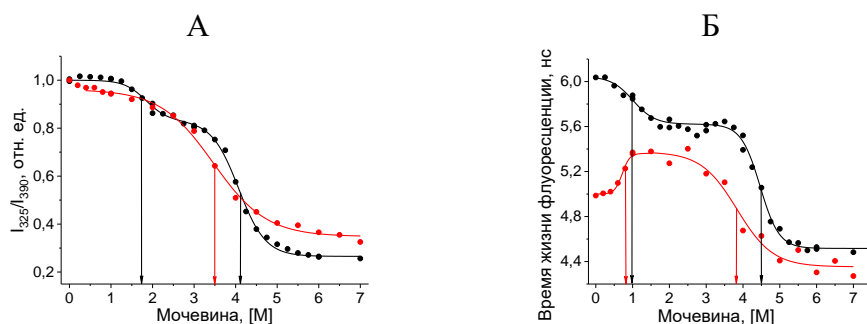


Рис. 1. Зависимость отношения I_{325}/I_{390} (А) и времени жизни (Б) флуоресценции люциферазы *Photobacterium leiognathi* (черный) и *Vibrio harveyi* (красный) от концентрации мочевины. Стрелками обозначены середины соответствующих переходов.

По результатам исследования был сделан вывод, что пути разворачивания одинаковы для двух белков, но люцифераза *Photobacterium leiognathi* характеризуется большей стабильностью по сравнению с люциферазой *Vibrio harveyi*, поскольку её переходы происходят при более высокой (на $\sim 0,5$ М) концентрации мочевины.

Литература:

- [1] A. A. Deeva, E. A. Temlyakova, A. A. Sorokin, E. V. Nemtseva, V. A. Kratasyuk, Bioinformatics, V.32(20), PP.3053-3057 (2016).
- [2] J. K. Inlow, T. O. Boldwin, Biochemistry. V.41(12), PP.3906–3915 (2002).

Действие малых доз γ -излучения на проростки семян лука *Allium cepa*

А. В. Зуева

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Пойма реки Енисей загрязнена техногенными радионуклидами в следствие многолетней деятельности Горно-химического комбината, что послужило причиной повышения радиоактивного фона в этом районе [1]. Обоснование негативного эффекта малых доз радиации (менее 200 мГр) базируется на беспороговой линейной концепции, которая составляет основу стандартов радиационной защиты, предполагая экстраполяцию биологических эффектов ионизирующего излучения высоких доз на низкие [2]. Цель работы – оценить действие γ -излучения разной длительности в малых дозах на ростовые и цитогенетические показатели корневой меристемы проростков семян лука *Allium cepa*. Результаты эксперимента (таблица) показали, что наиболее чувствительным цитогенетическим параметром является частота встречаемости абберрантных клеток. Достоверные отличия от контроля зарегистрированы при дозе от 20 мГр для 24 и 48 часов облучения соответственно.

Таблица 1. Значения показателей радиационного повреждения ($m \pm SE$)

Время, ч	Доза, мГр	Длина корней, мм	МИ, %	МЯ, %	Абберрантные клетки, %
24	0.01	9.9 \pm 1.7	7.9 \pm 0.7	0.6 \pm 0.4	1.2 \pm 0.3
	10	11.0 \pm 2.3	7.3 \pm 1.0	1.2 \pm 0.2	3.0 \pm 0.5
	20	9.8 \pm 1.9	8.1 \pm 0.8	1.2 \pm 0.4	3.3 \pm 0.6*
	70	9.9 \pm 1.3	9.3 \pm 0.6	5.3 \pm 0.5*	13.1 \pm 1.5*
48	0.01	21.2 \pm 3.2	7.1 \pm 0.9	0.3 \pm 0.1	1.0 \pm 0.3
	20	20.0 \pm 4.0	6.5 \pm 0.7	0.5 \pm 0.1	3.0 \pm 0.4*
	50	20.3 \pm 3.5	7.6 \pm 0.8	0.8 \pm 0.2	4.8 \pm 0.8*
	200	17.6 \pm 3.4*	8.4 \pm 0.9	4.3 \pm 0.7*	26.8 \pm 4.4*

* – Статистически значимое отличие от контрольного уровня ($p < 0.05$).

Микроядерный индекс (МЯ) показал достоверные различия только для самых больших уровней доз, используемых в эксперименте (70 и 200 мГр). При этом дозовая зависимость частоты клеток с микроядрами и хромосомными нарушениями имела линейный характер (Рис. 1). Угнетение роста корней наблюдалось при облучении проростков в течение двух суток при дозе 200 мГр. Подавления митотической активности (МИ) не выявлено (Рис. 1).

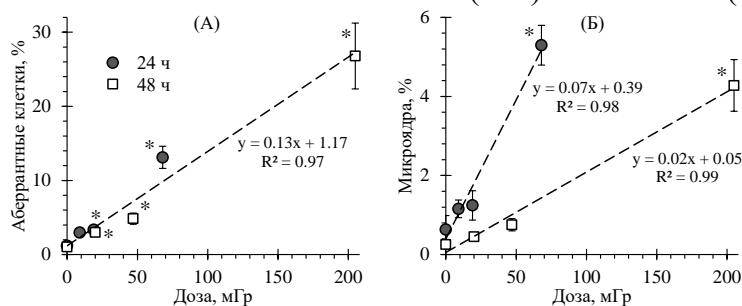


Рис 1. Зависимость частоты нарушений на стадии ана-телофазы (А) и частоты микроядер (Б) в клетках от поглощённой дозы при разной длительности γ -облучения.

* – Статистически значимое отличие от контрольного уровня ($p < 0.05$).

Полученные данные могут быть использованы в целях прогнозирования радиэкологического состояния окружающей среды.

Литература:

- [1] A. Bolsunovsky, D. Dementyev, E. Trofimova. J. Environ. Radioact. V.211, PP.106100 (2020).
- [2] S. I. Zaichkina, O.M. Rozanova, G.F. Aptikaeva et al. Nonlinearity Biol. Toxicol. Med. V.2(3), PP.213221 (2004).

Оценка физико-механических и структурных свойств полигидроксиалканоатов для биоинженерии твердых тканей.

К. А. Кистерский

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

3D-принтер, сделали возможным создание объемных изделий по виртуальным моделям. Ежегодно отмечается тенденция введения технологий аддитивного производства в медицинскую биоинженерию, в частности для ортопедии и травматологии. 3D-печать аналогов поврежденных костных органов и хрящей основано на применении биологически совместимых материалов для аддитивных производств. Присутствие биоразрушаемости, как одного из свойств таких биоматериалов, позволяет не только осуществить персонафицированное восстановление анатомической целостности органов опорно-двигательной системы, но дает возможность реализовать направленную истинную тканевую регенерацию, являющуюся целью тканевой инженерии.

Класс полимеров полигидроксиалканоаты (ПГА) относится к активным материалам с полной биосовместимостью, биодegradацией и остеоиндукцией, а широкий диапазон термопластичности [1] позволяет использовать их в качестве филамента для 3D-принтера послойного наплавления материала. При постепенной биодegradации объемных изделий из ПГА позволит новообразованной костной ткани формироваться по напечатанному «шаблону». Была проведена оценка структурных свойств ПГА при нескольких последовательных циклах термического воздействия на материал в процессе печати.

Исследована степень кристалличности используемой полимерной композиции поли-3-гидроксипропанат поли-3-гидроксивалерат (далее – ПГБВ) подвергнутой 4 циклам расплавления-стеклования. Согласно полученным данным оборудования Bruker D8 ADVANCE (Германия) степень кристалличности при этом увеличивается с 55% до 60%, а пики на дифрактограмме фазового состава значительно не изменяются.

Физико-механические свойства изделий из ПГБВ изготовлены согласно ГОСТ 12019-66 (Изготовление образцов для испытания из термопластов.) и изучены с использованием испытательной машины Instron 5665 и программного обеспечения BlueHill. Тестирование образцов на растяжение, изгиб и сжатие проходило согласно ГОСТ 11262-2017 (Пластмассы. Метод испытания на растяжение.), ГОСТ 4648-2014 (Пластмассы. Метод испытания на статический изгиб.), ГОСТ 4651-2014 (Пластмассы. Метод испытания на сжатие.). Проведен сравнительный анализ полученных данных, с использованием литературных данных для кости [2, 3].

Таблица 1 Сравнение физико-механических свойств ПГБВ и кортикальной ткани.

	Предельная нагрузка ПГБВ [МПа]	Модуль Юнга ПГБВ [GPa]	Предельная нагрузка кость [МПа]	Модуль Юнга кость [GPa]
Сжатие	41,78	1,17	133,00	16,10
Разрыв	31,35	1,08	193,00	22,27
Изгиб	54,96	2,17	223,80	10,95

Работа выполнена при поддержке ФСИ (грант 13533ГУ/2018), Лаборатории биотехнологии новых материалов СФУ и ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1]. Волова Т. Г. и др. Высокомолекулярные соединения. Серия А. V. 55. PP.775-775 (2013)
- [2]. Carter D. R., Spengler D. M. Clinical Orthopaedics and Related Research. V.135. PP.192-217 (1978).
- [3]. Brown T. D., Ferguson A. B. Acta Orthopaedica Scandinavica. V. 51. PP. 429-437 (1980).

Кинетическое исследование стадийности биолюминесцентной реакции, катализируемой бактериальной люциферазой

В. С. Кобзева

Сибирский Федеральный Университет

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Биолюминесцентные реакции – это ферментативные процессы, сопровождающиеся излучением света в видимом диапазоне. Интенсивность биолюминесценции в ходе реакции в нестационарном режиме достигает максимума за ~ 1 с, после чего экспоненциально затухает в течение следующих 6 - 60 с. Ранее было показано, что в ряде случаев наблюдается всплеск свечения, предшествующий основному максимуму интенсивности, на который приходится 1 - 2% от общего излучения света. [1] Это приводит к биэкспоненциальному спаду свечения, что говорит о существовании, помимо основного, дополнительного химического пути испускания света.

Целью работы было выявить механизм возникновения биэкспоненциального спада интенсивности биолюминесценции при нестационарной кинетике реакции, катализируемой бактериальной люциферазой. Кинетику регистрировали методом остановленного потока на анализаторе быстрых реакций SX-20 (Applied Photophysics).

На первом этапе исследования были получены кинетические кривые биолюминесцентной реакции при различных типах смешивания люциферазы *P. leiognathi* с FMNH₂ и додеканалем: люцифераза с FMNH₂ + альдегид, люцифераза с альдегидом + FMNH₂ и люцифераза + альдегид с FMNH₂. Было показано, что отклонение от моноэкспоненциального затухания света проявляется при любой последовательности смешивания реагентов, а значит, не может являться следствием неупорядоченного связывания ферментом субстратов. На втором этапе была исследована кинетика быстрой и медленной люцифераз [2], *P. leiognathi* и *V. harveyi* соответственно, в реакции с додеканалем и тетрадеканалем в качестве субстрата. При использовании додеканала наблюдали биэкспоненциальный спад свечения, в то время как в случае тетрадеканала – моноэкспоненциальный, независимо от типа люциферазы. На следующем этапе работы была исследована кинетика биолюминесценции при реакции интермедиата С4а-гидропероксифлавина с додеканалем. При этом варьировали время задержки запуска реакции от момента формирования С4а-гидропероксифлавина (23 - 301 с). Было установлено, что биэкспоненциальный спад свечения наблюдается для кинетической кривой, полученной через 23 с после формирования интермедиата, в то время как кривые, измеренные позже (через 32 - 301 с), характеризовались моноэкспоненциальным спадом свечения.

Таким образом, впервые были получены кинетические кривые с биэкспоненциальным спадом свечения для быстрой люциферазы *P. leiognathi*. Наличие всплесков свечения, как для медленных люцифераз *V. campbellii* и *V. harveyi* [1], так и для быстрой люциферазы *P. leiognathi*, заставляет усомниться в высказанной ранее гипотезе о том, что их причиной является примесь «быстрых» ферментов в препаратах «медленных» [1]. Полученные результаты позволяют предположить, что всплеск свечения, приводящий к биэкспоненциальному спаду, может быть обусловлен взаимодействием альдегида с двумя различными формами С4а-гидропероксифлавина, образованными вследствие конформационных перестроек люциферазы. В рамках данной гипотезы можно объяснить моноэкспоненциальный спад свечения, наблюдаемый при использовании тетрадеканала в качестве субстрата, тем, что С4а-гидропероксифлавин не успевает образовать различные формы ввиду высокого сродства фермента к данному альдегиду.

Литература:

- [1] Suadee C. et al. Luciferase from Journal of biochemistry. V.142, PP.539-552 (2007).
[2] Deeva A. A. et al. Bioinformatics. V. 32, PP. 3053-3057 (2016).

Температурная инактивация бутирилхолинэстеразы в крахмальном и желатиновом гелях

В. И. Лоншакова-Мукина

*Сибирский Федеральный Университет,
Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН*

Бутирилхолинэстераза (ВChE) – фермент из класса гидролаз, катализирующий реакцию гидролиза бутирилтиохолина до холина и масляной кислоты. ВChE, наряду с ацетилхолинэстеразой, активно применяется для мониторинга ингибиторов холинэстераз в воздухе, воде, почве и биологических жидкостях. Недостаточная стабильность ВChE при её использовании и хранении ограничивает применение данного фермента. Одним из основных способов получения стабильных ферментных препаратов ВChE является её иммобилизация в различные носители, в том числе полимеры природного происхождения крахмал и желатин. Целью настоящей работы является определение механизмов термической инактивации бутирилхолинэстеразы в крахмальном и желатиновом гелях для определения возможности использования данных полимеров в качестве стабилизаторов фермента.

Активность ВChE определяли по методу Элмана. Регистрацию оптической плотности раствора проводили при длине волны 412 нм. По изменению оптической плотности во времени вычисляли скорость гидролиза бутирилхолинэстеразой субстрата S-бутирилтиохолина йодистого, по полученным результатам делали вывод об активности фермента.

Проведен анализ температурной инактивации ВChE в температурном диапазоне 50-64 °С. Установлено, что кинетика термоинактивации ВChE в 3%-ом крахмальном и 1,4 %-ом желатиновом гелях имеет принципиально одинаковый характер на всем диапазоне исследуемых в работе температур. Наблюдается кинетика термоинактивации второго порядка, включающая два различных механизма инактивации ВChE, последовательно сменяющих друг друга и протекающих с разными скоростями (быстрой и медленной стадий). Быстрая стадия соответствует процессу диссоциации тетрамерного фермента на мономеры, а медленная стадия – процессу денатурации образовавшихся мономеров.

Используя уравнение Эйринга (1), были рассчитаны активационные параметры процесса температурной инактивации.

$$\ln \left(\frac{k_i}{T} \right) = - \frac{\Delta H^\ddagger}{R} \cdot \frac{1}{T} + \frac{\Delta S^\ddagger}{R} + \ln \frac{k_B}{h}, \quad (1)$$

где k_i константа скорости, k_B постоянная Больцмана, h постоянная Планка, T абсолютная температура, R универсальная газовая постоянная.

Для каждой стадии были рассчитаны энтальпия активации ΔH^\ddagger и энтропия активации ΔS^\ddagger . Энтальпия активации ΔH^\ddagger для быстрой и медленной стадий температурной инактивации ВChE в крахмальном геле составила 61 ± 3 , и 22 ± 2 ккал/моль соответственно, энтропия активации ΔS^\ddagger составила 136 ± 12 и -2.03 ± 0.05 кал·К⁻¹·моль⁻¹, соответственно. Аналогично значения ΔH^\ddagger для ВChE в желатиновом геле составили 58 ± 6 и 109 ± 11 ккал/моль, и значения ΔS^\ddagger составили 149 ± 16 и 262 ± 21 кал·К⁻¹·моль⁻¹ соответственно для быстрой и медленной стадий температурной инактивации ВChE. Таким образом, крахмальный гель оказывает больший стабилизирующий эффект на ВChE при длительном воздействии высоких температур по сравнению с желатиновым гелем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки, проект № 18-44-242003.

Анализ структурных характеристик белка, влияющих на время жизни флуоресценции: пример карбоксиангидразы быка

А. А. Никифоров

Сибирский Федеральный Университет,

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Среди собственных флуорофоров белка триптофан обладает наибольшей π -системой, что делает его спектры поглощения и испускания сдвинутыми в длинноволновую область и более удобными для регистрации. Известно, что параметры флуоресценции триптофана чрезвычайно чувствительны к его локальному окружению, и существует много факторов, которые оказывают влияние на эти параметры [1].

Объектом данного исследования была карбоксиангидраза Б быка (BCA II). Для дикого типа этого белка и ряда мутантных форм (L222E, A53C/A76C, D188C/K211C) детально изучены характеристики триптофановой флуоресценции, но структурные факторы, определяющие вариацию этих характеристик, до сих пор не установлены [2].

Цель работы – выявление корреляций между структурно-динамическими характеристиками BCA II и значениями времени жизни собственной флуоресценции этого белка. Влияние окружения триптофановых остатков в структуре белка на параметры флуоресценции оценивалось с помощью методов молекулярного моделирования.

Вычисление молекулярной динамики структуры белка карбоксиангидразы (PDB ID: 1v9e) проводили с помощью программного пакета GROMACS 5.1.4 с использованием силового поля CHARMM36. Моделируемая система представляли собой бокс размером $83,26 \times 83,26 \times 83,26 \text{ \AA}$ с расположенным в центре белком. Все остальное доступное пространно заполняли молекулами воды (17351 шт.). Трехмерная структура мутантов BCA II была получена путем аминокислотной замены в программном пакете Swiss-Pdb Viewer. Время вычисления молекулярной динамики дикого типа карбоксиангидразы и ее мутантов составило 30 нс. Для оценки стабильности BCA II было рассчитано среднеквадратичное отклонение (RMSD) C_{α} -атомов. Сравнение подвижности триптофановых в белке дикого типа и мутантах проводили с помощью параметра среднеквадратичной флуктуации (RMSF) C_{α} -атомов каждого из аминокислотных остатков.

Моделирование показало, что существенных различий в конформации белка и подвижности основной цепи карбоксиангидразы для дикого типа и исследованных мутантных форм не наблюдается. Был сделан вывод, что подвижность триптофанов в диком типе и всех мутантных формах остается постоянной и не влияет на интенсивность и время жизни флуоресценции. Это также косвенно указывает на то, что окружение триптофановых остатков в мутантах и диком типе белка одинаково. Были выявлены потенциальные тушители в ближайшем окружении каждого триптофана дикого типа белка, рассчитана плотность упаковки триптофановых остатков исследованных белков. Корреляции параметров флуоресценции с плотностью упаковки микроокружения триптофанов не наблюдалось. Рассчитана эффективность безызлучательного переноса энергии между ближайшими триптофанами в структуре карбоксиангидразы (W4 и W15). На основе рассчитанного значения можно говорить о паре W4/W15 как о едином флуоресцирующем центре белка. Рассчитана доступность растворителю триптофановых остатков. Установлено, что наблюдается корреляция между временем жизни флуоресценции триптофана и его доступностью растворителю.

Литература

[1] P. R. Callis, J. of Mol. Structure. 1077. (2014)

[2] E. V. Nemtseva, M. A. Gerasimova, T. N. Melnik, and B. S. Melnik, PloS one, 14(1) (2019).

Получение гибридного белка сурвивин-обелин и исследование его свойств как биоспецифического биолюминесцентного репортера

Н. С. Панамарев

Сибирский Федеральный Университет,
Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Сурвивин - наименьший белок в группе белков-ингибиторов апоптоза (16,5 kDa), который также принимает участие в регулировании деления клеток и способствует ангиогенезу. Сурвивин почти отсутствует в нормальных тканях взрослого человека, но при этом сверхэкспрессируется практически во всех злокачественных опухолях человека. В связи с этим, сурвивин рассматривается как потенциальный биомаркер для выявления раковых заболеваний [1]. В Институте биофизики СО РАН в течение более 30 лет разрабатывают методы высокочувствительной диагностики на основе биолюминесцентных белков-репортеров, одним из которых является Ca^{2+} -регулируемый фотопротеин обелин. Целью нашего исследования было получение и исследование свойств гибридного белка, содержащего домены сурвивина и обелина (Surv-OL). В результате была получена генетическая конструкция, кодирующая гибридный белок сурвивин-обелин и получен его высокоочищенный препарат с помощью экспрессии в рекомбинантных клетках *E.coli*. Показано, что в полученном гибриде оба составляющих домена обладают свойствами исходных белков: Ca^{2+} -зависимой биолюминесценцией обелина и аффинностью сурвивина к соответствующим антителам (anti-Surv Ab). Таким образом, полученный белок может быть использован в качестве репортера для выявления сурвивина в конкурентном биолюминесцентном микроанализе.

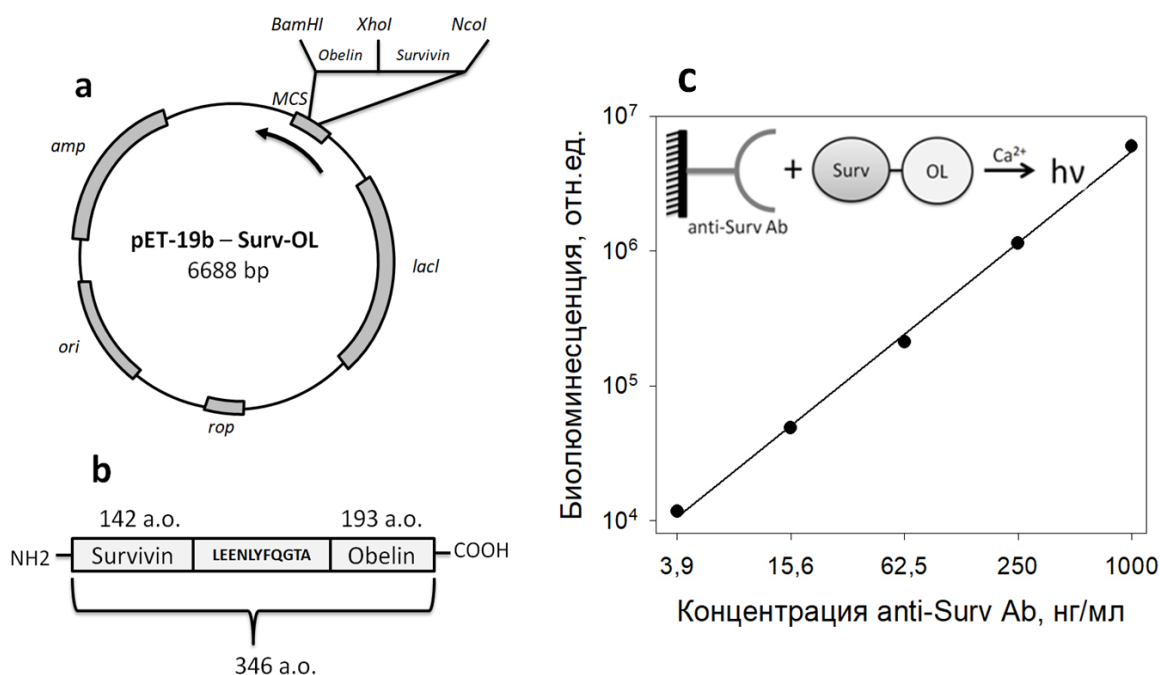


Рис.1. Плазмида, сконструированная для получения гибридного белка (а); состав гибридного белка, показана аминокислотная последовательность линкера между доменами исходных белков (б); зависимость биолюминесценции гибрида Surv-OL от концентрации антител к сурвивину (anti-Surv Ab), сорбированных на поверхности микроплатшета, схема анализа показана вверху(с).

Литература:

[1] Jaiswal P K, Goel A, Mittal R D. Indian J. Med. Res. V.141, PP.389-397 (2015).

Получение и изучение каталитических свойств композита на основе нановолокон оксида алюминия и нанодIAMAZOV

Е. Д. Посохина

*Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН,
Сибирский Федеральный Университет*

Наличие широкого спектра химически активных групп и микропримесей металлов на поверхности детонационных нанодIAMAZOV открывает возможности их использования в создании систем биомедицинской аналитики [1,2]. В то же время, аналитические системы, в которых сенсорный элемент фиксирован на/в твердой матрице, предпочтительнее при практическом применении. Данное исследование состояло в получении композита из нанодIAMAZOV (сенсорный элемент) и нановолокон оксида алюминия (матрица) и оценке его каталитических свойств при тестировании фенола в водной среде.

В работе сенсорным элементом являлись модифицированные нанодIAMAZOV (МНА) со средним размером кластеров в гидрозольях 55 нм, полученные из детонационных нанодIAMAZOV российского производства (ООО «Реал-Дзержинск», Россия) оригинальным способом [3]. Матрицей являлись нановолокна оксида алюминия (НВОА) диаметром 10–15 нм и длиной до нескольких микрометров (ANF Technology, Эстония).

Композит получали при смешивании водных суспензий НВОА и МНА при весовом соотношении компонентов 5:1 и инкубации смеси при постоянном перемешивании в течение 15 мин при 32 °С [4]. Путем вакуумной фильтрации полученной смеси через фторопластовый фильтр с диаметром пор 0,6 мкм из композита формировали диски. Контрольные диски из НВОА получали аналогично. Для придания дискам структурной стабильности в водных растворах проводили их термообработку при 300 °С.

Показано, что при использованных условиях эксперимента частицы МНА нацело и прочно связываются с НВОА. Из данных СЭМ следует (Рис. 1), что полученный композит имеет сетчатую структуру, в которой кластеры нанодIAMAZOV распределены по поверхности нановолокон оксида алюминия.

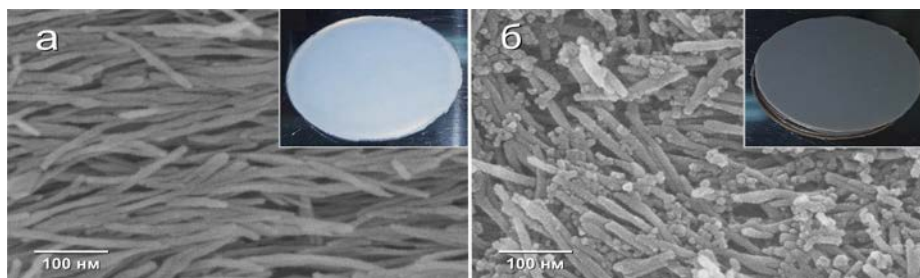


Рис. 1. Внешний вид и СЭМ-изображения структуры дисков из НВОА (а) и из композиционного материала НВОА-МНА (б).

Установлено, что МНА в составе композита обеспечивают его каталитическую активность в реакции окислительного азосочетания (фенол – 4-аминоантипирин – H_2O_2) с образованием цветного продукта. Это открывает перспективы для его использования в мониторинге загрязнений водной среды фенолом. В модельных экспериментах показана применимость композита для многократного тестирования фенола в водных образцах.

Литература:

- [1] N. Ronzhin, A. Baron, A. Puzyr et al., *Modern Clin. Med. Res.* V.2, PP.7 (2018).
- [2] N.O. Ronzhin, A.P. Puzyr, V.S. Bondar, *J Nanosci Nanotechno.* V.18, PP.5448 (2018).
- [3] A.P. Puzyr, V.S. Bondar, RU Patent No. 2252192. 2005. Bull. No. 14.
- [4] N.O. Ronzhin, E.D. Posokhina, E.V. Mikhlina et al., *Dokl. Chem.* V.489, PP.267 (2019).

Состав и содержание жирных кислот в якутской лошади и её основных кормовых ресурсах

К. Н. Стоянов

Сибирский Федеральный Университет,
Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Республика Саха (Якутия) располагается на территории вечной мерзлоты. Для Якутии характерны экстремальные условия: короткий вегетационный период, высокий уровень солнечной радиации, периодические летние заморозки и низкие зимние температуры – всё это оказывает влияние на флору и фауну региона. Якутская лошадь – потомок байкальской лошади, уникальность которой заключается в быстрой скорости адаптации к таким неблагоприятным условиям. Одной из возможных причин адаптации является особенность питания животных - осенняя нажировка лошадей происходит на зеленом криокорме. Зелёный криокорм это вторично отросшая после выедания или кошения зелёная масса растений, выросших при низких положительных температурах.

Цель работы: изучить состав и содержание жирных кислот (ЖК) в пище и в тканях якутских лошадей.

Основу рациона лошадей составляют злаки. Нами были исследованы два вида злаков – овес посевной (*Avena sativa*) и костреч безостый (*Bromopsis inermis*). Данные растения выращивались в естественных условиях. Контрольная группа овса посевного была засеяна в мае, а опытная группа – в июле. Опытную группу костреча безостого скашивали после весеннего роста и оставляли отрастать, а контрольную группу оставляли нескошенной. Опытные группы растений вегетировали при низких положительных температурах представляя собой зелёный криокорм. Лошади питались зеленым криокормом в течение 3 месяцев перед сбором тканей (подкожный жир, мышцы, печень). Суммарное содержание липидов в листьях обоих растений увеличивалось на протяжении всего времени роста, как у контрольной, так и у опытной группы. В опытной группе обоих видов растений было обнаружено увеличение суммы липидов: у овса посевного в 1.2 раза и у костреча безостого в 2.4 раза. Основу жирнокислотного состава костреча безостого, составляли три ЖК: 16:0, 18:3n-3, 18:2n-6, суммарное содержание которых достигало 90%. Основными ЖК в тканях лошадей были: 18:1n-9, 18:0, 16:0, 18:2n-6, 18:3n-3. Ткани лошадей накапливали ЖК по-разному, а именно, 18:3n-3 было больше в жировой и мышечной тканях, а 18:2n-6 в печени. Такая вариабельность в накоплении ЖК очевидно объясняется разными функциями этих ЖК в лошадях. Вероятно 18:2n-6 используется как предшественник для синтеза физиологически ценной 20:4n-6, а 18:3n-3 - больше связана с энергетическими потребностями животных. Высокое содержание 18:3n-3 и 18:2n-6, вероятно, помогает якутской лошади успешно существовать в экстремальных условиях Якутии [1].

Данное исследование финансировалось государственным заданием, тема «Биологически активные вещества в экологических, биотехнологических и медицинских системах»; и тема «Биологически активные вещества в трофических цепях водных экосистем как важнейшие компоненты рациона человека и маркеры для сохранения рыбных ресурсов».

Применение опилочно-почвенных субстратов разного типа в условиях лесопитомника э/х «Погорельский Бор»

Г. И. Антонов

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

В связи с возросшим объемом рубок в Красноярском крае обостряется проблема рециклинга отходов на предприятиях лесного сектора. Мелкие отходы лесопиления пока еще не нашли широкого применения, но уже имеют перспективные направления использования в виде экологических удобрений [1, 2]. Коллективом лаборатории микробиологии и экологической биотехнологии Института леса им. В.Н. Сукачева СО РАН в ходе экспериментов по биоконверсии древесно-опилочной массы разработаны варианты удобрительных композиций на основе опилочно-почвенной смеси, содержащих микродозы различных азотных удобрений. Выполненные ранее исследования указали на необходимость сочетания микопродукта на основе хвойных опилок с азотными удобрениями для стимулирования роста и развития саженцев сосны и ели [3, 4]. В результате были получены два вида опилочно-почвенных субстратов с добавлением микродоз азотных удобрений (ОПС) и микопродукта дереворазрушающих микромицетов (ОПСМ) [5]. Выяснилось, что после применения ОПСМ на питомнике экспериментального хозяйства «Погорельский Бор» с микродозами диаммофоски саженцы сосны обыкновенной оказались выше максимум на 62 см (53%), чем на участке с ОПС. Саженцы ели сибирской, произрастающие на ОПСМ, были также выше на 30-58%, чем саженцы того же возраста на ОПС с микродозами минеральных удобрений. Внесение микопродукта в ОПС также привело к увеличению приростов верхушечной почки главного побега саженцев сосны и ели после применения данного субстрата в течении сезона. В случае микокомпостирования с диаммофоской и аммонийной селитрой прирост увеличился на 45-51%. Данная технология в перспективе позволит обеспечить круговорот органического вещества в системе «лес-почва» и поспособствует экологически-ориентированному ведению лесного хозяйства на территории Российской Федерации, что необходимо в рамках концепции устойчивого управления лесами.

Выражаю благодарность заведующей лаборатории микробиологии и экологической биотехнологии Гродницкой И.Д. и старшему научному сотруднику Пашеновой Н.В. за многочисленные консультации по теме исследования и ценные советы во время рабочего процесса, также огромная благодарность сотрудникам, в комплексе с которыми продолжаются исследования: Кондаковой О.Э. и Барченкову А.П.

Литература:

- [1] Ларченко В.М., Джафаров Т.А. Вестник КрасГАУ. V.9, PP.206-210 (2013).
- [2] Медведев С.О., Соболев С.В., Степень Р.А. Возможности рационального использования древесных отходов в Лесосибирском лесопромышленном комплексе: монография. – Красноярск, СибГТУ, 2010, 85 с.
- [3] Антонов Г.И., Сорокин Н.Д., Барченков А.П., Кондакова О.Э. Лесоведение. – 2018. – №1, С. 56-64
- [4] Кондакова О.Э. Использование микроорганизмов для выращивания хвойных и улучшения биогенности почв в лесных питомниках Сибири: автореф. дис... канд. биол. наук: 03.02.08 – экология. Томск, 2019. 24 с.
- [5] Патент на изобретение № 2681572 от 11.03.2019 Опилочно-почвенный субстрат для оптимизации плодородия почв / Г.И. Антонов, Н.В. Пашенова, И.Д. Гродницкая.

Ассоциация генетического полиморфизма *IL13 rs1800925* с риском развития детской бронхиальной астмы

М. А. Малинчик

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Бронхиальная астма (БА) является многофакторным заболеванием, поскольку на его развитие влияют как факторы окружающей среды, так и генетическая предрасположенность человека [1, 2]. В отношении данного заболевания изучено более 1400 генов, включая гены цитокинов и их рецепторов. Интерлейкин-13 (IL-13) является центральным медиатором, участвующим в патогенезе бронхиальной астмы [3]. Цель настоящего исследования направлена на оценку ассоциации между полиморфизмом *rs1800925* гена *IL13* и бронхиальной астмой с различным уровнем контроля и степенью тяжести заболевания у детей европеоидного происхождения Восточной Сибири.

Объектами исследования были дети с бронхиальной астмой (n=202) и контрольная выборка г. Красноярска (n=135), куда были включены дети и взрослые с отсутствием БА и аллергии в анамнезе. Все больные дети были расформированы по группам: тяжелая/среднетяжелая БА с неконтролируемым течением заболевания (НБА, n=107) и среднетяжелая БА с контролируемым течением заболевания (КБА, n=95). Материалом исследования послужила ДНК, выделенная сорбентным методом, для генотипирования *IL13 (rs1800925)* был применен метод RT-PCR. Сравнение частот аллелей и генотипов осуществляли с помощью online-калькулятора, теста χ -квадрат. Отношение шансов (ОШ) с 95 %-ным доверительным интервалом (ДИ) было проведено для выявления связи между генетическими маркерами и фенотипами патологии.

Поскольку частота генотипов *CT* у больных среднетяжелой неконтролируемой БА и *TT* в группе с тяжелой БА статистически значимо выше по сравнению с контрольной группой (46,6% / 36,3%, 1,51 (1,03-2,19), $p=0,033$; 15,5% / 6,7%, OR 1,65 (1,06-2,56), $p=0,027$, соответственно), то были установлены генетические маркеры риска развития бронхиальной астмы у детей: генотип *CT* ассоциирован со среднетяжелой неконтролируемой БА, а генотип *TT* ассоциирован с тяжелой БА.

Полученные нами данные соответствуют результатам других авторов. Ранее выявлена связь между *rs1800925 IL13* и риском развития БА у детей, поскольку наблюдалось преобладание генотипов *CT* и *TT* в группе больных [4]. В метаанализе был определен аллель риска для полиморфизма *rs1800925 IL13* – *T**, так как носители этого аллеля имели повышенный риск развития БА [5]. Таким образом, результаты нашего исследования подтверждают, что *rs1800925 IL13* ассоциирован с риском развития, течения и прогрессирования патологии.

Выражаю свою искреннюю благодарность за помощь в осуществлении работы своим научным руководителям к.б.н. Смольниковой М. В. и д.м.н. Терещенко С. Ю., а также соавторам с.н.с. Горбачевой Н. Н.

Литература:

- [1] B.N. Lambrecht, H. Hammad, Nature Immunology, V.16, PP.1 (2015).
- [2] A. Sandford, T. Weir, P. Pare, American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine, V.153, PP.6 (1996).
- [3] E.L. Rael, R.F. Lockey, World Allergy Organization Journal, V.4, PP.3 (2011).
- [4] Z. Liu, P. Li, J. Wang, Q. Fan, P. Yan, X. Zhang, B. Han, International Medical Journal of Experimental and Clinical Research, V.11, PP.20 (2014).
- [5] H. Yang, H. Dong, Y. Dai, Y. Zheng, Respirology, V.16, PP.7 (2011).

Секция «Математическое моделирование»

Система тестов для сравнения методов численного решения уравнений движения искусственных спутников Земли

И. Р. Адаев

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН,
ИМиФИ СФУ

Работа посвящена сравнительному анализу методов численного интегрирования орбит искусственных спутников Земли (ИСЗ).

Нами отобрано несколько модельных задач с точными решениями, описывающих невозмущенное и возмущенное движение ИСЗ: 1) двумерная линейная задача, 2) двумерная и трехмерная задачи двух тел, 3) трехмерная ограниченная задача трех тел с компенсирующей силой, задаваемой таким образом, чтобы точное решение соответствовало задаче двух тел. Кроме того, для тестирования методов сравниваются численные решения задачи при прямом и обратном интегрировании по времени на нескольких витках орбиты ИСЗ.

На каждой тестовой задаче, имеющей точное решение, методы сравниваются по величине погрешности в направлении каждой координаты, а также ошибок, в радиальном, трансверсальном и бинормальном направлениях орбиты ИСЗ, соответствующей точному решению.

В работе рассматриваются линейные многошаговые методы: Адамс-Бэшфорта для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, схема предиктор-корректор метода Адамса, метод Адамса-Штермера для ОДУ второго порядка, схема предиктор-корректор метода Адамса-Штермера, симметричный метод для ОДУ второго порядка.

Для сравнения выбраны методы 8-го порядка точности. В расчетах используется библиотека `quadmath` языка Си для представления числа с четверной точностью.

В таблице 1 приведены ошибки каждого из методов для ограниченной задачи трех тел с компенсацией на момент времени, соответствующий 750 полным оборотам спутника. В качестве точного решения рассмотрена орбита ИСЗ со следующими параметрами: большая полуось $a=25500000,004$ м; эксцентриситет $e=0,0006800$; долгота восходящего узла $\Omega=120^\circ$; наклон орбиты $i=64,9^\circ$; аргумент перицентра $\omega=135,0000214^\circ$; средняя аномалия $M=32,6650111^\circ$, $\mu = 398602635087878, (78) \text{ м}^3/\text{с}^2$. Шаг интегрирования соответствует 1/512 орбиты ИСЗ, что соответствует 79,15 с.

Таблица 1. Ошибки численного интегрирования ограниченной задачи трех тел с компенсацией (м)

Вид ошибки	Симметричный	Адамс	Адамс предиктор-корректор	Штермер	Штермер предиктор-корректор
Радиальная	2,37E-08	8,00E-05	-1,93E-06	7,53E-06	-2,20E-07
Трансверсальная	1,12E-04	-1,70E-01	4,05E-03	-1,59E-02	4,54E-04
Бинормальная	-3,00E-08	4,53E-05	-1,08E-06	4,23E-06	-1,21E-07

Из таблицы видно, что симметричный метод точнее остальных даже без применения схемы предиктор-корректор, что приводит к его экономичности в смысле количества расчетов правой части на шаг интегрирования.

Научный руководитель – к. ф.-м. н., доцент Е. Д. Карпова.

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

Литература:

[1] G.D. Quinlan, S. Tremaine Symmetric multistep method for the numerical integration of planetary orbits, *Astron. J.* V. 100(5), P. 1694-1700 (1990).

Численное моделирование внутренних волн в соленом стратифицированном озере

О. С. Володько

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Экологическое состояние природных ресурсов вызывает тревогу мирового сообщества на всех уровнях: на уровне сохранения природы в отдельно взятом месте и решения этой проблемы в целом на Земле.

При решении задач сохранения качества водных ресурсов необходимо знать гидрофизические характеристики водоемов, от которых зависит распределение примеси и биоты, и таким образом определить экологический режим водоемов.

Исключительное положение озера Ши́ра как центра рекреационной зоны делает актуальным вопрос построения аппарата исследования течения в озере. Кроме того, в таком небольшом озере удобнее изучать гидрофизические процессы, характерные также и для более крупных водоемов.

Для численного моделирования течений в озере использовалась модель Regional Ocean Modeling System (ROMS) [1], которая ранее применялась для расчета течений как в глубоких, так и в неглубоких водоемах. Например, для исследования течений в Мексиканском заливе [2] и в прибрежной части полузамкнутого мелкого соленого водоема Бохо (Китай) [3].

В основе модели лежат уравнения трехмерного течения неоднородной жидкости в приближении гидростатики и Буссинеска. Модель позволяет учитывать ветровое воздействие, тепловые потоки и другие метеорологические данные. Численный алгоритм допускает распараллеливание с использованием технологий OpenMP и MPI.

В данной работе с учетом батиметрии, распределения температуры, солености и метеорологических данных, характерных для озера в летний период [4], исследованы внутренние волны в озере.

Регистрация наличия внутренних волн проводилась с помощью анализа возвышения свободной поверхности и вертикальных профилей температуры.

Показано, что при прохождении внутренней волны изменения температуры в литоральной зоне наиболее выражены в восточной мелководной части озера.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент Копманиец Л.А.

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

Литература:

[1] Сайт региональной океанической системы моделирования (ROMS). [Электрон. ресурс].

URL: <https://www.myroms.org> (дата обращения 12.05.2020).

[2] Barkan, R., McWilliams, J. C., Shchepetkin, A. F., Molemaker, M. J., Renault, L., Bracco, A., Choi, J. Submesoscale dynamics in the northern Gulf of Mexico. Part I: Regional and seasonal characterization and the role of river outflow. *Journal of Physical Oceanography*, V.47. № 9. P. 2325-2346 (2017).

[3] Zhou, F., Huang, D., Su, J. Numerical simulation of the dual-core structure of the Bohai Sea cold bottom water in summer. *Chinese Science Bulletin*, V. 54, № 23. P. 4520-4528 (2009).

[4] Метеорологический сайт rp5 [Электрон. ресурс]. URL: <https://rp5.ru/> (дата обращения 12.05.2020).

Исследование метеорологических условий Красноярска в январе-феврале 2020 года во время действия режимов НМУ

А. В. Дергунов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Проблема загрязнения атмосферы крупных городов мира стоит остро. Однако не только антропогенный фактор, но и природные процессы вносят вклад в создание неблагоприятных экологических условий. Например, температурная стратификация нижних слоев атмосферы может вызвать температурную инверсию, то есть слой теплого воздуха, ограничивающий вертикальное рассеяние вредных примесей в атмосфере [1].

По данным Министерства экологии и рационального природопользования Красноярского края в г. Красноярске в январе-феврале 2020 г. было установлено 3 периода НМУ: 10-13 января, 14-18 и 25-27 февраля (рис. 1). Эти периоды характеризуются почти штилевым ветром и концентрациями взвешенных в воздухе твердых частиц (PM), значительно превышающими среднесуточное ПДК (0.035 мг/м³).

В работе изучались метеоусловия в г. Красноярске в январе-феврале 2020 года по данным наземных постов наблюдения и метеоинформации модели прогноза погоды Global Forecast System (GFS). Использовалась информация о температуре воздуха на поверхности и высотах 750 и 1500 метров [2]. Данные о PM 2.5 и скорости ветра были получены на геопортале ИВМ СО РАН [3].

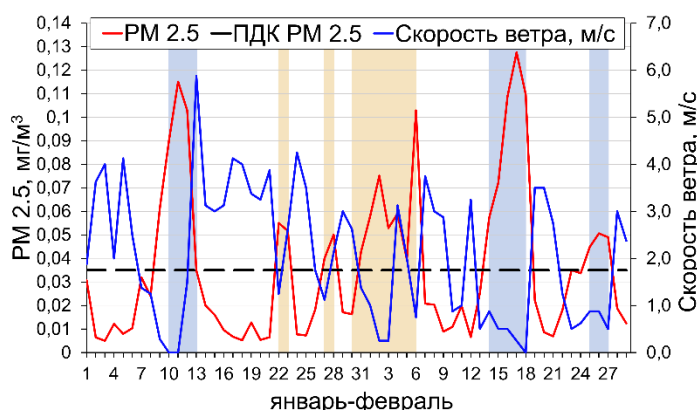


Рис. 1. Вариации концентрации PM 2.5 и скорости ветра над Красноярском в январе-феврале 2020 г. Пунктирной линией обозначен среднесуточный ПДК

На рис. 1 выделены периоды, когда концентрация PM 2.5 превышала ПДК, синим цветом отмечены официально установленные периоды НМУ, оранжевым – выявленные в результате анализа данных. Температурная инверсия над Красноярском фиксировалась в январе: 5, 7, 8, 10-13, 19, 22, 23, 27-29 и 31 числа; в феврале: 1-4, 6, 7, 13-18, 24, 25, 27 и 28 числа. Установлено, что преобладающий тип инверсии – приземный, ее верхняя граница расположена ниже 750 м.

Анализ метеорологических данных модели GFS способствует решению задач, связанных с изучением нижнего слоя атмосферы, его загрязнения, и может сыграть важную роль в более точном выявлении периодов НМУ и их прогнозировании.

Литература:

- [1] Смит, К. Основы прикладной метеорологии, Л.: Гидрометеиздат, С. 424 (1978).
- [2] NCEP GFS 0.25 Degree Historical Archive. [Электрон. ресурс]. URL: <https://rda.ucar.edu/datasets/ds084.1/> (дата обращения 02.03.2020)
- [3] Геопортал ИВМ СО РАН. Электрон. ресурс]. URL: <http://gis.krasn.ru/blog/> (дата обращения 02.03.2020)

Определение тематики интернет-ресурсов с помощью анализа данных логов прокси-сервера

Д. Ю. Донцов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Цель исследования – кластеризовать интернет-ресурсы (сайты) схожие по тематике, с помощью информации, извлеченной из логов посещаемости интернет ресурсов пользователями прокси сервера.

В качестве метода для группировки сайтов по темам было выбрано тематическое моделирование ввиду того, что оно хорошо подходит для работы с разреженными матрицами. При моделировании, терминами (словами) считались интернет-ресурсы, а под документами рассматривались периоды интернет-активности каждого пользователя.

Для определения периодов интернет-активности конкретного пользователя применялись различные эвристики, а также такие методы как “Floating window” и “Kernel Density Estimation”.

В результате работы был выполнен анализ 90 млн. записей логов прокси-сервера, которые включали информацию более чем о 30 тыс. интернет-ресурсов. Полученные кластеры сайтов были вручную проанализированы и было отмечено, что многие из них действительно объединяли интернет-ресурсы схожие по тематике. Для получения более точных и интерпретируемых результатов необходимо использовать выборку большего размера, причем наличие пользователей из разных сфер деятельности существенно повысит качество результирующих кластеров.

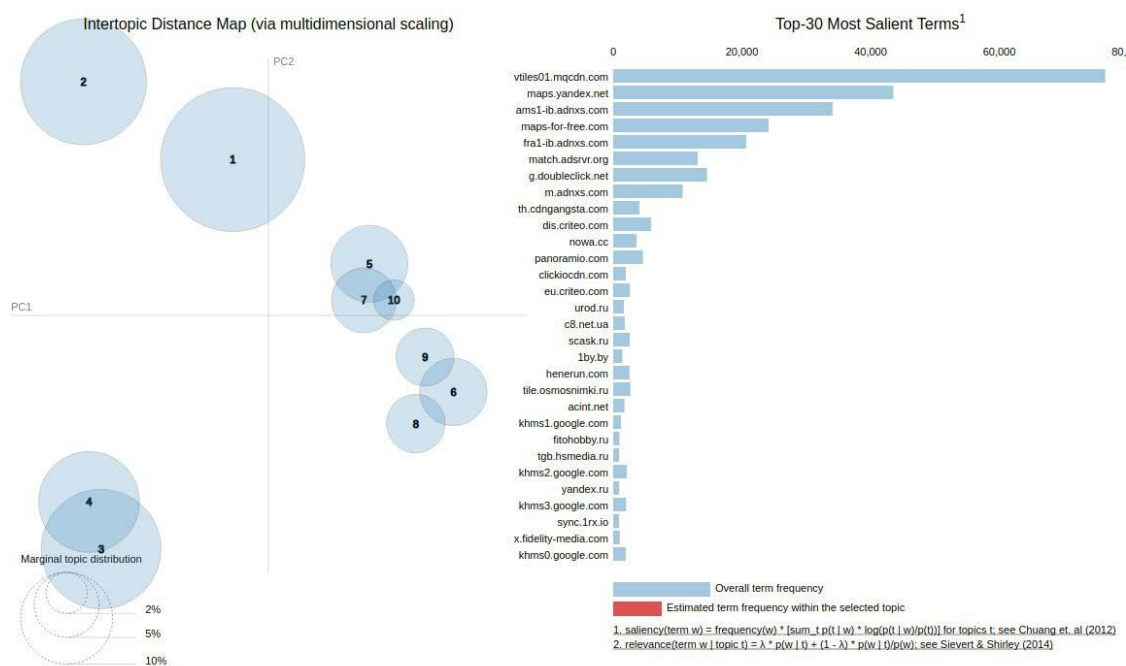


Рис. 1. Результат проекции 10 кластеров на две главные компоненты.

Литература:

- [1] D. Blei, A. Ng, and M. Jordan. Latent Dirichlet Allocation. Journal of Machine Learning Research, V. 3. P. 993–1022 (2003).
- [2] YC Chen, A Tutorial on Kernel Density Estimation and Recent Advances, ArXiv preprint [Интернет Ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/1704.03924>.
- [3] Susan Li, Topic Modelling in Python with NLTK and Gensim. [Электрон. ресурс]. URL: <https://towardsdatascience.com/topic-modelling-in-python-with-nltk-and-gensim-4ef03213cd21>.

Разработка и исследование математической модели импульсного сейсмоисточника

Е. А. Ефимов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

За счёт своей малогабаритности импульсные электромагнитные сейсмоисточники находят применение в труднодоступных местах для геологической разведки: тундра, тайга, районы с вечной мерзлотой. Благодаря своим конструктивным особенностям, установки такого типа способны эффективно преобразовывать потребляемую энергию в механическую [1].

Численная оценка энергетических зависимостей сейсмоисточника проведена при использовании комплексов программ для многопроцессорной вычислительной системы кластерной архитектуры. Рассматривается упрощённая модель грунта, для которого характерны только упругие свойства, а его структура либо однородная, либо плоскостная. Таким образом, можно перейти к осесимметричной задаче динамической теории упругости. При решении полученной системы уравнений используется метод двуциклического покомпонентного расщепления по пространственным переменным [2]. Для расщеплённых одномерных задач за основу берётся сеточно-характеристический подход [3].

При расчёте энергетических зависимостей возникает искусственная (схемная) диссипация энергии. Чтобы преодолеть это затруднение предлагается уточнить вычисленные энергетические зависимости по методу Рунге-Ромберга [4]. Это позволяет более достоверно рассчитать сейсмический КПД. На рисунке 1 представлен сейсмический КПД в зависимости от глубины для разных типов грунта, пунктирными линиями обозначена исходная зависимость, сплошными обозначена уточнённая.

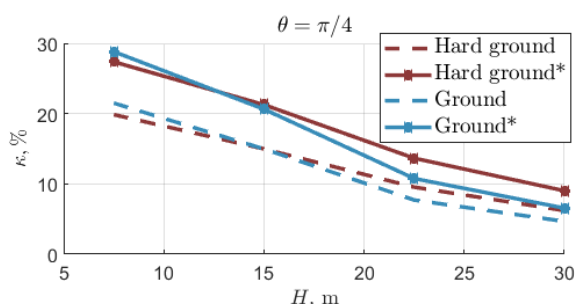


Рис. 1. Сейсмический КПД в зависимости от глубины.

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

Литература:

- [1] Детков В.А., Щадин П.Ю., Ивашин В.В. Импульсные электромагнитные сейсмоисточники "Енисей": особенности технического решения и применения, Приборы и системы разведочной геофизики, № 4, С. 30–33. (2007)
- [2] Г.И. Марчук. Методы расщепления, М.: Наука, С. 263 (1988).
- [3] С.К. Годунов. Уравнения математической физики, М.: Наука, С. 392 (1979).
- [4] Н.Н. Калиткин. Численные методы, М.: Наука, С. 512 (1978).
- [5] V.M. Sadovskii, O.V. Sadovskaya, E.A. Efimov Analysis of seismic waves excited in near-surface soils by means of the electromagnetic pulse source "Yenisei", Materials Physics and Mechanics V.42 P. 544-557 (2019)

Численный метод решения задачи о ценообразовании срочного американского опциона продаж

А. А. Ефремов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Задача о ценообразовании опционов американского типа активно развивается с середины 70-х гг. XX века. Стоимость американского опциона определяется путем решения линейной задачи комплементарности, основанной на дифференциальном операторе Блэка–Шоулза и ограничении на стоимость опциона [1]. В силу нелинейности задачи получение аналитического решения на ограниченном временном интервале невозможно [2], потому используются различные методы численного моделирования. Наряду с детерминистическими (конечно-разностные методы) и вероятностными классами методов (методы Монте-Карло), к решению задачи активно применяются гибридные методы на основе комбинации Лагранжева подхода (для аппроксимации оператора движения) и метода конечных разностей в Эйлеровых переменных (для аппроксимации эллиптического оператора). В данной работе излагается численный метод, построенный на комбинации лагранжевой аппроксимации и метода конечных элементов применительно к решению задачи о ценообразовании срочного американского опциона на продажу.

В координатах $(x, t) \in [0, \infty] \times [0, T]$ будем искать функцию $u(x, t)$, область определения которой разбивается неизвестной границей $\{s_0(t), t \in [0, T]\}$ на две подобласти $\Sigma_1 = \{(x, t) : x \geq s_0(t)\}$ и $\Sigma_2 = \{(x, t) : x < s_0(t)\}$. В Σ_1 функция $u(x, t)$ является решением параболического уравнения ($\sigma > 0$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\sigma^2}{2} x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + x \frac{\partial u}{\partial x} - ru = 0, \quad (x, t) \in \Sigma_1 \quad (1)$$

с начальным условием $u(x, T) = 0 \quad \forall x \in (K, \infty)$ на верхней границе $t = T$ и краевыми условиями

$$u(s_0(t), t) = K - s_0(t), \quad u(+\infty, t) = 0 \quad \forall t \in [0, T].$$

Для построения численной аппроксимации в (1) вводится некоторая ненулевая правая часть f . После декомпозиции получаем дифференциальные операторы

$$A_t u = \frac{\sigma^2}{2} x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ru = f_1, \quad \text{где} \quad f_1 = -\frac{\partial u}{\partial t} - rx \frac{\partial u}{\partial x} + f, \quad (2)$$

$$A_x u = \frac{\partial u}{\partial t} + rx \frac{\partial u}{\partial x} = f_2, \quad \text{где} \quad f_2 = -\frac{\sigma^2}{2} x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + rx + f. \quad (3)$$

Эллиптический оператор (2) аппроксимируется методом конечных элементов, конвективный оператор (3) – полулагранжевым методом.

Результаты численных экспериментов показали, что метод обладает первым порядком сходимости по времени и вторым порядком сходимости по пространству.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., чл.-корр. В. В. Шайдуров.
Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-61-46017).

Литература:

- [1] F. Black, M. Scholes. The pricing of options and corporate liabilities. Chicago Press: J. Polit. Econ. № 81. P. 637-659 (1973).
- [2] R. Merton. Theory of rational option pricing. USA: Theory of Valuation. P. 229–288 (1973).

Моделирование управления эвакуацией при пожаре из здания средней образовательной школы

С. А. Загарских

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Был проведен анализ нормативной документации на предмет проведения тренировочных эвакуаций и действий при пожаре. Таким образом выделен ряд проблем:

- нет нормативной документации, которая могла бы ответить на вопрос о том, как должен протекать процесс эвакуации в школе;
- персоналу даются лишь общие рекомендации (без привязки к конкретному зданию);
- эвакуацией детей необходимо управлять (не могут сами принимать решения, легко поддаются панике).

Для повышения качества обеспечения пожарной безопасности за счет проведения наглядного обучения безопасной эвакуации из здания школы можно применить следующий подход: разработать планы тренировочных эвакуаций, которые будут учитывать объемно-планировочные решения и динамику распространения ОФП в конкретном здании.

Вычислительный эксперимент является способом оценивания возможных сценариев развития событий при данных объемно-планировочных решениях. А в задачах пожарной безопасности, когда реальный эксперимент невозможен, единственным. С помощью компьютерного моделирования процессов развития пожара можно показывать влияние различных условий на исход эвакуации. На основе собранных данных возможно разработать эффективный план для обучения школьников и персонала безопасному покиданию СОШ. Учитывая популярные планировки школ, используем полевую модель развития пожара, так как в планировке школ присутствуют атриумы, лестницы, индивидуально-поточную – для моделирования эвакуации, поскольку контингент СОШ отличается физическими параметрами. Все расчёты выполнены в программном комплексе «Сигма-ПБ».

В качестве начальных данных была выбрана полная загрузка школы, площадь горизонтальной проекции, время начала эвакуации и скорость детей выбраны согласно Методике [1].

Расчетным путем было установлено, что для того, чтобы добиться безопасных условий эвакуации требуется уменьшить время начала эвакуации, и с помощью компьютерного моделирования было выявлено максимальное время, которое есть у людей, чтобы покинуть учебные классы.

Помимо этого, безопасной эвакуации можно добиться с помощью управления эвакуацией, можно избежать скоплений, тем самым уменьшив время эвакуации из здания и исключить попадание людей в область критических значений ОФП.

На основе анализа выполненных расчетов, можно сделать вывод о том, что движение кратчайшим путем, к ближайшему выходу из здания не всегда является безопасным, нужно понимать, сколько времени имеется на безопасную эвакуацию. В связи с этим необходимо повышать уровень подготовки персонала школы к управлению эвакуацией при пожаре путем инструктирования, делать это эффективно можно на основе рассчитанных сценариев для конкретного здания СОШ.

Литература:

[1] Об утверждении методики определения расчётных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности [Электронный ресурс]: Приказ МЧС от 30.06.2009. №382 ред. от 02.12.2015, Справочная правовая система «КонсультантПлюс». URL: <http://www.consultant.ru>.

Расширенная модель дискретного взаимодействия для точного моделирования оптических свойств атомарно малых наночастиц

В. И. Закомирный, В. С. Герасимов, А. Е. Ершов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Модель дискретного взаимодействия является одним из лучших подходов к моделированию оптических свойств плазмонных наночастиц с точным количеством атомов (Рис.1(а)). В данной работе нами был предложен новый метод, который позволил расширить область применимости модели дискретного взаимодействия. Благодаря использованию концепта плазмонной длины [1] и параметризации модели на основе экспериментальных данных [2], нам удалось не только получить убедительное соответствие экспериментальным результатам, но и применить ее к наночастицам с несферической геометрией – наностержням, нанокубикам и нанооболочкам. Было проведено сравнение спектральных зависимостей положения плазмонного резонанса (синие точки на Рис.1(б)) с результатами полученными другими авторами (оранжевая, зеленая и розовая линия на Рис.1(б)) а также с экспериментальными данными (черная кривая на Рис.1(б)).

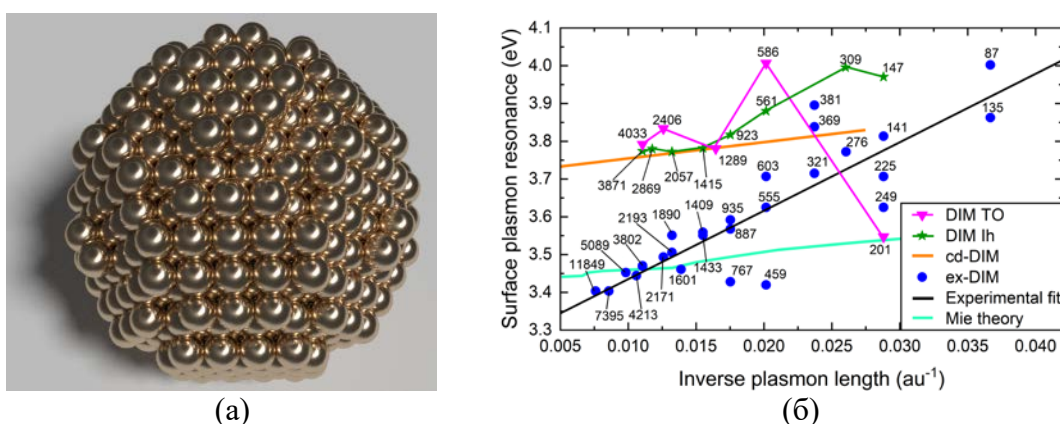


Рис. 1. Схематическое изображение кластера, состоящего из атомов серебра (а). Спектральные зависимости для положения плазмонного резонанса для сферических наночастиц серебра и сравнение результатов с другими моделями (б).

Полученные результаты является убедительным аргументом в пользу корректности использования расширенной модели дискретного взаимодействия для малых наночастиц с общим количеством атомов до 20000 [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 03-02-12111).

Литература:

- [1] E. Ringe, M. R. Langille, K. Sohn, J. Zhang, J. Huang, C. A. Mirkin, R. P. Van Duyne, L. D. Marks. Plasmon Length: A Universal Parameter to Describe Size Effects in Gold Nanoparticles, *J. Phys. Chem. Lett.* V. 3. P. 1479–1483 (2012).
- [2] J. A. Schöll, A. L. Koh, J. A. Dionne. Quantum plasmon resonances of individual metallic nanoparticles, *Nature*, V. 483. P. 421–427 (2012).
- [3] V. I. Zakomirnyi, Z. Rinkevicius, G. V. Baryshnikov, L. K. Sørensen, H. Ågren. Extended Discrete Interaction Model: Plasmonic Excitations of Silver Nanoparticles, *The Journal of Physical Chemistry C*, V. 123(47). P. 28867–28880 (2019).

Исследование влияния исполнения подвесного потолка на динамику распространения опасных факторов пожара при помощи компьютерного моделирования

Е. С. Калинин

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

На сегодняшний день особенно остро стоит проблема пожарной безопасности в общественных зданиях различного назначения. И вопрос организации подпотолочного пространства имеет непосредственное отношение к обеспечению безопасной эвакуации людей в случае пожара.

Для исследования динамики распространения опасных факторов пожара, в работе применялась CFD модель, реализованная в программном комплексе «Сигма ПБ» [1]. Ключевым преимуществом этой модели является то, что в данной модели нет ограничений в отношении геометрических характеристик здания, и, соответственно, есть возможность промоделировать наличие подвесных потолков любого типа.

В качестве примеров для исследования рассмотрены следующие возможные варианты исполнения подвесного потолка в крупном торгово-развлекательном центре:

- 1) комбинированный подвесной потолок с использованием сплошных частей и «грильято»;
- 2) подвесной потолок «грильято» (что с точки зрения распространения ОФП эквивалентно случаю отсутствия подвесного потолка);
- 3) сплошной подвесной потолок (без применения «грильято»; высота коридоров уменьшена на высоту подпотолочного пространства).

Расчетная область для всех трех вариантов идентична (включает в себя помещение с очагом пожара и пешеходные магистрали), за исключением устройства подвесного потолка и наличия пространства над подвесным потолком. Связь с внешней средой обеспечивается через выходы наружу на первом этаже здания, все проемы внутри здания на путях эвакуации открыты, что обеспечивает максимальное распространение ОФП по объему расчетной области [2]. Условия на ограждающие конструкции адиабатные. Начальная температура внутри и снаружи расчетной области принята 20°C. Работа системы противодымной вентиляции не учитывалась. Горючая нагрузка принята с одинаковыми характеристиками в каждом случае.

Анализируя полученные результаты, можно увидеть сильное влияние исполнения подвесного потолка на динамику распространения ОФП, которым нельзя пренебречь. Таким образом, можно сделать вывод о том, что подвесной потолок может служить элементом противодымной защиты здания, но может и способствовать более быстрому задымлению путей эвакуации. А проанализировать такое влияние подвесного потолка на блокирование путей эвакуации возможно только с применением вычислительного моделирования распространения ОФП.

Литература:

- [1] Техническое руководство «Сигма ПБ» 4.00 [Электрон. ресурс]. URL: https://3ksigma.ru/wp-content/uploads/2017/12/technik_manual_v2017_Sigma.pdf (дата обращения 30.03.2020)
- [2] Приказ МЧС от 30.06.2009. №382 ред. от 02.12.2015 «Об утверждении методики определения расчётных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности» [Электрон. ресурс]. URL: <http://docs.cntd.ru/document/902167776> (дата обращения 30.03.2020)

Численное моделирование разделения бинарной смеси с аномальным эффектом термодиффузии в цилиндрической колонне

С. В. Козлова

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

В последние десятилетия термодиффузионная колонна (вертикальный слой между твердыми плоскими стенками или поверхностями коаксиальных цилиндров, поддерживаемыми при постоянных температурах) является эффективным инструментом для анализа эффекта Соре (эффекта термодиффузии) и измерения коэффициентов термодиффузии. Надежные измерения коэффициентов могут быть выполнены только при условии устойчивого конвективного течения в колонне. Конвективная неустойчивость может быть вызвана аномальным эффектом Соре, при которой более тяжелые компоненты смеси накапливаются в верхней части колонны.

В работе представлен теоретический анализ устойчивости разделения бинарной смеси в цилиндрической колонне при аномальном эффекте Соре. Исследование выполнено совместно с Университетом Мондрагона (Испания), где проводятся экспериментальные наблюдения [1], которые показывают, что в цилиндрической колонне возможно устойчивое разделение в некотором диапазоне приложенной разности температур. Данный результат пока не объяснен теоретически.

Для теоретического исследования устойчивости было выполнено трехмерное численное моделирование смеси этанол – вода с концентрацией этанола 22.04 %. Данная смесь обладает эффектом аномальной термодиффузии в диапазоне концентрации этанола до 30 % [2]. Моделирование выполнено для двух колонн высотой 0.42 м и зазорами между стенками 1.54 мм (колонна I) и 1.93 мм (колонна II), а также отношениями радиусов цилиндров 0.756 и 0.622 соответственно. Эксперимент [1] был проведен для колонны II. Физические свойства смеси при средней температуре 25°C и приложенные разности температур между стенками были взяты из эксперимента.

Результаты численных расчетов были сопоставлены с точным решением задачи о нестационарном разделении смеси в цилиндрической колонне [3]. Как показывают расчеты, результаты для двух колонн зависят от ширины зазора и могут также зависеть от отношения радиусов цилиндров. Для колонны II результаты показывают, что разделение является устойчивым для всех разностей температур только в численном расчете, но не в эксперименте. Численное моделирование для колонны I выявило неустойчивость конвективного течения при всех приложенных разностях температур.

Научный руководитель – д. ф.-м. н., в. н. с. ИВМ СО РАН Рыжков И. И. Работа выполнена в соавторстве с проф. М. М. Боу-Али (PhD, Университет Мондрагона, Испания).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки (проект № 18-41-243005).

Литература:

- [1] Bou–Ali M., Ecenarro O., Madariaga J. et al. Stability of convection in a vertical binary fluid layer with an adverse density gradient, *Phys. Rev. E*. V. 59. PP. 1250–1252 (1999).
- [2] P. Kolodner, H. Williams, C. Moe. Optical measurement of the Soret coefficient of ethanol/water solutions, *J. Chern. Phys.* V. 88. № 10. PP. 6512–6524 (1988).
- [3] S. V. Kozlova, I. I. Ryzhkov. The study of transient separation of multicomponent mixtures in a cylindrical thermogravitational column, *Int. J. Heat and Mass Transf.* V. 126. PP. 660-669 2018).

Методы оценки качества атмосферного воздуха по спутниковым данным

К. В. Краснощеков

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Город Красноярск является одним из самых загрязнённых городов России. Аэрозоли или взвешенные в воздухе твердые частицы (PM) оказывают влияние на окружающую среду и здоровье человека [1]. Мониторинг PM основан в основном на наземных измерениях. Сеть наземных станций мониторинга существует в Красноярске, но точечные измерения не дают информации о пространственном распределении PM в масштабе районов города. Эта и другие причины привели к усилиям по оценке PM с использованием методов спутникового дистанционного зондирования.

Целью работы является рассмотреть возможные методы оценки качества воздуха, используя спутниковые данные над городом Красноярском.

Обычно для оценки качества воздуха по спутниковым данным используют параметры Aerosol Index (AI) и Aerosol Optical Depth (AOD).

AI – качественный показатель, который указывает на наличие в воздухе частиц, поглощающих излучение в ультрафиолетовом диапазоне. Значение AI можно получить, используя данные с приборов OMI и OMPS. Данные AI имеют грубое пространственное разрешение, которое не позволяет оценить распределение загрязняющих веществ в воздухе внутри города, но AI нечувствителен к облачности и снежному покрову [2].

AOD – это интегрированное атмосферное рассеивание излучения аэрозолями в вертикальном столбе атмосферы, которое используется для оценки PM [3]. Этот параметр пропорционален количеству частиц в воздухе и зависит от их массовой концентрации. Для получения данных по AOD необходимо отсутствие облаков и снега, который покрывает территорию Красноярска треть года или более. Но при этом он обладает пространственным разрешением до 1-го километра (продукт MAIAC).

Для того чтобы сопоставить спутниковые данные по AOD с наземными измерениями PM_{2.5}, используется формула из [3]:

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

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

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

Литература:

[1] Y. J. Kaufman, D. Tanré, O. Boucher. A satellite view of aerosols in the climate system, Nature. V. 419 (6903). P. 215 (2002).

[2] Y. Zhang. Evaluation of the performance of Suomi-NPP OMPS nadir mapper products using station measurements and OMI data, Journal of Applied Remote Sensing. V. 12. No. 4. P. 042602 (2018).

[3] C. Lin et al. Observation of PM_{2.5} using a combination of satellite remote sensing and low-cost sensor network in Siberian urban areas with limited reference monitoring, Atmospheric Environment. C. 117410. (2020).

Математическое моделирование ионной проводимости в нанопористых мембранах: сравнение между 1D и 2D моделями

А. И. Кром

ИМиФИ СФУ

Мембранные процессы используются во многих областях промышленности, таких как разделение смесей и получение чистых веществ, производство энергии, определение количественного состава смесей и др. Ряд таких процессов основывается на явлении переноса ионов через мембрану, возникающего, в частности, под действием внешнего электрического поля. Если поверхность мембраны является электрически проводящей, то транспортом ионов можно управлять путем изменения заряда стенок пор мембраны [1].

В работе рассматривается модель движения раствора электролита через мембрану, разделяющую два резервуара с заданной концентрацией соли, которые поддерживаются при различных потенциалах. Возникающее при этом электрическое поле вызывает движение ионов электролита через мембрану. В рамках модели мембрана представляется в виде массива цилиндрических нанопор, поэтому достаточно рассчитать транспорт ионов через одну пору. Для вычисления проводимости необходимо знать потоки ионов и раствора, которые, в свою очередь, определяются через значения концентрации, давления и потенциала с помощью системы уравнений Навье-Стокса, Нернста-Планка и Пуассона в стационарном случае. На основе данных уравнений строится двумерная модель пространственного заряда [2], от которой можно перейти к одномерной модели равномерного потенциала при условии, что радиус нанопоры меньше длины Дебая [3]. Уравнения модели решались численно с помощью программы на языке C++.

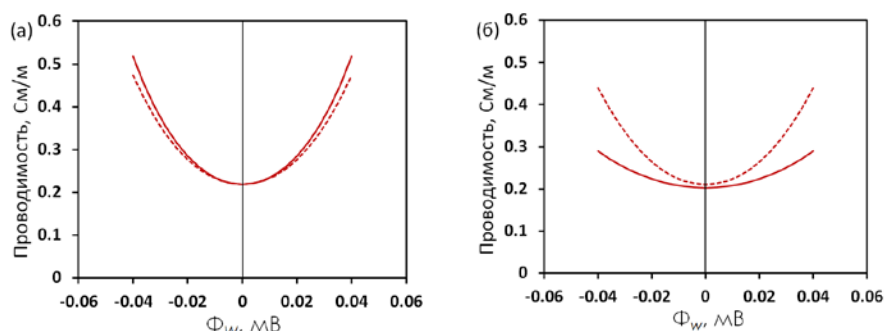


Рис. 1. Зависимость проводимости от поверхностного потенциала. Сравнение расчётов по 1D (пунктирная линия) и 2D (сплошная линия) моделям для нанопор радиуса 1 нм (а) и 10 нм (б).

На рис. 1 представлены кривые зависимости ионной проводимости от поверхностного потенциала. Из графиков видно, что проводимость возрастает вместе с увеличением абсолютного значения поверхностного потенциала. Данные, полученные на основе 1D и 2D моделей, хорошо согласуются для нанопор малого радиуса (1 нм), однако для больших нанопор (10 нм) 1D модель приводит к завышенным значениям проводимости.

Научный руководитель – д. ф.-м. н., в. н. с. ИВМ СО РАН Рыжков И. И.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта «Математическое моделирование процессов синтеза проводящих нано-пористых мембран и их транспортных свойств по отношению к ионам» № 18-48-242011.

Литература:

- [1] D.V. Lebedev, V.S. Solodovnichenko et al. Petroleum chemistry V. 58. P. 474–481(2018).
[1] P.B. Peters, R. Van Roij, M.Z. Bazant, P.M. Biesheuvel. Phys. Rev. E. V. 93. 053108 (2016).
[3] L. Zhang, P.M. Biesheuvel, I.I. Ryzhkov. Physical Review Applied V. 12. 01403 (2019).

Спектральный анализ сейсмических данных и разделение частот для выявления нефтегазовых залежей

А. С. Кругляков

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Флюидная резонансная сейсморазведка (ФРС) – инновационная технология прямого прогноза наличия в геологической среде нефтегазовых залежей на основе регистрации низкочастотными сейсмоприемниками вынужденных колебаний флюидных систем под влиянием энергии резонансов гравитационных приливов [1]. Технология ФРС не имеет аналогов, так как использует в качестве источника воздействия на геологическую среду энергию резонансов гравитационных приливов в Земной коре.

В результате изучения специфики исходных данных, опробования различных алгоритмов и программ спектрального анализа в качестве основного программного продукта для расчёта спектров (спектральной плотности зарегистрированного сейсмоприемниками сигнала) был принят алгоритм расчёта «Adaptive, sine multitaper power spectral density estimation» [2], реализованный на языке программирования R. С его помощью выполнена обработка исходных записей в резонансные дни для каждого пункта наблюдения. На рисунке 1 представлен выборка интервалов записей сигналов в резонансные дни, который осуществлялся интерпретатором на основе анализа изменений формы спектров (в интервале частот от 0,2 до 10,0 Гц) в резонансный и без резонансный период.

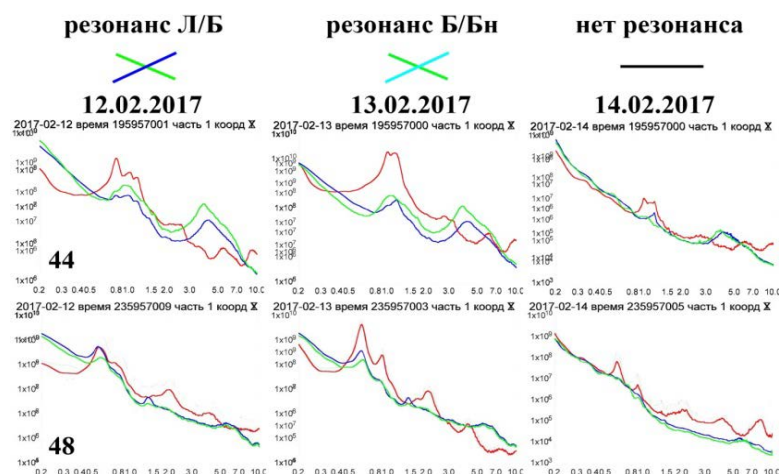


Рис. 1. Пример выделения из записей интервалов времени, соответствующих максимальной реакции флюидных систем в геологическом разрезе на резонансы гравитационных приливов

Технология ФРС позволила получить (в отличие от данных структурной сейсморазведки 2D-ОГТ) информацию не только о флюидонасыщенности, но также о разрывных нарушениях на уровне потенциально нефтегазоносных объектов. Отсюда следует, что технология ФРС может эффективно дополнять сейсмические данные для снижения рисков бурения «пустых» скважин.

Научный руководитель – д.т.н., в.н.с. К. В. Симонов.

Работа выполнена в рамках базового проекта № АААА-А18-118011890022-1.

Литература:

- [1] В. Г. Сибгатулин, В. А. Перетокин, А. А. Кабанов. Технология флюидной резонансной сейсморазведки для прямых поисков нефтегазовых залежей // Технологии сейсморазведки, Новосибирск: ИНГГ СО РАН, № 3, С. 28–37 (2016)
- [2] J. Capon. High-resolution frequency-wavenumber spectrum analysis, Proceedings of the IEEE, V. 57(8), P. 408-1418 (1969). Перевод: Кейпон Дж. Пространственно-временной спектральный анализ с высоким разрешением, ТИИЭР, Т. 57, № 2, С. 59-69 (1969).

Использование javascript-библиотек в подсистеме визуализации экологических данных

М. И. Малимонов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

На сегодняшний день в Красноярске проблема загрязнения воздуха находится на одном из первых мест. Городская экологическая обстановка продолжает ухудшаться и ее изменения негативно отражаются на здоровье жителей нашего города. Большинство красноярцев находятся в неведении относительно состояния экологии в городе и не могут объективно оценить её. Единственно доступный и понятный всем индикатор загрязнения – появление или исчезновение смога над Красноярском. В связи с этим актуальнейшей целью является создание информационного сервиса, который бы позволил получить всем заинтересованным лицам информацию о состоянии воздуха.

Предлагаемый нами сервис, для отображения экологических данных, основан на постах мониторинга. Все измерения состояния атмосферного воздуха осуществляются с помощью этих постов, располжённых по всему городу в количестве 20 штук. Данные приходят с периодичностью 1-2 минуты и агрегируются по времени с разными периодами (20 минут, 30 минут, 1 час, сутки и т.д.). Посты мониторинга позволяют фиксировать следующие данные: температура, влажность, давление, концентрацию взвешенных частиц. Сервис разработан с помощью языка программирования Javascript с использованием различных Javascript-библиотек: Dline, Nvd3, d3, Openlayers, Bootstrap, JQuery.

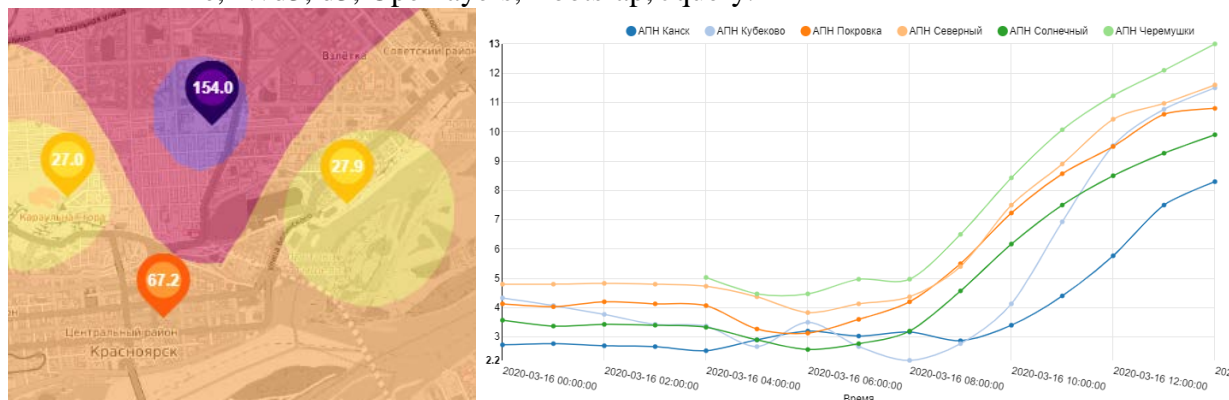


Рис. 1. Использование библиотеки Dline для построения градиента распространения PM2.5. и график температуры воздуха на Nvd3

Для управления всей отображаемой информации существует меню пользователя, в котором можно указать период и дату, указать какие именно данные выводить и выбрать посты мониторинга для отображения.

Литература:

- [1] Murray S. Pro D3.js: Use D3.js to Create Maintainable, Modular, and Testable Charts. P.201 (2019).
- [2] М.И. Малимонов. Программные средства для интерактивной визуализации экологических данных, сборник: Открытая конференция молодых учёных ИВМ СО РАН по математическому моделированию и информационным технологиям. С. 30-32 (2019).
- [3] О.Э. Якубайлик, В.В. Заворуев, М.И. Малимонов, А.А. Пушкарев. Пространственный анализ загрязнения атмосферы Красноярска. сборник: Обработка пространственных данных в задачах мониторинга природных и антропогенных процессов (SDM-2019). С. 491-496 (2019).

Сравнение оценок сейсмической опасности от отечественного и зарубежного программного обеспечения

В. А. Миронов

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Вероятностный анализ сейсмической опасности (ВАСО) – один из основных этапов в инженерно-сейсмологических изысканиях. Поэтому выбор инструмента для проведения ВАСО – программного обеспечения, является актуальной задачей для получения корректных оценок сейсмической опасности. Настоящая работа посвящена сравнению отечественного программного обеспечения (ПО) EAST-2016 [1], современного европейского OpenQuake Engine и канадского EqHaz для выполнения ВАСО.

Для сопоставления результатов программ была подготовлена относительно простая модель зон возникновения очагов землетрясений (ВОЗ), состоящая из одного домена и одного линеамента. Для расчета сейсмической опасности, а именно значений пикового ускорения грунта (PGA), использовалась модель затухания, разработанная российским ученым Аптикаевым Ф. Ф. в 2010 году [2]. Для вычисления сейсмической опасности была задана расчетная сетка вокруг зон ВОЗ с шагом 5 км. На рисунке представлены графики PGA для периода повторяемости сотрясений 5000 лет для линии, проходящей поперек модели зон ВОЗ от отечественного и зарубежного ПО.

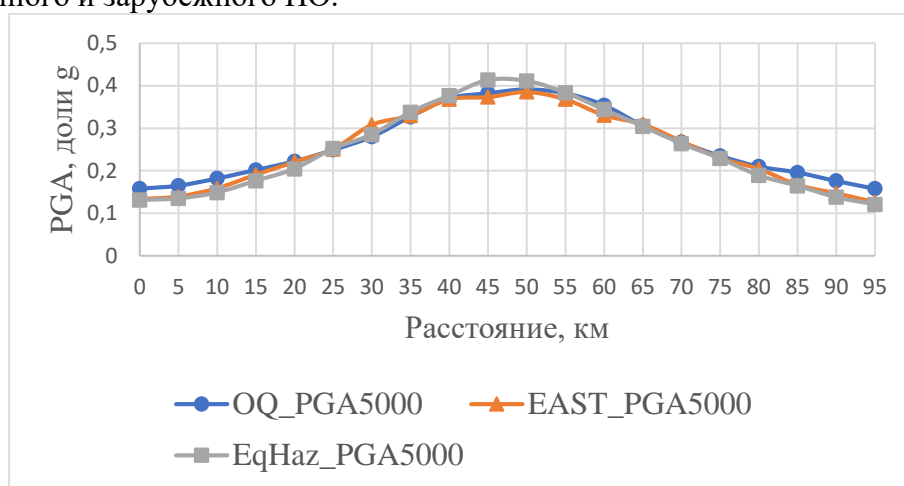


Рис. 1 – Графики PGA, полученные разным ПО

Полученные данные показали, что отклонение значений пиковых ускорений грунта составляет 0,04 доли g, что менее 10% от максимального значения PGA. Основными причинами разности результатов являются, во-первых, задание в зарубежных ПО модели затухания в табличном виде, в то время как в EAST-2016 расчет выполняется через формулы. Во-вторых, разные алгоритмы генерации очагов землетрясений. В целом, полученные результаты хорошо согласуются между собой, а видимые различия являются незначительными, что говорит о достоверности оценок сейсмической опасности, полученных отечественным ПО.

Научный руководитель – д.т.н., в.н.с. К. В. Симонов.

Работа выполнена в рамках базового проекта № АААА-А18-118011890022-1.

Литература:

[1] А. Д. Завьялов, С. А. Перетокин, Т. И. Данилова, Н. С. Медведева и К. Н. Акатова. Общее сейсмическое районирование – от карт ОСР-97 к картам ОСР-2016 и картам нового поколения в параметрах физических характеристик, Вопросы инженерной сейсмологии, Т. 45, № 4. С. 47–68 (2018).

[2] Ф. Ф. Аптикаев Инструментальная шкала сейсмической интенсивности. М.: Наука и образование, С. 176 (2012).

Пример применения компьютерного моделирования эвакуации с ледовой арены при пожаре

В. А. Моисейченко

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Одним из рискообразующих факторов на стадионе, связанных с обеспечением безопасности людей, является особенность организация трибунного пространства. Оно делится на сектора, которые зачастую изолированы друг от друга ограждениями (отсечками), что затрудняет переход из одного сектора в другой.

Влияние такого планировочного решения на процесс эвакуации со стадиона можно оценить с применением компьютерного моделирования.

Для исследования была построена 3D-модель стадиона, произведено моделирование распространения опасных факторов пожара и эвакуации. В качестве программного обеспечения использовался программный комплекс «Сигма ПБ» [1], в котором реализована модель вычислительной гидродинамики для расчёта распространения ОФП [2], и индивидуально-поточная модель для моделирования движения людей (эвакуации) [3]. В качестве объекта исследования служит многофункциональный спортивно-зрелищный комплекс в городе Красноярске, рассчитанный на 2539 зрителей.

Анализ результатов моделирования показал, что объект имеет ряд «узких» мест, которые можно выявить только с помощью компьютерного моделирования распространения ОФП и эвакуации. При сценарии пожара в гардеробе на втором этаже люди, находящиеся на одном из секторов восточной трибуны, из-за отсечек не могут перейти к другому выходу (люку) по трибуне. У них есть только один выход, который блокируется опасными факторами пожара до окончания эвакуации. В данном случае безопасный путь с течением времени стал опасным. Убрав одно из ограждений, разделяющих трибуну на сектора, появляется возможность направлять людей вдоль трибун к другому выходу. Таким образом удалось избежать попадания людей в опасную зону.

Результаты моделирования можно применять для обучения персонала управлению эвакуацией.

Литература:

- [1] Литвинцев К. Ю., Кирик Е. С., Дектерев А. А., Харламов Е. Б., Малышев А. В., Попел Е. В. Расчетно-аналитический программный комплекс «Сигма ПБ» по моделированию развития пожара и эвакуации, *Пожарная безопасность*, № 4. С. 51–59 (2016).
- [2] Дектерев А.А., Гаврилов А.А., Литвинцев К.Ю., Амельчугов С.П., Серегин С.Н. Моделирование динамики пожаров в спортивных сооружениях, *Пожарная безопасность*, № 4. С. 49-58 (2007).
- [3] Кирик Е.С., Малышев А.В. Тестирование компьютерных программ по расчету времени эвакуации на примере модуля SigmaEva, *Пожарная безопасность*, № 1. С. 78-85 (2014).

Применение свёрточных функций и быстрого преобразования Фурье к анализу нуклеотидных последовательностей

А. А. Молявко

*Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН,
ИМиФИ СФУ*

Задача поиска повторов в символьных последовательностях является одной из актуальных задач в области биоинформатики [1]. Мы предлагаем новый метод для поиска точных или почти точных повторов в символьных последовательностях на примере нуклеотидных последовательностей.

В основе предлагаемого метода лежит преобразование исходных символьных последовательностей в набор двоичных последовательностей и вычисление свёртки последних с помощью быстрого преобразования Фурье (БПФ). Последующий анализ полученных результатов позволяет определить наличие совпадений в исходных последовательностях. Основным преимуществом данного метода является скорость его работы, которая достигается за счёт применения БПФ. Последовательности длины порядка 10^7 сравниваются за считанные секунды. Кроме того, алгоритм легко распараллеливается. Однако пока существуют проблемы в интерпретации результатов, поскольку в некоторых случаях можно утверждать, что совпадение в исходных последовательностях точно присутствует, но невозможно его локализовать.

На рис. 1-2 приведены примеры результатов работы, разработанной нами программы. Они представляют собой графики свёрточных функций, где по оси ординат указано значение свёртки. На рис. 1 в одну из последовательностей искусственно внедрен участок второй последовательности. Отчетливый «скачок» справа сигнализирует о наличии в исследуемых последовательностях совпадающего участка. На рис. 2 во внедрённый участок было добавлено (путем вставки) несколько символов, и, как можно заметить, исходный пик разделился на два. Это говорит как раз о наличии подобной вставки или выпадения, т.е. наличия неточного совпадения фрагментов последовательностей.

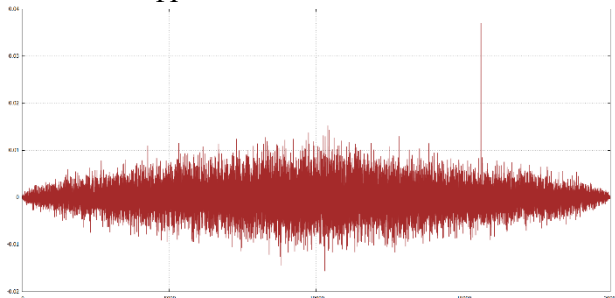


Рис. 1. Точное совпадение



Рис. 2. Вставка

Продолжается работа над проблемой локализации обнаруженных совпадений, для чего предлагается использовать алгоритмы, предложенные в работах [2,3].

Работа выполнена под руководством д.ф.-м.н. В. В. Шайдурова, д. ф.-м. н. М. Г. Садовского, к. ф.-м. н., Е. Д. Кареповой. Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631).

Литература:

- [1] D. Gusfield. Algorithms on strings, trees, and sequences: computer science and computational biology. Cambridge university press (1997).
- [2] S. P. Tsarev, M. Y. Senashova, M. G. Sadovsky: Fast algorithm for Vernier search of long repeats in DNA sequences with bounded error density. International Conference on Algorithms for Computational Biology, Springer. P. 88-99 (2018).
- [3] S. P. Tsarev, M. G. Sadovsky: New error tolerant method for search of long repeats in DNA sequences. International Conference on Algorithms for Computational Biology, Springer. P. 171-182 (2016).

Моделирование плоского напряженного состояния многослойной пластины из волокнистого композита

И. Е. Петраков

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Композитные материалы обладают уникальными свойствами, что обуславливает их широкое применение в промышленности. Одним из таких свойств является разномодульность и разнорочность композита и конструкций из композитного материала [1].

Рассматриваемые в данном исследовании композитные пластины представляют собой пакет, состоящий из нескольких слоев, каждый из которых является однонаправленным композитным материалом, армированным под определенным углом. Для получения модели такого материала был использован обобщенный реологический метод [2].

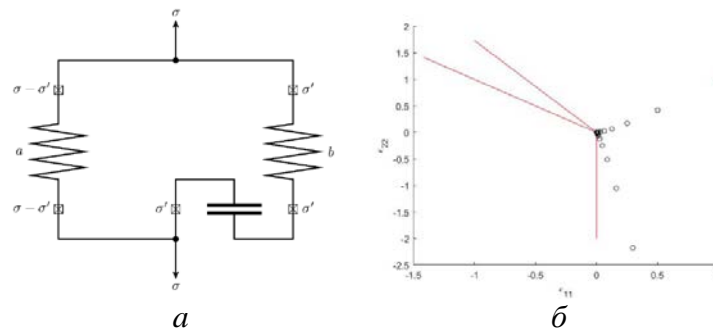


Рис. 1. Реологическая схема разномодульного упругого композита (а), пример работы алгоритма Удзавы (б).

На основе реологической схемы, изображенной на рисунке 1, было получено следующее определяющее уравнение:

$$\sigma = (a + b) : \varepsilon - b : \Pi_b(\varepsilon),$$

где σ и ε – тензоры напряжений и деформаций, a и b – тензоры модулей упругости. Для расчетов требуется вычислить проекцию $\Pi_b(\varepsilon)$ тензора деформаций на конус допустимых состояний. По теореме Куна-Таккера задача сводится к поиску седловой точки лагранжиана

$$L(\varepsilon) = (\varepsilon - \varepsilon_0) : b : (\varepsilon - \varepsilon_0) + \lambda G \varepsilon,$$

в котором G – матрица ограничений, λ – вектор множителей с неотрицательными компонентами. Для этого был реализован алгоритм Удзавы [3], пример работы которого представлен на рисунке 1.б, для пластины, состоящей из трех слоев одинаковой толщины с углами армирования 0, 30 и 45 градусов.

В результате работы алгоритма получен тензор напряжений по заданному тензору деформаций, что позволяет использовать данный алгоритм при решении краевых задач плоского напряженного состояния многослойных композитных пластин методом конечных элементов.

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

Литература:

- [1] С. К. Голушко и Ю. В. Немировский. Прямые и обратные задачи механики упругих композитных пластин и оболочек вращения, М.: Физматлит, С. 432 (2008)
- [2] О. В. Садовская и В. М. Садовский. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред, М.: Физматлит, С. 368 (2008)
- [3] Р. Гловински, Ж. -Л. Лионс и Р. Трёмольер. Численное исследование вариационных неравенств, М.: Мир, С. 576 (1979)

Методы и программное обеспечение для представления и анализа геопространственных данных оперативного мониторинга

А. А. Пушкарев

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Загрязнение воздуха в городе Красноярске является одной из самых обсуждаемых тем последних лет. В связи с этой проблемой в городе действуют несколько систем мониторинга воздуха, измеряющие показатели по различным загрязняющим веществам. Системы предоставляют оперативные данные по загрязнению и некоторую оценку общего состояния воздуха на своих веб-сайтах в виде точек на карте. Для визуальной оценки состояния воздуха хорошо подходят непрерывные карты распределения загрязнения. Однако в существующих системах данная функция не реализована.

Для построения непрерывной карты распределения необходимо разработать алгоритм интерполяции, позволяющий учитывать неоднородность рельефа местности. За основу взят метод обратно взвешенных расстояний (ОВР) [1], т.к. он является одним из самых простых и часто используемых. Метод ОВР использует среднее взвешенное значение по всем исходным точкам, где весом является обратное значение квадрата расстояния от текущей точки до искомой. Изменяя степень, в которую возводится квадрат расстояния, можно изменять уровень влияния каждой исходной точки на искомую. Именно на изменении показателя степени основан разрабатываемый алгоритм.

Для того чтобы динамически менять показатель степени, необходимо определить какие препятствия лежат на пути от каждой исходной точки до искомой. Для этого используется вспомогательная матрица (маска), содержащая значения, которые будут влиять на показатель степени. В качестве маски подразумевается использование цифровой модели рельефа. На каждой итерации алгоритма прослеживается путь от исходных точек к искомой и определяется, какие ячейки маски лежат на этих путях. Данная операция производится по алгоритму Брезенхем [2]. После чего сравнивается значение каждой ячейки маски, лежащей на пути, с ячейкой, в которую попадает исходная точка. В зависимости от разницы между этими значениями к степени прибавляется или отнимается некоторое число (параметр перепада высоты), которое задается в виде константы. Таким образом, формула нахождения значения в каждой ячейке выглядит следующим образом:

$$C = \frac{\sum_{i=0}^n P_i * d_i^{-(e+w_i)}}{\sum_{i=0}^n d_i^{-(e+w_i)}},$$

где C – значение в искомой ячейке, n – количество исходных точек, P_i – значение исходной точки, d_i – расстояние от точки до центра искомой ячейки, e – базовое значение степени, которое задается вручную, w_i – сумма всех повышающих коэффициентов на пути от точки до искомой ячейки.

Описанный выше метод, а также алгоритм построения изолиний и изоповерхностей Marching Squares [3] реализованы в формате JavaScript библиотеки, что позволяет использовать данный функционал в веб-браузере и на сервере под управлением Node.JS.

Литература:

- [1] А. И. Павлова. Анализ методов интерполирования для создания цифровых моделей рельефа, *Автометрия* № 2. – Т. 53, С. 86–94 (2017).
- [2] Д. Роджерс. Алгоритмические основы машинной графики, М.: Наука, С. 54-63 (1989).
- [3] А. А. Пушкарев. Построение изолиний по регулярной сети данных в веб-среде, *Открытая конференция молодых учёных ИВМ СО РАН по математическому моделированию и информационным технологиям*, С 44-46 (2019).

Об эффективности контроля устойчивости при интегрировании жестких задач

М. В. Рыбков

Сибирский федеральный университет

Исследования, связанные с устойчивостью численных схем при интегрировании жестких задач, приводятся в работах авторов Новикова Е.А., Лебедева В.И. Последний занимался разработкой высокостадийных явных методов типа Рунге-Кутты для интегрирования жестких задач. Тем не менее, в построенных алгоритмах для решения задачи была необходима информация о собственных значениях матрицы Якоби системы [1]. Новиков Е.А. предложил метод оценки максимального собственного числа через линейную комбинацию стадий метода, что позволяет избежать дополнительных вычислительных затрат при оценке, а также не требует дополнительной информации о собственных числах матрицы Якоби. В работах Новикова Е.А. построены явные методы с количеством стадий до 13 [2-3].

Автором реализованы методы первого порядка расширенными областями устойчивости с количеством стадий до 35. Теоретически с ростом размера области устойчивости возникает возможность «разгона» шага интегрирования на участках установления решения дифференциальной задачи. Тем не менее, практическая реализация алгоритмов не дает увеличения эффективности с ростом длины интервала устойчивости, точнее говоря снижение вычислительных затрат фиксируется до количества стадий, равного 21-22, но затем идет снова рост.

Здесь проведены расчеты задач с различными коэффициентами жесткости алгоритмами в разных режимах работы (с контролем устойчивости и без него, с переменным и постоянным порядком). Приведены гипотезы снижения эффективности алгоритмов интегрирования при увеличении интервала устойчивости после определенного количества стадий и пути решения этой проблемы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-31-00375).

Литература:

- [1] В. И. Лебедев. Явные разностные схемы для решения жестких задач с комплексным или разделимым спектром, Ж. вычисл. ма-тем. и матем. физ., №12 (40), С. 1801–1812 (2000).
- [2] Е. А. Новиков и Ю. В. Шорников. Компьютерное моделирование жестких гибридных систем : монография, Новосибирск: Изд-во НГТУ, С. 451 (2012).
- [3] E. A. Novikov and M. V. Rybkov Application of Explicit Methods with Extended Stability Regions for Solving Stiff Problems, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys. V. 9(2). P. 209-219 (2016). DOI: 10.17516/1997-1397-2016-9-2-209-219.

Учёт особенностей электрического поля при воздействии на жидкий кристалл

И. В. Смолехо

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

В [1] представлен вычислительный алгоритм, моделирующий поведение жидких кристаллов под действием электрического поля. Жидкокристаллический слой помещается между периодически расположенными короткими пластинами конденсатора. Во внешней части слоя потенциал φ электрического поля $E = -\nabla\varphi$ удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$. Внутри слоя выполняется уравнение, учитывающее анизотропию среды: $\nabla \cdot (\varepsilon \cdot \nabla\varphi) = 0$, где ε – тензор диэлектрической проницаемости жидкого кристалла, зависящий от ориентации молекул. Задача рассматривается в плоской постановке. Решение уравнения Лапласа строится по методу прямых, а решение анизотропного уравнения – с применением итерационного метода.

В данной работе проводится анализ влияния особенностей электрического поля, возникающих в концевых точках пластин конденсатора из-за резкой смены граничных условий в этих точках. На пластинах задается разность потенциалов, на остальных частях границы слоя ставятся условия непрерывности электрического потенциала между диэлектриком и воздухом (вакуумом) и непрерывности нормальной составляющей вектора электрической индукции. Электрический потенциал представляется в виде суммы двух

слагаемых: $\varphi = \varphi^0 + \sum_{k=1}^4 C_k \varphi^{(k)}$, первое из которых – гладкая часть решения, второе сумма

решений с особенностями в концах верхней и нижней пластин конденсатора. Для вычисления неопределенных констант C_k применяется метод наименьших квадратов, минимизирующий интеграл потенциальной энергии поля $\iint_D \nabla\varphi \cdot \varepsilon \cdot \nabla\varphi dx_1 dx_2 \rightarrow \min$.

В ходе анализа выяснилось, что первые производные $\varphi^{(k)}$ по пространственным переменным являются ограниченными функциями. Вторые производные, которые участвуют в выражении для вращательных моментов доменов жидкого кристалла, нарастают вблизи концов пластин обратно пропорционально расстоянию. Планируется добавить расчет этих особенностей в параллельный вычислительный алгоритм, моделирующий механическое, температурное и электрическое воздействия на жидкий кристалл [2].

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Садовский В.М.

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

Литература:

- [1] V. M. Sadovskii, O. V. Sadovskaya, I. V. Smolekho. Parallel implementation of the algorithm describing the behavior of liquid crystals under the action of electric field, AIP Conference Proceedings. V. 2025. P. 070005-1–070005-9 (2018).
- [2] V. M. Sadovskii, O. V. Sadovskaya, I. V. Smolekho. Numerical modeling of the dynamic processes in liquid crystals under the action of thermomechanical and electrostatic perturbations, AIP Conference Proceedings. V. 2164. P. 090006-1–090006-8 (2019).

Распределенная информационная система анализа и визуализации источников интернет-угроз

Г. К. Сурихин

Сибирский федеральный университет

Целью работы является разработка алгоритма поиска бот-сетей в сети интернет и построение на его основе приложения, способного в удобной для пользователя форме отображать результаты своей работы.

В качестве данных для анализа используются журналы веб-сервера nginx. Выбор данного сервиса связан с его популярностью на рынке веб-серверов. Приложение состоит из двух частей, следующих REST-парадигме [1]. Первая – это серверная часть, где происходит сбор и анализ входящих данных из различных сайтов, расположенных в различных точках земного шара. В основе архитектуры находится нейронная сеть перцептронного типа. Обучающая выборка составлена из журналов веб-серверов, где предварительно определено, какой из адресов является ботом, а какой нет. Данная классификация была сделана с помощью открытых баз данных антивирусов. Далее сервер принимает журналы из различных источников и уже на обученной сети определяет, к какому из классов (бот или юзер) принадлежит адрес. Обучающая выборка содержит 1280295 записей. Все ответы сети также сравниваются с открытыми источниками для корректировки весов нейронной сети, для дообучения в случае ошибки. Средний показатель ошибки составляет 15,32%. В качестве входных параметров для сети используются следующие данные из журналов веб-серверов [2]:

- time_local – локальное время совершения запроса;
- staus – код ответа сервера;
- body_bytes_sent – размер передаваемых данных;
- http_user_agent – опции запроса;
- country_code – страна источника.

Вторая часть приложения отвечает за визуализацию входящих данных и результатов анализа. Отображение происходит с использованием картограммы. На карте указывается цель, источник и тип запроса (рисунок 1).



Рис. 1. Визуализация результатов.

Приложение построено с помощью следующих технологий: AngularJs, Leaflet, NodeJs, Mongodb, express.

Научный руководитель – д. ф.-м. н. Исаев С. В.

Литература:

[1] Architectural Styles and the Design of Network-based Software Architectures [Электрон. ресурс]. URL: https://www.ics.uci.edu/~fielding/pubs/dissertation/rest_arch_style.html (дата обращения 10.03.2020).

[2] Сайт компании «Nginx» [Электрон. ресурс]. URL: https://nginx.org/ru/docs/http/nginx_http_log_module.html (дата обращения 10.03.2019).

Программа тестирования и анализа явных методов интегрирования жестких задач

Д. В. Хоров, В. Д. Перехрест

Сибирский федеральный университет

При разработке методов интегрирования часто требуется проводить их отладку и тестирование на большом объеме задач с разными входными данными. В данной работе представлена программа по разработке и тестированию алгоритмов расчета жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Программа позволяет производить расчет с помощью алгоритмов интегрирования повышенной эффективности задач в области химической кинетики и медицины. В последней, в частности, задачи, представляемые в виде уравнений в частных производных, могут быть дискретизированы по пространственной переменной и сведены к обыкновенным дифференциальным уравнениям.

В программе реализован набор методов первого порядка с расширенными областями устойчивости и высоким числом стадий. Благодаря контролю устойчивости решаются проблемы недостаточной точности встроенных типов данных и, как следствие, возникающих ошибок округления, которые приводят к выходу за пределы области устойчивости и заикливанию алгоритмов.

Известно, что функцией устойчивости явного метода является многочлен, расположение корней которого влияет на размер и форму области устойчивости метода. Для понимания расположения корней многочлена устойчивости [2] был написан отдельный модуль, который строит область устойчивости в комплексной плоскости по вычисленным коэффициентам. Это позволяет проанализировать построенные графики и выявить оптимальные параметры для построения областей устойчивости.

Используя модуль, описанный ранее, была реализована программа построения адаптивных алгоритмов интегрирования. Программа позволяет пользователю контролировать параметры алгоритмов (количество стадий, режим расчета с контролем устойчивости и без него). Такой подход значительно облегчает интегрирование жестких систем, так как пользователь может корректировать параметры перед запуском расчетов и в реальном времени анализировать полученные результаты.

Таким образом, разработанный программный комплекс позволяет производить расчет жестких задач систем ОДУ алгоритмами на основе явных методов [3]. Реализованные элементы мониторинга статистической информации позволяют отслеживать параметры вычислений в реальном времени и, как следствие, выбирать более оптимальные параметры для конкретной задачи. Кроме того, тестирование программы показало, что в реализованных алгоритмах снижается число возвратов и вычислений правой части, тем самым повышая эффективность расчетов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-31-00375).

Научный руководитель – ст. преподаватель каф. МОДУС СФУ Рыбков М. В.

Литература:

- [1] Е. А. Новиков. Явные методы для жестких систем, Новосибирск: Наука, С. 197 (1997).
- [2] Е. А. Новиков и М. В. Рыбков. Численный алгоритм построения многочленов устойчивости методов первого порядка, Вестник Бурятского государственного университета, № 9-2. С. 80-85 (2014).
- [3] M.V. Rybkov, L.V. Knaub and D. V. Khorov. First-Order Methods With Extended Stability Regions for Solving Electric Circuit Problems, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys. V. 13(2). P. 242-252 (2020). DOI: 10.17516/1997-1397-2020-13-2-242-252.

Секция «Школы РАН»

Исследование поверхностных белков нейтрофилов

С. Колесов, А. Раткуль, К. Борисова, Е. Мордвинова, В. Д. Беленюк

МАОУ Гимназия № 13,

НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН.

Нейтрофилы – ключевые клетки иммунной системы, ответственные за процесс фагоцитоза и развитие врожденного иммунитета. Исследования в этой области постоянно сохраняет актуальность, так в 2019 году был обнаружен белок, ответственный за скопление нейтрофилов на границах раковой опухоли и разработан способ, позволяющий «вылечить» патологически активные иммунные клетки, направив их на борьбу против раковой опухоли.

Поверхностный белок CD16 представляет собой молекулу суперсемейства иммуноглобулинов, идентифицированный как Fc-рецептор, участвующий в передаче сигнала, и обнаруженный на поверхности естественных клеток-киллеров, нейтрофилов, моноцитов и макрофагов. У людей он существует в двух разных формах: CD16a и CD16b, которые имеют 96% сходство последовательностей в областях связывания внеклеточного иммуноглобулина. CD16 может быть использован для выделения популяций специфических иммунных клеток посредством сортировки клеток с активированной флуоресценцией или магнитной сортировки клеток с использованием антител, направленных на CD16.

Поверхностный белок CD32 является поверхностным белком средним уровня аффинности. Представлен на нейтрофилах, В-клетках, Т-клетках и тромбоцитах. Он имеет низкое сродство к антителам IgG и регулирует выработку антител в их присутствии. CD32 вовлекается в процессы патогенеза, при аутоиммунных заболеваниях. Таким образом CD32 выполняет две основные функции: регуляцию клеточного ответа и обеспечение проникновения иммунных комплексов в клетку.

Мембранный белок CD64 - гликопротеин, Fc-рецептор к мономерным иммуноглобулинам изотипа IgG. CD64 постоянно экспрессирован только на макрофагах и моноцитах. Наличие CD64 на поверхности нейтрофилов является признаком инфекции, в том числе при синдроме системной воспалительной реакции.

Для определения активности нейтрофилов используется белок CD11b, представляющий собой мембранный белок, ответственный за взаимодействие моноцитов, макрофагов и гранулоцитов. Если CD11b внезапно исчезнет из организма, то постепенно будет развиваться системная красная волчанка (СКВ) 6 типа. Часто СКВ оканчивается летальным исходом, сопровождающимся хрупкостью слизистой, аллазией кожных покровов и атрезией желудочно-кишечного тракта.

Как следствие **целью** нашей работы было исследование поверхностных белков нейтрофилов: CD16, CD32, CD64, CD11b. **Объектом** нашего исследования являлась периферическая венозная кровь. Для исследования которой мы использовали **метод** проточной цитометрии. Применение которой позволяет определять количество исследуемых белков на поверхности мембраны нейтрофилов.

В результате нашей работы было произведено исследование литературы о цитометрии и основных поверхностных белках нейтрофилов. Были проведены анализы образца крови, здорового донора и образца пациента с воспалением. В результате было получено подтверждение информации, полученной из литературы. Обнаружилось повышение количества CD32, CD64 и CD11b, а также небольшое снижение CD16 на поверхности исследованных нейтрофилов, что опосредованно массовым выходом юных клеток в русло крови и запаздыванием процессов созревания.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. Смольниковой М.В.

Установление связей между пространственной структурой и функцией макромолекулы на примере зелёного флуоресцентного белка, иммуноглобулина g и ДНК аптамера к тромбину

Е. Карпова, Е. Круглик, С. Гладкова, Е. Курбатова, Б. Малюков, Д. Сикилинда, В. В. Красицкая

МАОУ Гимназия № 13,

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Зелёный флуоресцентный белок (GFP), выделенный из медузы *A. victoria*, флуоресцирует в зелёном диапазоне при освещении его другим светом. Благодаря этой способности GFP стал важнейшим инструментом исследования биологических процессов как в фундаментальной молекулярной биологии, так и в биомедицине, где он широко используется при скринингах лекарств-кандидатов и анализе эффективности применения молекулярных и клеточных технологий лечения. Иммуноглобулины представляют собой особый вид белковых соединений плазмы крови, которые вырабатываются живыми организмами в ответ на попадание в их организм чужеродных веществ - антигенов. Аптамеры – одноцепочные ДНК или РНК олигонуклеотиды, специфически связывающиеся с определенными молекулами-мишенями благодаря своей уникальной третичной структуре. Для исследования был выбран наиболее известный ДНК аптамер к белку тромбину. Тромбин – это фермент, участвующий в процессе свёртывания крови. Аптамер блокирует тромбин и может быть использован как лекарство, останавливающее процесс свертывания крови.

Целью проекта было с помощью 3D-принтера напечатать молекулу GFP, иммуноглобулина G и ДНК аптамера к тромбину и установить связи между пространственной структурой и функцией молекулы. В базе пространственных структур Protein Data Bank были найдены пространственные структуры молекулы GFP (6QQ8), иммуноглобулина G (1IGT) и комплекса ДНК аптамера с молекулой тромбина (5CMX) и с помощью программы Chimera 1.14 подготовлены структуры для печати на 3D принтере (Рис.1). В центре молодежного инновационного творчества «Академ» на 3D принтере «IMPRINTA» были распечатаны молекулы. В результате работы были определены структурные мотивы молекул, отвечающие за выполнение их специфической функции. GFP представляет собой бочонок, образованный бета-слоями с альфа-спиралью в середине, которая удерживает молекулу хромофора. Белковая структура защищает хромофор от влияния окружающей среды, что позволяет флуоресцировать более эффективно. Иммуноглобулин G представляет собой совокупность четырех цепей - двух тяжёлых и двух лёгких, скрепленных вместе с помощью S-S мостов. Варибельные части связывают антиген и отвечают за чрезвычайно высокую специфичность молекулы. Последовательность ДНК аптамера к тромбину обогащена гуаниновыми нуклеотидами, которые при наличии магния образуют «G-квадруплекс». G-квадруплекс делает молекулу более устойчивой и в данном случае отвечает за связывание с молекулой тромбина.

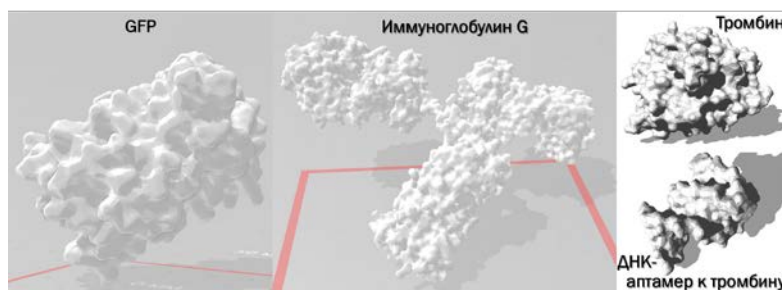


Рис. 1. Структуры молекул GFP, иммуноглобулина G и ДНК аптамера к тромбину для печати на 3D принтере.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. Смольниковой М.В.

Исследование эффективности выделения ДНК из биологического материала человека, полученного из разных источников

М. Трошина, П. Медяник, О. Мациборук, Е. Доперук, А. Рябова, К. Сошина, М. Иванова, Е.Д. Осипова

МАОУ Гимназия № 13,

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

На сегодняшний день в клинической диагностике и научных исследованиях широко используются методы, основанные на проведении ПЦР - полимеразной цепной реакции. Для получения образцов ДНК чаще всего используются инвазивные методы забора биологического материала, в частности, взятие крови. Однако, возможность взятия крови у человека есть не всегда и она сопряжена с рядом трудностей. Поэтому перспективными являются методы выделения ДНК из биологического материала, полученного неинвазивными методами. В частности, легко доступными материалами для исследования являются слюна человека или образцы буккального эпителия.

В связи с этим нами была поставлена следующая **цель**: исследовать эффективность выделения ДНК из биологического материала человека, полученного неинвазивными методами (из слюны и буккального эпителия).

Материалы и методы. В работе использовали набор реагентов для выделения ДНК Diatom™ DNA Prep 100 (ООО Изоген, Россия), предназначенный для выделения хромосомной ДНК из различного биологического материала сорбционным методом. Материалом для выделения ДНК служила слюна (объем образца 100 - 400 мкл) и буккальный эпителий (100 мкл ТЕ буфера, содержащего клетки эпителия). После выделения количество ДНК определяли с помощью флуориметра Qubit.

В таблице 1 представлены **результаты** измерения концентрации ДНК, выделенной из различного объема слюны.

Таблица 1. Количественное определение ДНК, выделенной из слюны

Количество образцов, n	Количество слюны, мкл	Количество сорбента, мкл	Концентрация, мкг/мл
5	100	20	0
1	200	20	0
4	300	20	4,9±8
8	400	30	8,69±9,3

Из представленных данных видно, что оптимальное количество для выделения ДНК из слюны - 400 мкл, оптимальное количество сорбента - 30 мкл. В образцах, полученных из 100 мкл ТЕ буфера с буккальным эпителием, концентрация ДНК оказалась ниже пороговой чувствительности прибора, в связи с чем был сделан вывод, что процедура выделения ДНК из буккального эпителия требует дальнейшей оптимизации.

Таким образом, нами была показана возможность выделения достаточного количества ДНК из материалов, полученных неинвазивными методами. Подобран оптимальный протокол для выделения ДНК из слюны. Требуется дальнейшая оптимизация протокола выделения ДНК из буккального эпителия.

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

Морфологическое строение пищевых изделий из мяса

М. Лаврентьева, М. Подборская, Д. Дворянкина, В. Садовский, И. Калашников,

О. В. Перетяцько

МАОУ Гимназия № 13,

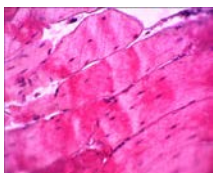
НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН.

В настоящее время большое количество людей покупают и едят изделия из мяса довольно часто. В магазинах представлен широкий ассортимент мясных продуктов в различных ценовых категориях. В начале нашего исследования мы выдвинули **гипотезу**, что морфологический состав исследуемых мясных продуктов различен. Таким образом, **целью** нашей работы явилось сравнить качество настоящего мяса и продуктов его переработки. Для достижения цели нами была поставлена следующая **задача**: сравнить качество настоящего мяса и продуктов его переработки.

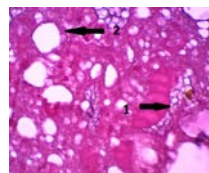
Объектами исследования служили свинина, филе курицы, колбаса «Дымов», сосиска «Дымов». Все исследуемые кусочки были размером 5×5×5мм. Мы также изучили состав мясных изделий на этикетке исследуемых продуктов. В составе сосиски были заявлены свинина, говядина; в составе колбасы - свинина, шпик, говядина, куриное филе.

Методы исследования. Основными методами в нашей работе явились гистологический и морфометрический, в основе которых была световая микроскопия. Обработка исследуемого материала велась по стандартным гистологическим методикам. Изготовление тонких гистологических срезов толщиной 5 мкм производилось при помощи ротационного микротомы. Срезы окрашивались гематоксилин-эозином. Подсчет количества мышечных волокон производился при помощи специальной стереометрической сетки Г.Г. Автандилова, вмонтированной в окуляр микроскопа. В сетке 100 точек (каждая точка соотносится с 1 %). Подсчитывалось количество точек приходившихся на мышечные волокна, таким образом вычислялся их процент. Основным рабочим увеличением явилось увеличение × 400.

Результаты. В результате нашего исследования мы получили следующее: в курице и свинине содержалось 100% мышечных волокон (рис. 1). В сосиске (рис. 2) мы увидели хрящи, жировые капли и 7% мышечных волокон. В колбасе мы увидели жировые капли и 33% мышечных волокон.



*Рис. 1. Курица, увеличение × 400.
Окраска гематоксилин-эозин.
Ядра мышечных волокон окрашены
фиолетовым цветом, цитоплазма -
розовым.*



*Рис. 2. Сосиска, увеличение × 400, окраска
гематоксилин-эозин. Хрящевая ткань (1),
жировые капли (2).*

Выводы. В заявленном на этикетке составе сосисок присутствуют свинина и говядина, а в составе колбасы: свинина, шпик и говядина. В результате исследования мы обнаружили мышечные волокна, значит, мясо в колбасе есть! Сосиска содержит меньше всего мышечных волокон (7%), а также в ней присутствуют хрящи и жир. Колбаса содержит жир и некоторое количество мышечных волокон (33%).

На этикетках пищевых изделий (сосиска и колбаса) было заявлено, что данные мясные продукты принадлежат к ГОСТу колбасы категории Б (наличие 40-60% мышечных волокон). Таким образом, можно **заключить**, что состав колбасы и сосисок не заявленному на этикетке составу.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. Смольниковой М.В.

Титриметрическое определение витамина С в продуктах питания

М. Буданин, Г. Гольшев, В. А. Горбатенко, А. Ю. Горелов, А. Доленко,

Е. Копань, В. В. Терешкина.

МАОУ Лицей №7

Витамин С (аскорбиновая кислота) – это водорастворимое, биологически активное органическое соединение, являющееся мощным антиоксидантом [1, 2]. Витамин С укрепляет иммунную систему человека, а также предохраняет её от вирусов и бактерий, ускоряет процесс заживления ран, оказывает влияние на синтез ряда гормонов, регулирует процессы кроветворения и нормализует проницаемость капилляров. Аскорбиновая кислота необходима человеку, чтобы защитить его организм от негативных последствий воздействия стрессорных факторов. Суточная доза витамина С составляет 60-100 мг. Содержание витамина С можно определять различными методами: спектрофотометрическими [3], титриметрическими, ВЭЖХ [4]. Наиболее точными являются титриметрические методы.

Целью работы: определение содержания витамина С методом окислительно-восстановительного титрования.

В качестве объектов исследования выбрали коммерчески доступные фрукты из магазинов г. Красноярска. В эксперименте использовали реакцию восстановления витамина С йодидом калия (KI), в результате которой происходит выделения молекулярного йода (I₂). Наличие последнего устанавливаем по индикаторной реакции посинения крахмала. Измерения проводили в трех параллелях. Результаты пересчитывали на 100 г фруктов. Полученные данные представлены в таблице 1.

Таблица 1. Содержание витамина С во фруктах

Объект исследования	Опыт 1, мг/на 100 г фрукта	Опыт 2, мг/ на 100 г фрукта	Опыт 3, мг/на 100 г фрукта	Среднее значение, мг/ на 100 г фрукта
Яблоко	6,6	6,6	6,3	6,5
Апельсин	56	55	54	55
Мандарин	26	25	25	25
Лимон	28	28	28	28

Полученные результаты хорошо согласуются с литературными данными, расхождение не превышает 30-50 процентов. Таким образом, показано, что употребление цитрусов 2-3 раза в неделю позволит избежать дефицита витамина С.

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

Литература:

[1] Горбунова Н.В., Банникова А.В. Технология и товароведение инновационных пищевых продуктов. 2(37), С. 35-39 (2016).

[2] Варданын Р.Л. и др., Химия растительного сырья, 1, С. 113-119 (2015)

[3] Мокшина Н.Я. и др., Аналитика и контроль. 8(4), С. 346-348 (2004).

[4] Попова Т.С., Потанина О.Г., Фармация, 2, С. 11-13 (2013).

Заменители чая, полезные свойства и антиоксидантная активность

А. В. Захарченко, Ю. М. Лисицына, Е. С. Ленкова, Ю. А. Болдина,

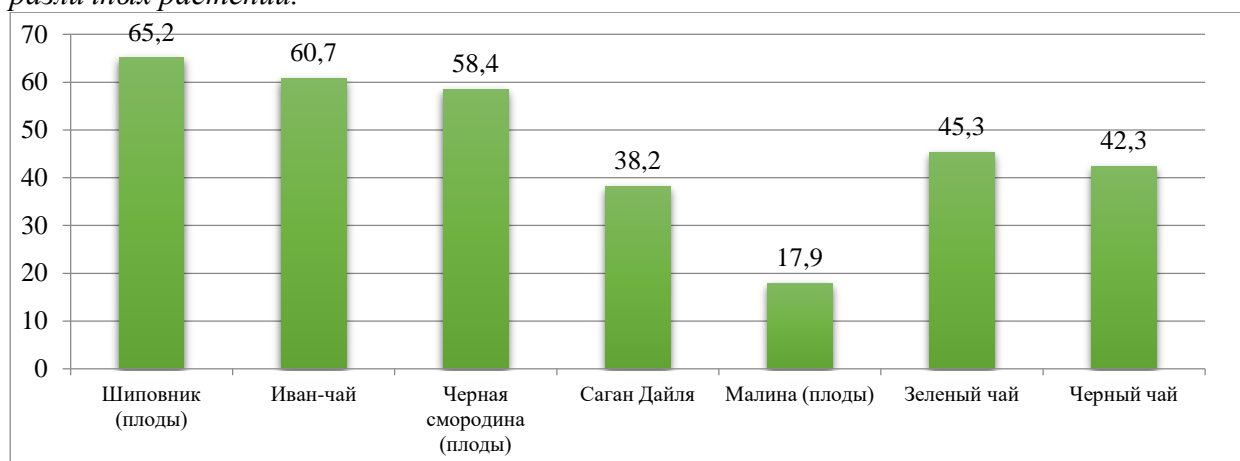
С. С. Михайлова

МАОУ Лицей №7

Ухудшение экологической обстановки увеличило риск накопления в организме человека свободных радикалов [1]. Поэтому нам важно найти оптимальный способ получения организмом антиоксидантов. Источниками антиоксидантов является большинство овощей, фрукты, а также чай [2]. Спектрофотометрия - метод исследования, измерение поглощения света с различной длиной волны, при пропускании его через исследуемое вещество, является общепринятым методом изучения антирадикальной активности (АРА) с использованием стабильного радикала 2,2-дифенил-1-пикрингидразила (ДФПГ) [3,4].

Был проведен модельный опыт на образце чая, установлена его активность, которая согласуется с литературными данными [2]. Также был проведен анализ литературных источников, из которых получены данные по АРА плодов ягод, чая и чаезаменителей [1-5]. Согласно диаграмме, максимальные значения соответствуют шиповнику и Иван-чаю, что позволяет судить о большом содержании антиоксидантов в исследуемых экстрактах. Также, активность ягод несколько выше (кроме малины) в том числе за счёт содержания витамина С, являющегося известным антиоксидантом.

Диаграмма 1. Количество (%) ДФПГ, нейтрализованного антиоксидантами экстрактов различных растений.



Хотим выразить благодарность нашему наставнику Ю. Н. Маляру за помощь в осуществлении общего проекта.

Литература:

- [1] Затолгутская К.А., Кисилёва А.Н., Коган Е.Г., Смоленский медицинский альманах. V.1 (2016).
- [2] А.А. Федосеева, О.С. Лебедкова, Л.В. Каниболоцкая, А.Н. Шендрик, Химия растительного сырья. №3. С. 123–127 (2008).
- [3] Rafi M, Febriany S, Wulandari P, Suparto I.H, Ridwan T, Rahayu S, Siswoyo, J. App. Pharm. Sci, V.8(09), PP.049-054 (2018).
- [4] J. Bermúdez-Soto, M., A. Tomás-Barberán, F., Eur. Food. Res. Technol. V.219, PP.133–141 (2004).
- [5] А. Г. Лапинский, В. В. Горбачев, Химико-фармацевтический журнал. Т.40, № 6. (2006)

Определение тяжёлых металлов в косметических средствах.

С. Д. Лебедева, Н. А. Дмитриева, Г. М. Величко, Я. С. Мельшина

МАОУ Лицей № 7

Пользуясь косметикой ежедневно, очень важно знать о наличии в её составе тяжёлых металлов, которые способны накапливаться в организме, что в дальнейшем может привести к интоксикации. Интоксикация тяжёлыми металлами приводит к аллергическим реакциям или к патологиям, таких как злокачественные опухоли, кожные болезни, болезни крови, нарушение дыхательной системы. Тяжёлые металлы могут попадать в косметику в качестве компонентных примесей и в роли полноценных отдельных ингредиентов. Одним из способов определения тяжёлых металлов в косметических средствах являются спектральные физико-химическими методами анализа.

Целью данной работы являлось рассмотрение спектральных методов анализа для исследования косметических средств с целью определения в них содержания тяжёлых металлов.

Актуальность данного объекта исследования связана с ежедневным использованием косметических средств в повседневной жизни и продолжительным воздействием на кожу.

Предельно допустимое содержание тяжёлых металлов в парфюмерно-косметической продукции отражены в таблице №1 [1].

Таблица 1. Предельное содержание тяжёлых металлов в парфюмерно-косметической продукции

Элемент	Мышьяк	Ртуть	Свинец
Содержание, мг/кг	5,0	1,0	5,0

Среди спектрометрических методов анализа первое место занимают атомно-абсорбционная (ААС) спектрометрия и масс-спектрометрия с индукционно связанной плазмой (ICP-MS). ААС — метод основанный на свойствах атомов поглощать свет с определенной длиной волны, в то время как метод ICP-MS регистрирует излучение, испускаемое возбужденными атомами, в результате их возбуждения индуктивно-связанной плазмой. Данные методы широко применяются в экологической, фармацевтической, пищевой и других отраслях промышленности.

Преимущества метода ICP-MS заключаются в высокой производительности и скорости работы. Данный метод может выполнять анализ до 300 образцов в день и измерять концентрацию 35 элементов за две-три минуты. Также метод ICP-MS имеет низкий предел обнаружения. В отличие от атомно-абсорбционной спектроскопии, определяющей одновременно только один элемент, ICP-MS может определять все элементы одновременно, что позволяет значительно ускорить процесс измерения.

На основании рассмотренных данных об методах анализа был выбран оптимальный метод исследования с помощью прибора масс-спектрометрии с индукционно связанной плазмой (ICP-MS). Поскольку возможность одновременного определения нескольких элементов в образце, значительно упрощает и ускоряет процесс исследования образцов.

Выражаем благодарность за ценные рекомендации в ходе работы руководителю группы А.В. Мирошниковой.

Литература:

[1] Брайкова, А. М., Матвейко, Н. П. — Витебск: Новое в технике и технологии текстильной и легкой промышленности (2011) — С. 211–213.

Роторно-поршневой двигатель

В.В. Иванченко

МБОУ СШ №10

Научный руководитель: Д. А. Иконников, ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского, к.ф.-м. н.

В роторно-поршневом двигателе установленный на валу ротор жёстко соединён с зубчатым колесом, которое входит в зацепление с неподвижной шестернёй — статором. Диаметр ротора намного превышает диаметр статора, несмотря на это ротор с зубчатым колесом обкатывается вокруг шестерни. Каждая из вершин трёхгранного ротора совершает движение по эпитрохоидальной поверхности цилиндра и отсекают переменные объёмы камер в цилиндре с помощью трёх радиальных уплотнений.

Такая конструкция позволяет осуществить любой 4-тактный цикл Дизеля, Стирлинга или Отто без применения специального механизма газораспределения. Герметизация камер обеспечивается радиальными и торцевыми уплотнительными пластинами, прижимаемыми к цилиндру центробежными силами, давлением газа и ленточными пружинами. Отсутствие механизма газораспределения делает двигатель значительно проще четырёхтактного поршневого, а отсутствие сопряжения (картерное пространство, коленвал и шатуны) между отдельными рабочими камерами обеспечивают необычайную компактность и высокую удельную мощность. За один оборот эксцентрикового вала двигатель выполняет один рабочий цикл, что эквивалентно работе двухтактного поршневого двигателя. За один оборот ротора эксцентриковый вал выполняет 3 оборота и 3 рабочих хода, что приводит к ошибочным сравнениям роторного двигателя с шестицилиндровым поршневым двигателем.

Благодаря высокой оборотистости двигателя и его высокой мощности в сравнении с массой и объёмом можно вывести, что роторный двигатель больше подходит для автоспорта, а именно для кольцевых гонок и спринтов. А если говорить про эксплуатацию его в городской среде, то тут есть несколько минусов, это низкая экономичность и маленькая мощность на низких оборотах, а также низкий ресурс и сложность его производства из-за обязанности соблюдения всех геометрических пропорций.

Литература:

- [1] В.С. Бениович, Г.Д. Апазиди, Роторно-поршневые двигатели, «Машиностроение», 151 с. (1968).
- [2] А.С. Орлин, М.Г. Круглов, Двигатели внутреннего сгорания. Конструирование и расчет на прочность поршневых и комбинированных двигателей, «Машиностроение», 384 с. (1984).
- [3] Г.С. Маджуга, В.Х. Подойников, Роторно-поршневые двигатели внутреннего сгорания, «Знание» (1964).
- [4] М.С. Ховах, Автомобильные двигатели, «Высшая школа», 548 с. (1971).

Синтез простейших кристаллов

А. С. Пономаренко, А. В. Дудкина, А. А. Штода

МБОУ СОШ №10

Научный руководитель: Н. С. Павловский, ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского

Рост кристаллов является основополагающим процессом создания сред с сильными электронными корреляциями. Кристаллы возникают при переходе вещества из любого агрегатного состояния в твердое. Кристаллы – это твёрдые тела, в которых частицы расположены закономерно, образуя кристаллическую решётку. Существует два основных типа кристаллов: монокристалл и поликристалл. Главным условием образования кристаллов является понижение температуры до определенного уровня.

Существует три способа образования кристаллов: кристаллизация из расплава, из раствора и из газовой фазы.

Целью работы было изучить процесс роста кристаллов из реактивов, доступных в домашних условиях, узнать, как это происходит в природе.

Для выращивания кристаллов использовались поваренная соль, сахар, медный купорос, вода, деревянная палочка, нитка, а также стеклянная банка.



Рис. 1. Кристалл соли на 9 день.



Рис. 2. Кристалл сахара на 11 день. Рис. 3. Кристалл сахара на 11 день



Рис. 3. Кристалл медного купороса на 19 день.

В результате нашей работы, была отработана технология роста простейших кристаллов и получены кристаллы из соли, сахара и медного купороса. Из сахара и соли у нас получились поликристаллы, а из медного купороса – монокристалл.

Двигатель внешнего сгорания

И.И. Похабов, Н.А. Поляков, А.В. Шапков

МБОУ СШ №10

Научный руководитель: Д. А. Иконников, ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского, к.ф.-м. н.

Двигатель внешнего сгорания (Двигатель Стирлинга) — тепловая машина, в которой жидкое или газообразное рабочее тело движется в замкнутом объёме, разновидность двигателя внешнего сгорания. Основан на периодическом нагреве и охлаждении рабочего тела с извлечением энергии из возникающего при этом изменения объёма рабочего тела. Может работать не только от сжигания топлива, но и от любого источника тепла. Двигатель Стирлинга использует цикл Стирлинга, который по термодинамической эффективности не уступает циклу Карно, и даже обладает преимуществом. Цикл Стирлинга состоит из четырёх фаз и разделён двумя переходными фазами: нагрев, расширение, переход к источнику холода, охлаждение, сжатие и переход к источнику тепла. Таким образом, при переходе от тёплого источника к холодному источнику происходит расширение и сжатие газа, находящегося в цилиндре. При этом изменяется давление, за счёт чего можно получить полезную работу. Нагрев и охлаждение рабочего тела (участки 4 и 2) производится рекуператором. В идеале количество тепла, отдаваемое и отбираемое рекуператором, одинаково.

Литература:

[1] Г. Ридер, Ч. Хупер, Двигатели Стирлинга: Пер.с англ., М.: Мир (1986).

[2] Г. Уокер, Машины, работающие по циклу Стирлинга:Пер. с англ. М.: Энергия,19 (1978).

[3] Г. Уокер Двигатели Стирлинга: Пер.с англ., М.: Машиностроение (1985).

[4] Двигатели Стирлинга. Пер.с англ. Под ред. В.М. Бродянского. М.: Мир (1975).

[6] В.Н. Даниличев, С.И. Ефимов, В.А. Звонков и др., Двигатели Стирлинга, под ред. М.Г.Круглова. – М.:«Машиностроение» (1977).

Электромагнитная пушка

А. А. Умаров, А. И. Каркавин

МБОУ СОШ №10

Научный руководитель: Н. С. Павловский, ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского

Электромагнитная пушка – это электромагнитный ускоритель масс, разгоняющий токопроводящий снаряд вдоль двух металлических направляющих с помощью силы Лоренца.

В состав электромагнитной пушки входят источник питания, коммутационная аппаратура и два электропроводящих рельса от 1 до 5 метров, которые одновременно являются электродами, расположенными друг от друга на расстоянии 1 см. В нем энергия электромагнитного поля взаимодействует с энергией плазмы, которая образуется в результате сгорания специальной вставки в момент подачи высокого напряжения. В тех рельсотронах, где снарядом является проводящая среда, после подачи напряжения на рельсы снаряд разогревается и сгорает, превращаясь в токопроводящую плазму, которая далее также разгоняется. Таким образом, рельсотрон может стрелять плазмой, однако вследствие её неустойчивости она быстро дезинтегрируется. При этом необходимо учитывать, что движение плазмы, точнее, движение разряда (катодные, анодные пятна), под действием силы Лоренца возможно только в воздушной или иной газовой среде не ниже определённого давления, так как в противном случае, например, в вакууме, плазменная перемычка рельсов движется в направлении, обратном силе – так называемое обратное движение дуги.[1-4]

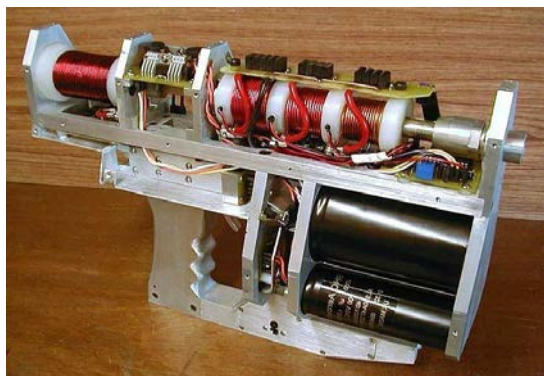


Рис. 1. Самодельная электромагнитная пушка.

Литература:

- [1] <https://ru-wikipedia-org.turbopages.org/s/ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D0%B5%D0%BB%D1%8C%D1%81%D0%BE%D1%82%D1%80%D0%BE%D0%BD>.
- [2] А. Агеев, Электромагнитная пушка: оружие будущего, Сайт Техкульт (2014).
- [3] J. E. Barnes, A First Look at America's Supergun, The Wall Street Journal, (2016).
- [4] О. Титков, Магнитные войны, Популярная механика. № 7, С. 76-80 (2017).

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIII)
г. Красноярск, 17 июня 2020 г.)

ISBN 978-5-6042995-9-3



Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 22.06.2020 г.
Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Times New Roman».

Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 5,28. Уч.-изд. л. 5,21. Заказ № 5. Тираж 100 экз.
Отпечатано на Участке оперативной печати ИФ СО РАН. 660036, г. Красноярск,
Академгородок, 50/38.

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

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