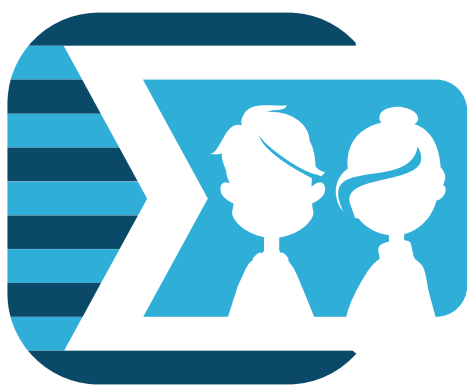




Министерство науки и высшего образования РФ
ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»
Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
Институт биофизики СО РАН
Институт химии и химической технологии СО РАН
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Институт леса им. В. Н. Сукачёва СО РАН
Научно-исследовательский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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

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



КРАСНОЯРСК | 16 МАЯ 2023 ГОДА



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

Тезисы докладов

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

16 мая 2023 года, г. Красноярск

Красноярск
2023

УДК 50(082)

ББК Б.я431

М43

М43 Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ
СО РАН (КМУ-XXVI): тезисы докладов (Красноярск, 16 мая
2023 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2023. – 135 с.

ISBN 978_5_6045250_7_4

ISBN 978-5-6045250-7-4



© Авторы, содержание тезисов, 2023
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2023

**Сборник трудов междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН,
16 мая 2023 г., г. Красноярск**

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

Оргкомитет

Василий Филиппович Шабанов, академик РАН, д.ф.-м.н., Председатель Оргкомитета;
Александр Артурович Шпедт, чл.-корр. РАН, д.с.-х.н., зам. Председателя Оргкомитета;
Владимир Викторович Шайдуров, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., зам. Председателя Оргкомитета;
Надежда Николаевна Сущик, чл.-корр. РАН, д.б.н., ИБФ СО РАН;
Сергей Николаевич Варнаков, д.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН;
Светлана Николаевна Софронова, к.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН;
Анатолий Иосифович Рубайло, д.х.н., проф., «КРЦКП» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Дмитрий Александрович Балаев, д.ф.-м.н., ИФ СО РАН;
Наталья Сергеевна Кузьмик, к.с.-х.н., ИЛ СО РАН;
Елена Петровна Бронникова, к.б.н., НИИ МПС;
Наталья Станиславовна Козулина, к.с.-х.н., КрасНИИСХ;
Иван Викторович Петерсон, к.х.н., учёный секретарь Оргкомитета.

Программный комитет

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

Содержание

Секция «Физика»	11
<i>Абдуллаев А.С.</i> Плавное управление закруткой светочувствительного холестерика в ячейке с тангенциальными граничными условиями.....	12
<i>Андрющенко Т.А.</i> Синтез тонких плёнок хром- и марганецсодержащих МАХ-фаз.....	13
<i>Гамов А.</i> Топологические фазы с множеством майорановских мод в сверхпроводящей нанопроволоке при учете дальних перескоков и спариваний.....	14
<i>Головкина Е.В.</i> Угловые зависимости поляризованных спектров КРС и КР-картирование металлоорганических каркасов.....	15
<i>Еремин Л.А.</i> Исследование продуктов твердофазных реакций в тонких пленках Sn/Co/MgO(001) при вакуумном отжиге.....	16
<i>Иванов Д.А.</i> Влияние спин-орбитального взаимодействия на поверхность Ферми в модели пниктидов железа.....	17
<i>Иконников Д.А.</i> Эволюция оптических вихрей в ближней зоне и их пространственное упорядочение за вилкообразной решеткой.....	18
<i>Ковалева Е.А.</i> Закономерности полимеризации эндодральных металлофуллеренов при высоких давлениях.....	19
<i>Костиков Д.А.</i> Управление поляризацией света, прошедшего слой хирального нематика с планарно-коническими граничными условиями.....	20
<i>Креков С.Д.</i> Методика расчета бюджета канала ближнепольной магнитной системы связи.....	21
<i>Ларионов Е.А.</i> Спиновая восприимчивость в реалистичной модели сверхпроводящих соединений железа.....	22
<i>Мураев П.С.</i> Переход изолятор-проводник для взаимодействующих бозонов в ромбической решетке.....	23
<i>Негодеева И.А.</i> Разработка и исследование индукционного магнитометра.....	24
<i>Пичковский И.С.</i> Кластеризация на три группы на квантовом процессоре из пяти спинов $S = 1$, управляемом импульсами резонансных радиочастотных полей.....	25
<i>Соколов В.В.</i> Спектры поглощения и магнитного кругового дихроизма ионов Ho^{3+} в $\text{Ho}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{Fe}_3(\text{VO}_3)_4$ при спин-реориентационном переходе.....	26
<i>Фейзер К.А.</i> Электрооптический отклик КПЖК пленок на основе хирального нематика с коническими граничными условиями.....	27
<i>Хороший И.Н.</i> Магнитоэлектрический эффект в орторомбических монокристаллах $\text{Dy}_{1-x}\text{Ho}_x\text{MnO}_3$	28
<i>Шабанов Д.А.</i> Сканирующая антенна на основе резонансной меандровой структуры с емкостной перестройкой.....	29

<i>Шанидзе Л.В.</i> Низкотемпературный транспорт пленок TiN_xO_y легированных Cu, выращенных методом атомно-слоевого осаждения	30
<i>Шумилов Т.Ю.</i> Монолитный полосно-пропускающий фильтр X–диапазона на полосковых резонаторах с двумя металлическими слоями	31
Секция «Химия и химические технологии»	33
<i>Бережная Я.Д.</i> Сульфатирование микрокристаллической целлюлозы березы сульфаминовой кислотой в присутствии катионно-обменных смол	34
<i>Боровкова В.С.</i> Получение и характеристика пластифицированных композитных пленок арабиногалактана, модифицированных полифункциональными карбоновыми кислотами	35
<i>Вигуль Д.О.</i> Каталитическая конверсия лигнинов в ванилин и другие ценные продукты .	36
<i>Волкова Д.С.</i> Пинцерные бис((дифенил)фосфинокси)фенильные комплексы платины и никеля с алкинильными лигандами: синтез, строение и химические свойства	37
<i>Голубков В.А.</i> Влияния твёрдых кислотных катализаторов на структуру целлюлозы в процессе гидролиза	38
<i>Зосько Н.А.</i> Самодопирование нанотрубок TiO_2 для фотоэлектрохимического получения водорода	39
<i>Ионин В.А.</i> Синтез функциональных материалов на основе органических соединений, выделенных из растительного сырья	40
<i>Казанцев Я.В.</i> Комплексная переработка лигнита с выделением редких элементов	41
<i>Капаева С.Н.</i> Электрокаталитическое окисление крахмала в водных электролитах.....	42
<i>Карпов Д.В.</i> Синтез и свойства сильно коррелированных гидрозолей Fe_3O_4	43
<i>Киришева Е.А.</i> Синтез карбоната иттрия с применением анионообменного осаждения и теоретическое исследование его свойств и структуры	44
<i>Кормес Е.С.</i> Изучение электронного строения дикарбонильных комплексов родия (I) с хелатообразующими лигандами методами квантовой химии	45
<i>Куулар А.А.</i> Влияние добавки нановолокон оксида алюминия на прочность эпоксидных смол	46
<i>Мирошникова А.В.</i> Каталитическая деполимеризация древесного лигнина в жидкие биотоплива	47
<i>Патрушева А.А.</i> Синтез и физико-химическое исследование новых карбонил(β -дикетонат)изоцианидных комплексов родия (I)	48
<i>Пономарев И.С.</i> Синтез и изучение координационных свойств новых бета-дикетонов и кетоимinov на их основе	49
<i>Сычев В.В.</i> Восстановительное каталитическое фракционирование древесины ели в присутствии бифункционального катализатора Ru/C в среде этанола и водорода.....	50
<i>Троцкий Ю.А.</i> Ni-SiO ₂ – катализатор гидрирования левулиновой кислоты до γ -валеролактона в водной среде	51
<i>Флерко М.Ю.</i> Оптимизация электролитической очистки высококонцентрированных гидрозолей серебра	52

Секция «Био- и медицинские технологии»	53
<i>Аверьянов А.С.</i> Качества семян и развития сеянцев лиственницы сибирской контрастных экотопов Сибири.....	54
<i>Артюшенко П.В.</i> Определение ключевых аминокислот и нуклеотидов, отвечающих за связывание аптамера LC_50 с белковой мишенью, методами малоуглового рентгеновского рассеяния и молекулярного моделирования.....	55
<i>Арясов В.Е.</i> Взаимосвязь густоты и эффективности фотосинтезирующего аппарата сосновых молодняков в условиях юга Арктики	56
<i>Беленюк В.Д.</i> Особенности фенотипа клеток иммунной системы у больных перитонитом	57
<i>Билуха И.А., Кукавская Е.А.</i> Влияние пожаров на запас пирогенного углерода в сосняках Красноярского края	58
<i>Бульхин А.О.</i> Длинноцепочечные алкеноны в верхних слоях донных отложений озер Северо-Минусинской котловины (Южная Сибирь): значение для палеоклиматических реконструкций	59
<i>Бурдин Л.А.</i> Угольные макро-частицы в верхних слоях донных отложений озёр Северо-Минусинской котловины (юг Сибири) как индикатор динамики пожаров на окружающей территории	60
<i>Вяткина М.О.</i> Получение и анализ геномных вариантов генов изоформ люциферазы <i>Metridia longa</i>	61
<i>Горчилова Е.Г., Цуканов В.В.</i> Клинико-биохимические и иммунологические проявления инвазии <i>Opisthorchis felinus</i>	62
<i>Дудаев А.Е.</i> Нетканые наноматрицы из резорбируемых «зеленых» пластиков полигидроксиалканоатов (ПГА) для клеточных технологий.....	63
<i>Ертилецкая Н.Л.</i> Исследование характеристик штаммов-продуцентов молочной кислоты при использовании глюкозного сиропа в качестве источника углерода.....	64
<i>Забродин А.Н.</i> Сопряженный анализ интенсивности горения и степени пожарного воздействия на древостои по данным дистанционного мониторинга.....	65
<i>Карузина Н.Е.</i> Сравнение структурных переходов карбоксиангидразы Б под действием разных дестабилизирующих факторов методом время-разрешенной флуоресценции.....	66
<i>Кичеева А.Г.</i> Биологическая активность наночастиц оксида железа Fe ₃ O ₄ . Биолюминесцентный мониторинг	67
<i>Кладько Ю.В.</i> Модификация климатического отклика древесных растений под влиянием аэротехногенного загрязнения	68
<i>Колесник О.В.</i> Радиопротекторные свойства гуминовых веществ и фуллеренола C _{60,70}	69
<i>Коновалова Д.А.</i> Сезонная динамика ручейников <i>Apatania cymophila</i> в среднем течении реки Енисей	70
<i>Коновалова О.В.</i> Химерные белки на основе фотопротеинов акворина и митрокомина: конструирование, клонирование и свойства.....	71
<i>Маркова Г.М.</i> Динамические аттракторы нейронной активности у простых нейронных сетей.....	72

<i>Машонская Ю.О.</i> Диеты, которые не позволяют бентоядным лососевым рыбам <i>Thymallus baicalensis</i> реализовать свой потенциал по накоплению большого содержания омега-3 ПНЖК в мышечной ткани.....	73
<i>Минаков И.Д.</i> Новые для Енисея виды водных лютиков (<i>Ranunculus</i> sect. <i>Batrachium</i> , <i>Ranunculaceae</i>)	74
<i>Михайлец М.А.</i> Исследование технологической эффективности баковой смеси гербицидов в посеве яровой пшеницы.....	75
<i>Морозова Е.П.</i> Разработка латерального проточного аптасенсора для экспресс-анализа кардиомаркера тропонина I	76
<i>Нур Ш.А.</i> Сдвиг максимума спектра биолюминесценции фотопротеинов заменой консервативного изолейцина на гистидин.....	77
<i>Округина А.К.</i> Анализ жирнокислотного состава керамических сосудов стоянки бронзового века Нижнего Приангарья.....	78
<i>Посохина Е.Д.</i> Некоторые свойства стимулятора биолюминесценции базидиомицета <i>Neonothopanus nambi</i>	79
<i>Пьянков В.Ф.</i> Магниторезонансная гипертермия	80
<i>Сапожникова К.Ю.</i> Биосинтез и свойства трехкомпонентных полигидроксиалканоатов, полученных в культуре бактерий <i>Cupriavidus necator</i> B-10646.....	81
<i>Селиверстова А.Г.</i> Исследование люциферазы <i>Metridia</i> как комплементационного репортера для мониторинга белок-белковых взаимодействий в клетках	82
<i>Синнер Е.К.</i> Станолы в донных отложениях озера Шира как палео-индикатор фекальных загрязнений и антропогенной нагрузки	83
<i>Стальмак А.В., Голуков А.С.</i> Исследование продуктивности пройденных огнем лесных территорий СФО по материалам спутниковой съёмки	84
<i>Сушко Е.С.</i> Влияние фуллеренолов на бактериальную биолюминесценцию.....	85
<i>Титова Д.А., Пак М.Э.</i> Инициация соматического эмбриогенеза у <i>Larix sibirica</i> Ledeb	86
<i>Третьяков П.Д.</i> Горимость арктической зоны Сибири в условиях климатических изменений XX – начала XXI вв	87
<i>Шемберг А.М.</i> Особенности развития пыльцы лиственницы сибирской (<i>Larix sibirica</i> Ledeb.) и лиственницы Гмелина (<i>Larix gmelinii</i> Rupr.).....	88
Секция «Математическое моделирование»	89
<i>Барабаш В.В.</i> Математическая модель «среднего поля» для описания поведения производителей товаров в рамках олигополической рыночной структуры.....	90
<i>Гилин С.В.</i> Разработка гибридного метода распознавания незаконных построек в водоохранных зонах на основе метода исключения областей и метода Жука.....	91
<i>Голубев Р.А.</i> Полулагранжевы методы решения уравнения переноса.....	92
<i>Горбунова К.Д.</i> Применение компактной разностной схемы в гидродинамической модели истечения атмосферы планеты TOI-421b.....	93
<i>Ефимов Е.А.</i> Моделирование сейсмических волн в средах с различной реологией.....	94
<i>Зайцев Н.Е.</i> Автоматизация определения температуры поверхности земли на территории центральной Сибири по данным Landsat 8-9.....	95

<i>Зубрицкий П.А.</i> Снятие современного экологического состояния окружающей среды с применением ГИС-технологий.....	96
<i>Капитонов А.А.</i> Математическое моделирование нанофльтрации водных растворов с помощью управляемых электрическим полем мембран.....	97
<i>Краснощеков К.В.</i> Исследование «цветения» реки Енисей на территории Красноярска по данным ДЗЗ.....	98
<i>Лапо Т.В.</i> Однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ зависимости загрязнения атмосферного воздуха от метеоусловий.....	99
<i>Лев Н.А.</i> Методы прогнозирования временных рядов в задаче анализа уровня концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе г. Красноярска.....	100
<i>Малимонов М.И.</i> Система поиска сотрудников на основе геопространственной базы данных ELSAN.....	101
<i>Мальшева Ж.О.</i> Математическое моделирование деформации блочной среды при импульсном нагружении.....	102
<i>Матушко А.К.</i> Возможности применения тепловых космических снимков LANDSAT 8-9 COLLECTION 2 LEVEL 2 при анализе городской территории.....	103
<i>Моляко А.А.</i> Анализ микробиоты больных рассеянным склерозом при помощи метода Шайдурова.....	104
<i>Полянчикова Д.В.</i> Анализ метеорологических условий с использованием метода главных компонент.....	105
<i>Сиротинин А.А.</i> Методы проектирования сети беспроводных точек доступа для технологии интернета вещей.....	106
<i>Стрекаловский И.А.</i> Поведение ошибки нахождения максимального собственного значения симметричной неотрицательно определенной матрицы в зависимости от параметра в стационарном ортогонально-степенном методе.....	107
<i>Хомколов И.В.</i> Вычислительная методика обработки и анализа изображений медицинского эксперимента с использованием шварлет-преобразования.....	108
Секция «Школы РАН»	109
<i>Бери Д.А., Продайвода М.В.</i> Восстановительное каталитическое фракционирование отходов агропромышленности.....	110
<i>Богряцова З.Э., Качанова И.В., Лоренц А.Е., Мельникова А.А.</i> Комплексная оценка загрязнения снегового покрова урбанизированной территории г.Красноярска.....	111
<i>Бударина Т., Михасова К.</i> Изменение углеводного состава меда в процессе термообработки.....	112
<i>Бухаров А.А., Глазырин В.Ю., Гусева У.В., Ключанцев А.О., Лукьяненко К.А.</i> Разработка микрофлюидного пассивного перемешивателя для систем «орган-на-чипе».....	113
<i>Варкентин А.В., Утимишева Е.С.</i> Разработка твердых катализаторов на основе цитрусовых отходов для процессов переработки компонентов растительной биомассы в ценные химические продукты; этерификация леволиновой кислоты.....	114
<i>Головков Е.Р., Смирнов Д.В.</i> Инверсионно-вольтамперметрическое определение металлов в винах.....	115

<i>Гриценко В.А., Добров А.Ф.</i> Комплексная переработка цитрусовых отходов с получением ценных химических продуктов	116
<i>Дружинина В.В.</i> Твердые Ni-катализаторы на основе цитрусовых отходов; получение γ -валеролактона из леулиновой кислоты	117
<i>Жвания А.И.</i> Нахождение распределения наночастиц золота по размеру	118
<i>Захарченко А.В.</i> Комплексная экстракционная переработка коры пихты, повреждённой стволовыми патогенами, в вещества с добавленной стоимостью.....	119
<i>Капкан С., Муравьева А.</i> Влияние способа приготовления моркови на содержание каротина	120
<i>Карамалла Н.М.</i> Азопроизводные этанолигнина сосны в качестве потенциальных добавок в солнцезащитные средства для кожи	121
<i>Клейн М.А., Давыдова Н.Д., Ермакова Л.С., Шапкина Е.В., Носков Е.А., Копылова К.В.</i> Взаимосвязь личностных особенностей подростков с использованием электронных устройств для курения	122
<i>Коваленок М., Дик Д., Абдрахимова Р., Булдакова Л., Стативо Б., Римацкая Н.В.</i> Зависимость набора мышечной массы от питания и физической нагрузки у подростков 14-15 лет	123
<i>Куц С.А., Новоселов С.М.</i> Изучение влияния механической обработки древесины на её химические свойства методом ИК-спектроскопии.....	124
<i>Лебедева С.Д.</i> Получение наночастиц из органосольвентных лигнинов. Изучение их свойств.....	125
<i>Лучковская В.Н., Катцына В.А.</i> Исследование антиоксидантной активности гемицеллюлоз хвои, коры и древесины ели	126
<i>Максимова О.Т.</i> Содержание тяжелых металлов в лакокрасочных покрытиях	127
<i>Пахомова К.А.</i> Выделение и исследование гемицеллюлоз листьев малины, полученных методом окислительной делигнификации	128
<i>Попова Е.Ф.</i> Изучение состава пластика методом ИК-спектроскопии	129
<i>Рыжова А.А., Колыбзева В.Н.</i> Применение бентонитовых глин для нейтрализации отходов, хранящихся в картах-накопителях Байкальского ЦБК.....	130
<i>Саркарова Д.М., Ленкова П.С.</i> Синтез леулиновой кислоты из цитрусовых отходов; катализ на твердых кислотах	131
<i>Сиделева А.Р., Смолянец Д.Д.</i> Сравнительная характеристика бентонитовых глин месторождений Республики Хакасия «10-й Хутор» и «Кайбальское-2»	132
<i>Шишкина Е., Харитоновна М.</i> Спектральное изучение селен-трифторацетона	133
<i>Юдасин Л.А.</i> Компьютерная симуляция взаимодействия фотона с электронной оболочкой атома.....	134
<i>Ягодников С.Н., Шестопалова А.Д., Калицинская Б.С., Колтакова Л.Н., Чернов И.Д., Губина З.С., Сухоруков В.В.</i> Исследование динамики восприятия звуковых волн слуховым анализатором в зависимости от возраста человека.....	135

Секция «Физика»

Плавное управление закруткой светочувствительного холестерика в ячейке с тангенциальными граничными условиями

Абдуллаев Абылгазы Сабиралиевич
ФИЦ КНЦ СО РАН

Холестерические жидкие кристаллы (ХЖК) характеризуются геликоидальным ориентационным упорядочением молекул и обладают уникальными оптическими свойствами, зависящими от шага спирали холестерика. При этом формирующаяся закрученная ориентационная структура чувствительна к внешним факторам. В последнее время появился значительный интерес к системам на основе светочувствительных ХЖК, шаг спирали которых изменяется под воздействием света [1]. Это позволяет реализовать настройку оптических параметров устройств дистанционно, без непосредственного подключения управляющих элементов, например, электрических проводов, к слою холестерика. Ранее в работе [2] было показано, что шаг спирали светочувствительного холестерика при жестких граничных условиях меняется скачкообразно. Данная работа посвящена изучению возможности плавной и непрерывной перестройки шага спирали в слое светочувствительного холестерика при тангенциальных граничных условиях.

В работе исследовалась ячейка ХЖК, состоящая из двух стеклянных подложек. На одну подложку наносился тонкий слой поливинилового спирта (ПВС) и механически однонаправленно натирался. Другая подложка была покрыта пленкой политретбутилметакрилатом (ПтБМА). В качестве ХЖК использовался нематик ЛН-396, допированный левозакручивающей хиральной добавкой S811 и светочувствительной правозакручивающей хиральной добавкой в концентрациях 8,44 % и 2,30 %, соответственно. Используемая холестерическая смесь демонстрирует инверсию хиральности холестерической спирали. В работе наблюдался плавный поворот азимутального угла закрутки директора слоя ХЖК, причем морфология слоя ХЖК во всем диапазоне оставалась однородной и бездефектной (рис. 1). Это свидетельствует о том, что ПтБМА формирует азимутально вырожденное тангенциальное сцепление. Такие системы позволяют реализовать плавную и тонкую настройку оптических параметров, что может быть использовано, например, для разработки вращателя поляризации белого света.

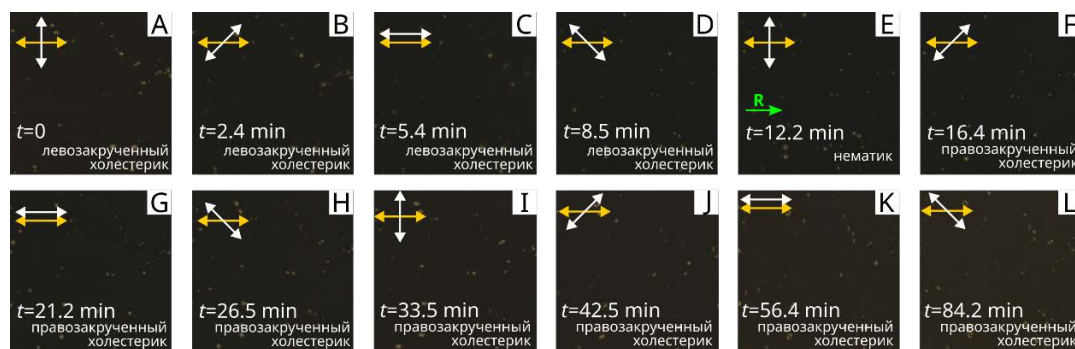


Рис. 1. Фотографии слоя ХЖК с тангенциальными граничными условиями в исходном состоянии (А), и сделанные в процессе воздействия белого света осветительной системы микроскопа в моменты, когда минимум пропускания соответствовал углу между анализатором и поляризатором -45° (В), 0° (С), 45° (D), 90° (E), 135° (F), 180° (G), 225° (H), 270° (I), 315° (J), 360° (K), 405° (L). Направление поляризатора и анализатора показаны двойной желтой и белой стрелками, соответственно. Направление натирки R пленки ПВС обозначено одинарной стрелкой

Автор выражает благодарность соавторам работы: Крахалеву М. Н., Зырянову В. Я.

Литература:

- [1] Chen, P., Ma, LL., Hu, W. et al. Nature Communications, 10, 2518 (2019).
[2] Liu, C.-K., Tsai, M.-C., Morris, S. M. et al. Journal of Molecular Liquids, 256 (2018).

Синтез тонких плёнок хром- и марганецсодержащих МАХ-фаз

Андрющенко Татьяна Александровна

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

МАХ-фазы ($M_{n+1}AX_n$, где $n = 1, 2, 3, 4$) являются нанослоистыми гексагональными карбидами или нитридами переходных металлов (M – переходный металл, X – углерод или азот), разделенными слоями элементов из XIII-XV групп периодической системы (A -элемент). Наличие магнитных свойств у МАХ-фаз определенных составов позволяет рассматривать их в качестве кандидатов для применения в магнитной записи, магнитном охлаждении, спинтронике [1], а их двумерные производные – максены – являются потенциальными представителями класса материалов, обладающих двумерным магнетизмом.

В рамках данной работы проводился синтез хром- и марганецсодержащих тонких плёнок МАХ-фаз на подложках $Al_2O_3(0001)$ и $MgO(111)$ методами импульсного лазерного напыления (PLD-метод) и магнетронного соосаждения с последующим анализом методами дифракции отраженных быстрых электронов и Оже-электронной спектроскопии.

PLD-методом выполнялось осаждение фаз Cr_2GeC и Mn_2GeC , идентификация полученных образцов проводилась рентгеноструктурным анализом. Для синтеза фазы на основе хрома оказалось характерным получение структур с избыточным содержанием германия и графита в полученных образцах, а для марганецсодержащей фазы – формирование антиперовскита Mn_3GeC и графита. В целях усовершенствования технологического процесса химический вид очистки подложек $MgO(111)$ был заменен ионным травлением из-за гигроскопичности материала, а также была создана программа для автоматизации процесса получения тонких плёнок МАХ-фаз PLD-методом, тестирование которой ведётся в настоящее время.

Синтез тонких плёнок МАХ-фаз Cr_2GeC и $(Cr_{0,75}Mn_{0,25})_2GeC$ толщиной 10-100 нм проводился магнетронным соосаждением при температуре подложек около $850^\circ C$, расчёт технологических параметров выполнялся с помощью программы [2]. Тонкие плёнки МАХ-фаз Cr_2GeC и $(Cr,Mn)_2GeC$ без присутствия вторичных фаз были получены в случаях отклонения технологической стехиометрии от соотношения 2:1:1, а именно, при увеличении концентрации углерода и M -элемента на 10 и более процентов. Вторичными фазами, образующимися в результате осаждения данным методом при иных параметрах синтеза, являются германиды хрома.

Оже-электронная спектроскопия поверхности полученных тонких плёнок свидетельствует о накоплении заряда некоторыми образцами, что может быть связано с островковым механизмом роста тонких плёнок на MgO [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-12-00226, <http://rscf.ru/project/21-12-00226/>. Автор выражает благодарность соавторам работы: Лященко С.А., Варнакову С.Н., Шевцову Д.В., Яковлеву И.А.

Литература:

- [1] Novoselova I. P. et al, *Scientific Reports*, V.8(1), PP. 2637 (2018).
- [2] Андрющенко Т.А., Лященко С.А. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023611340 (2023).
- [3] Chang C. C. *Characterization of solid surfaces*. New York: Plenum Press, 1974.

Топологические фазы с множеством майорановских мод в сверхпроводящей нанопроволоке при учете дальних перескоков и спариваний

Гамов Александр

Сибирский федеральный университет

В последнее время представляет интерес описание топологических фаз с множеством краевых майорановских мод, которые могут формироваться в сверхпроводящих нанопроволоках при учете взаимодействий [1, 2], цепочках с магнитными атомами [3] и под действием управляющих внешних полей периодических во времени [4].

В данной работе для модели полупроводниковой нанопроволоки с наведенной сверхпроводимостью и спин-орбитальной связью, помещенной в магнитное поле, определены топологические фазовые диаграммы при учете перескоков, в том числе с переворотом спина, и спариваний в первой и второй координационных сферах (КФ). Показано, что учет процессов во второй КФ приводит к возникновению новых нетривиальных фаз со значением топологического индекса $N_{BDI} = 3$ и $N_{BDI} = 4$ (см. рис. 1 А)). Считается, что все параметры в пределах одной КФ равны и обозначаются λ_i , где i – номер КФ. Зависимость топологического индекса от отношения λ_2/λ_1 приведено на рис. 1 Б). Видно, что с ростом этого отношения реализуется серия квантовых топологических переходов. Проверено, что в нанопроволоке с открытыми граничными условиями число пар краевых майорановских мод соответствует значению N_{BDI} .

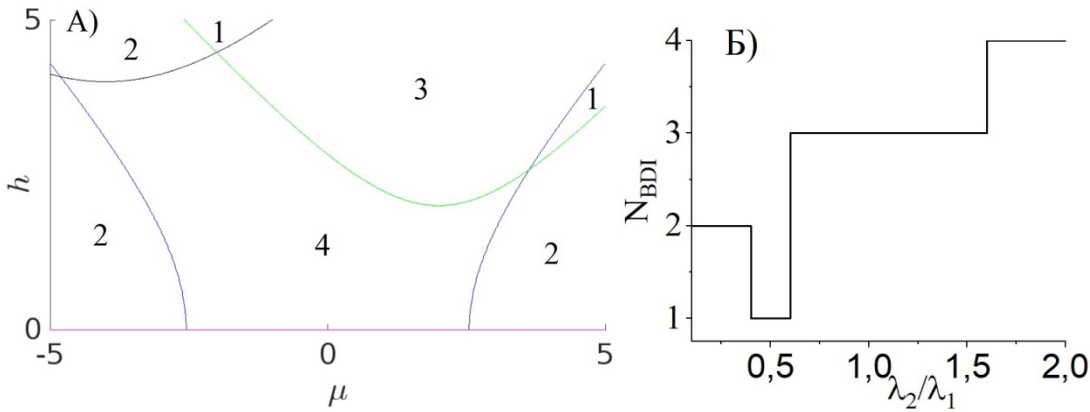


Рис. 1. А – Топологическая фазовая диаграмма в переменных химпотенциал μ – зеемановское расщепление h для амплитуды $\lambda_2=2$ (все в единицах λ_1); Б – серия топологических переходов с изменением индекса N_{BDI} при увеличении отношения λ_2/λ_1 для $h = 1.5$, $\mu = 0$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис». Автор выражает благодарность научному руководителю Злотникову А.О.

Литература:

- [1] Y. Niu, S. B. Chung, C.-H. Hsu, I. Mandal, S. Raghu, and S. Chakravarty, Phys. Rev., V. 85, P. 035110 (2012).
- [2] S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, M. S. Shustin, Phys. Rev., V. 101, P. 125431 (2020).
- [3] A. A. Bepalov, Phys. Rev., V. 106, P. 134503 (2022).
- [4] H. Wu, S. Wu, and L. Zhou, Floquet Topological Superconductors with Many Majorana Edge Modes: Topological Invariants, Entanglement Spectrum and Bulk-Edge Correspondence, arXiv:2303.04674 (2023).

Угловые зависимости поляризованных спектров КРС и КР-картирование металлоорганических каркасов

Головкина Елена Вячеславовна

Сибирский Федеральный Университет

Металлоорганические каркасы представляют собой кристаллические твердые вещества, в которых атомы металла или оксида металла соединены органическими линкерами и образуют кристаллическую решетку. Некоторые из таких веществ являются перестраиваемыми, что означает, что несколько стабильных кристаллических структур могут быть получены путем абсорбции и десорбции.

Кристаллы металлоорганических каркасов имеют размер менее 0.1 мм и не имеют правильной огранки вдоль кристаллографических осей. Для изучения таких неориентированных кристаллических веществ появилась необходимость разработки методики измерения спектров микрокристаллов, благодаря которой в результате периодического вращения кристалла и измерения соответствующих данному углу спектров удаётся получить угловые зависимости спектров, анализ которых дает распределение максимумов линий спектра по углам.

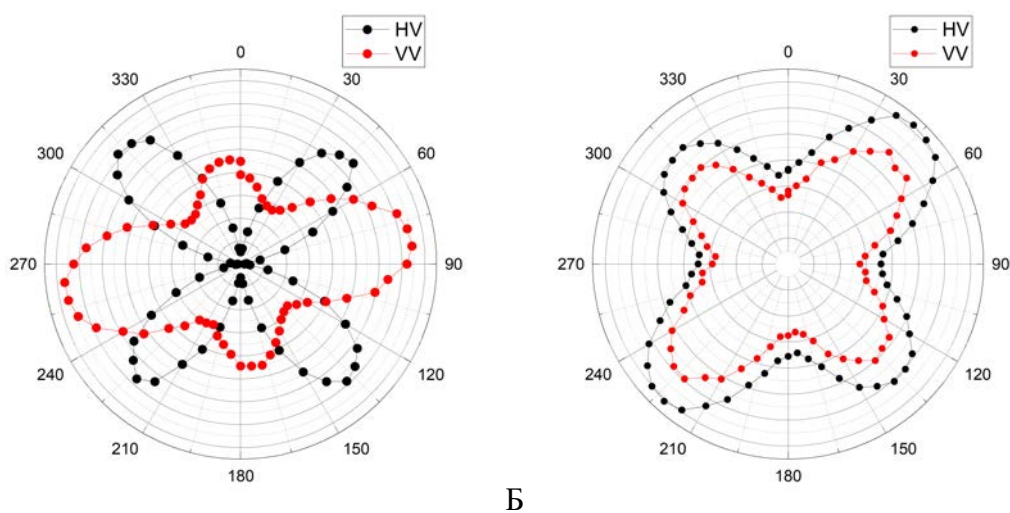


Рис. 1. Угловые зависимости линий КРС. А - 865 см^{-1} и Б - 3075 см^{-1} в различных поляризациях HH и HV в полярных координатах для кристалла САШ-744

В работе проведено исследование металлоорганических каркасов семейства DUT и САШ. Сопоставив результаты с модельными расчетами, представляется возможность распознать группу симметрии колебаний кристалла, а также выяснить отличительные признаки спектра различных фаз металлоорганических каркасов.

Ввиду обнаружения изменения интенсивности линий-индикаторов в пределах монокристалла каркаса была также сконструирована приставка по проведению КРС-картирования кристалла, проведены измерения ее параметров и погрешности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Немецкого научно-исследовательского сообщества в рамках научного проекта № 21-52-12018.

Исследование продуктов твердофазных реакций в тонких пленках Sn/Co/MgO(001) при вакуумном отжиге

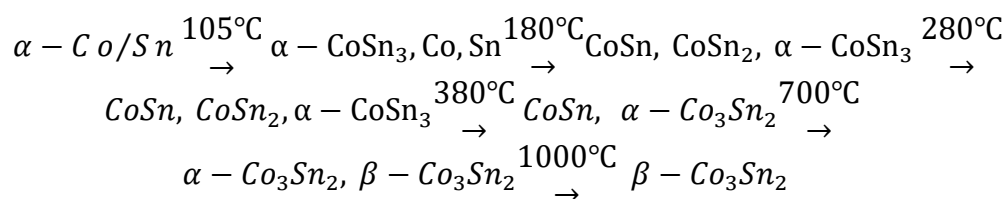
Еремин Леонид Аркадьевич

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

Данная работа посвящена исследованию продуктов твердофазных реакций в тонкопленочной системе Sn/Co в результате термической обработки.

Тонкопленочные образцы Sn/Co, изготовленные на подложках из стекла, MgO, методом термического испарения в вакууме отжигались в вакууме порядка 10^{-6} Торр с шагом в 100° , время отжига 1ч, в диапазоне температур от комнатной до 1000°C . На каждом шаге отжига проводился рентгеноструктурный анализ состава образцов, а также исследование изменения константы анизотропии и намагниченности образцов. Также для образцов, изготовленных на подложках из ситалла, была снята и исследована зависимость сопротивления от температуры.

Исходя из результатов эксперимента, были определены фазовая последовательность в тонкопленочной системе Sn/Co:



Температура инициирования реакции составила $T_i=105^\circ\text{C}$. Намагниченность и константа перпендикулярной магнитной анизотропии уменьшаются с увеличением температуры отжига, что связано с уменьшением доли свободного кобальта в системе.

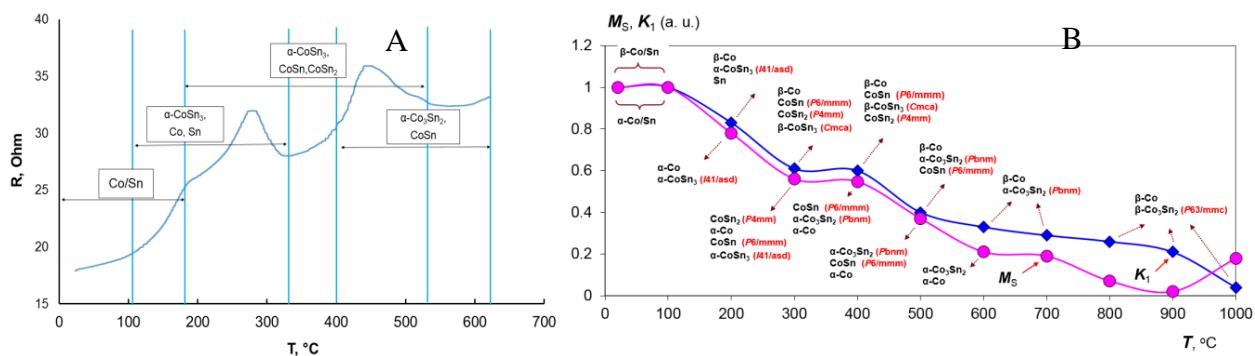


Рис. 2. А – Зависимость электрического сопротивления образца от температуры; В – изменение константы анизотропии и намагниченности от температуры отжига

Литература:

- [1] G.P. Vassilev, K.I. Lilova, J.C. Gachon *et al.* // *Intermetallics* 15, 1156-1162 (2007).
- [2] 4.S. Chikazumi. J. // *Appl. Phys.* 32, S81 (1961)
- [3] Magagnin, L., Sirtori, V., Seregini, S., Origo, A.Cavallotti, P.L.: Electroless Co-P for diffusion barrier in Pb-free soldering. // *Electrochim. Acta* 50, 4621-4625 (2005).
- [4] S.K. Cho, H.S. Han, C.K. Lee, C.I. Ahn, J.I. Park// *Mater. Sci. Forum* 439, 57-61 (2003).

Влияние спин-орбитального взаимодействия на поверхность Ферми в модели пниктидов железа

Иванов Данил Алексеевич

Сибирский федеральный университет

В данной работе рассматривается влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в модели пниктидов железа в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку [1]. В первом из рассмотренных вариантов используется только лишь z -компонента спин-орбитального взаимодействия [2], во втором же учтены сразу все его компоненты.

На рис. 1 показан первый вариант влияния с тремя наборами параметров, зависящих от значений λ и λ' , соответствующих константам спин-орбитального взаимодействия внутри одного атома железа и между двумя атомами железа в элементарной ячейке. Чем больше значения этих величин, тем сильнее происходит расщепление, и тем отчетливее проявляется нарушение первоначальной симметрии.

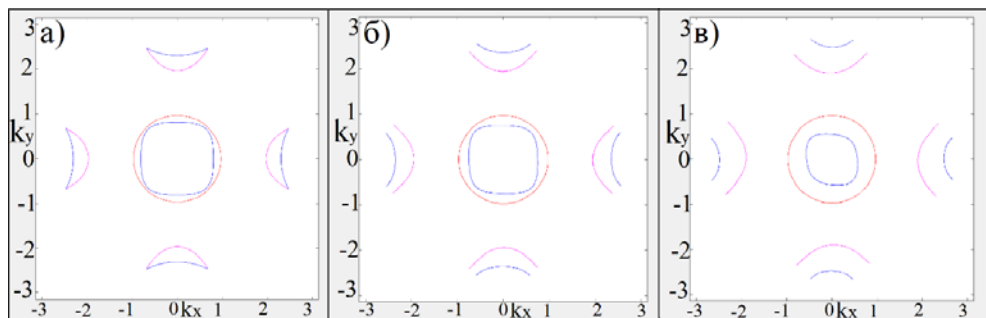


Рис. 1. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии z -компоненты спин-орбитального взаимодействия: А - $\lambda = \lambda' = 0$; Б - $\lambda = \lambda' = 0,2$; В - $\lambda = \lambda' = 0,4$.

Аналогичным образом на рис. 2 представлен второй вариант, соответствующий учёту всех компонент спин-орбитального взаимодействия.

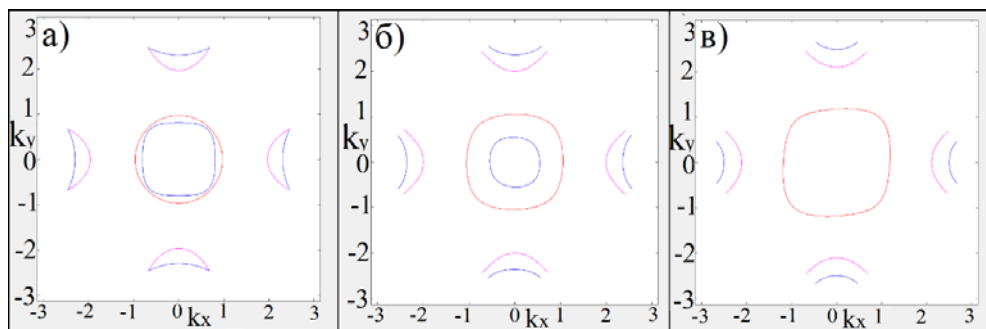


Рис. 2. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии всех компонент спин-орбитального взаимодействия: А - $\lambda = \lambda' = 0$; Б - $\lambda = \lambda' = 0,2$; В - $\lambda = \lambda' = 0,4$.

Видно, что в обоих случаях, межатомное спин-орбитальное взаимодействие приводит к топологическому переходу – контуры листов поверхности Ферми вблизи точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ из замкнутых становятся открытыми.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Коршунов М.М.

Литература:

- [1] Korshunov M.M., Togushova Y.N. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2018, 11(4), 430–437 (2018).
- [2] Eremin I., Manske D., Bennemann K.H. Phys. Rev. B 65, 220502(R) (2002).

Эволюция оптических вихрей в ближней зоне и их пространственное упорядочение за вилкообразной решеткой

Иконников Денис Андреевич

Институт физики СО РАН

Оптические вихри (ОВ) представляют собой особый вид структурированных оптических полей [1], имеющих геликоидальный волновой фронт, описываемый фазовым членом $\exp(-i\ell\phi)$. Геликоидальный волновой фронт приводит к кольцевому распределению интенсивности и появлению оптической (фазовой) сингулярности (ОС) в центре ОВ, где оптическая фаза не определена, а интенсивность стремится к нулю. Оптические вихри нашли множество применений, начиная от оптических коммуникаций и заканчивая оптической микроскопией высокого разрешения и оптическими манипуляциями [2-3]. Для создания оптических вихрей, среди прочего, широко используются вилкообразные решетки (ВР). ВР имеют точечный дефект, нарушающий периодичность регулярной структуры, что приводит к формированию ОВ в порядках дифракции в дальней зоне дифракции.

В данной работе была теоретически и экспериментально исследована дифракция Френеля на амплитудной вилкообразной решетке, что приводит к формированию пространственно упорядоченного распределения интенсивности в ближней зоне, напоминающего эффект Талбота для периодических структур. Показано, что при дифракции на вилкообразной решетке, в ближней зоне формируется пространственно упорядоченное распределение интенсивности света, характерное для эффекта Тальбота на периодических структурах. Сочетание многих порядков дифракции приводит к образованию набора сингулярностей противоположного знака. При этом в плоскости перпендикулярной распространению нулевого порядка дифракции сингулярности выстраиваются в виде двух групп кривых линий, локализованных вокруг направлений на ± 1 порядки дифракции соответственно. При движении вдоль оси распространения массивы сингулярностей вращаются вокруг этих направлений по геликоидальным траекториям. Положение сингулярностей совпадает с минимумами в квазипериодических распределениях интенсивности. Таким образом, имеет место сосуществование оптических особенностей с пространственно упорядоченным распределением интенсивности, определяемым трансляционной симметрией периодической решетки. Полученные результаты демонстрируют первое свидетельство эффекта Тальбота, возникающего при дифракции света на вилкообразных решетках, что является многообещающим для глубокого понимания явлений сингулярной оптики ближнего поля [4].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 19-12-00203. Автор выражает благодарность соавторам работы: Мысливец С. А., Давлетшин Н. Н., Барон Ф. А., Архипкин В. Г., Выюнышев А. М.

Литература:

- [1] Rubinsztein-Dunlop H., Forbes A., Berry M.V., Dennis M.R., Andrews D.L., Mansuripur M., Denz C., Alpmann C., Banzer P., Bauer T., Journal of Optics, V.19, P. 013001 (2016).
- [2] Mirhosseini, M., Magaña-Loaiza O.S., O'Sullivan M.N., Rodenburg B., Malik M., Lavery M.P.J., Padgett M.J., Gauthier D.J., Boyd R.W., New Journal of Physics, V.17, P. 033033 (2015).
- [3] Gahagan, K.T., Swartzlander G.A., Optics Letters, V.21, PP. 827-829 (1996).
- [4] Ikonnikov D.A., Myslivets S.A., Davletshin N.N., Baron F.A., Arkhipkin V.G., Vyunishev A.M., Annalen Der Physik, V.535, P. 2200480 (2023).

Закономерности полимеризации эндоэдральных металлофуллеренов при высоких давлениях

Ковалева Евгения Андреевна
ФИЦ КНЦ СО РАН

Низкоразмерные углеродные структуры, в частности, фуллерены многие годы привлекают повышенное внимание исследователей по всему миру благодаря своим уникальным физико-химическим, механическим, оптическим и электронным свойствам, находящим применение в различных областях. Известно, что при повышенных температурах и давлениях фуллерен C_{60} претерпевает ряд структурных изменений, приводящих к образованию полимеров, структура которых зависит от условий их получения. Такие полимеры особенно интересны ввиду разнообразия их возможных применений: от элементов солнечных батарей до сверхтвердых материалов. Тем не менее, описание процесса полимеризации на атомном уровне представляет достаточно сложную задачу, для решения которой необходимо привлечение квантово-химических методов. Особый класс соединений представляют собой эндоэдральные фуллерены, содержащие атомы внутри углеродного каркаса, что позволяет управлять их свойствами. Так, введение в структуру атомов металлов позволяет изменить ее сродство к электрону по сравнению с исходным углеродным каркасом. Полимеры, образованные из такого рода соединений, могут найти применение в самых разных областях. Тем не менее, до настоящего момента экспериментальные исследования в этой области ограничены, так как требуют масштабных систематических работ.

Большую роль в исследовании такого типа структур играет их теоретическое моделирование с привлечением методов молекулярной динамики [1-3] и квантово-химических расчетов, позволяющих, в частности, определить детали механизма их формирования на атомном уровне [1,3-5].

Настоящая работа посвящена исследованию процесса структурной перестройки эндоэдральных металлофуллеренов при высоких давлениях. Показана ключевая роль эндоэдральных атомов, существенно влияющих на процесс полимеризации по сравнению с фуллеренами без присутствия дополнительных атомов внутри углеродного каркаса [1]. Присутствие фрагментов Sc_2C_2 заметно облегчает полимеризацию фуллеренов, приводя к образованию жесткой структуры при высоких давлениях.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Ерохину С.В., Чуркину В.Д., Внуковой Н.Г., Высотину М.А., Жукову В.В., Антипиной Л.Ю., Томашевичу Е.В., Михлину Ю.Л., Попову М.Ю., Чурилову Г.Н., Сорокину П.Б.

Литература:

- [1] Erohin S.V., Churkin V.D., Vnukova N.G., Visotin M.A., Kovaleva E.A., Zhukov V.V., Antipina L.Y., Tomashevich Y.V., Mikhlin Y.L., Popov M.Y., Churilov G.N., Sorokin P.B. Carbon, V. 189, PP. 37-45 (2022).
- [2] Fedorov A.S., Kuzubov A.A., Kholtochina A.S., Kovaleva E.A., Knaup J., Irle S. Journal of Physical Chemistry A, V. 120, № 49, PP. 9767-9775 (2016).
- [3] Shepkasov I.V., Visotin M.A., Kovaleva E.A., Manakhov A.M., Baidyshev V.S., Popov Z.I. Journal of Physical Chemistry C, V. 122, № 31, PP. 18070–18076 (2018).
- [4] Baek W., Gromilov S.A., Kuklin A.V., Kovaleva E.A., Fedorov A.S., Sukhikh A.S., Hanfland M., Pomogaev V.A., Melchakova I., Avramov P.V., Yusenko K. Nano Letters, V. 19, №3, PP. 1570-1576 (2019).
- [5] Krasnov P.O., Shkaberina G.S., Kuzubov A.A., Kovaleva E.A. Applied Surface Science, V. 416, PP. 766-771 (2017).

Управление поляризацией света, прошедшего слой хирального нематика с планарно-коническими граничными условиями

Костиков Денис Андреевич
ФИЦ КНЦ СО РАН

Благодаря особенностям молекулярного упорядочения, жидкие кристаллы (ЖК) обладают анизотропией физических свойств и способностью менять параметры при минимальных внешних воздействиях. Структура каламитных ЖК характеризуется распределением директора - единичного вектора, ориентированного вдоль преимущественной ориентации длинных осей молекул. Ориентационная структура директора зависит от граничных условий. ЖК системы с планарным и гомеотропным сцеплениями, характеризующимися углами наклона директора $\theta_{0,P} \approx 0^\circ$ и $\theta_{0,H} \approx 90^\circ$, соответственно, широко используются. Отличные от них характеризуются коническим сцеплением с азимутальной свободой ориентации директора и его фиксированным углом наклона (полярным углом) в диапазоне $0^\circ < \theta_0 < 90^\circ$. ЖК системы с коническим сцеплением на сегодняшний день менее исследованы, при этом они обладают рядом исключительных свойств, а также характеризуются уникальными структурными трансформациями. В данной работе рассматривалось влияние электрического поля на структуру хирального нематика с гибридным планарно-коническим сцеплением и поляризацию света, прошедшего через нее.

Исследовались ЖК ячейки на основе нематика ЛН-396, допированного холестерилацетатом. Нижняя подложка задавала планарное сцепление за счет натертой пленки поливинилового спирта (PVA), на верхней подложке обеспечивались конические граничные условия посредством ориентирующей пленки на основе смеси полимеров полиизобутилметакрилата (PiBMA) и политретбутилметакрилата (PtBMA) с различным соотношением полимеров. Углы наклона директора определялись из зависимости фазовой задержки от угла падения света на ЖК слой [1]. Формирующиеся структуры хирального нематика, помимо граничных условий, зависят от отношения толщины ЖК слоя d к шагу спирали p . В данной работе исследования проводились для ЖК ячеек с величиной $d/p = 0,6$.

Варьирование весового соотношения полимеров PiBMA и PtBMA позволило нам получить различные углы наклона директора на подложке с коническим сцеплением. Были изучены формирующиеся структуры в хиральном нематике, а также их электрооптический отклик. Были получены зависимости поляризационных компонент света, прошедшего через образец, от электрического поля, приложенного перпендикулярно слою (рис. 1А). Были определены критические напряжения, когда происходит нарушение волноводного режима Могена, при котором поляризация излучения следует за закруткой директора (рис. 1В).

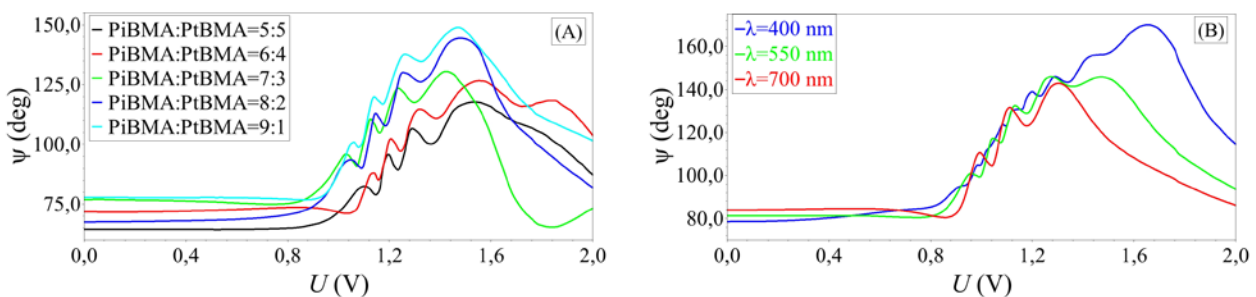


Рис. 3. А - экспериментальные зависимости азимута поляризации света ψ ($\lambda = 632,8$ нм), прошедшего через образцы, от приложенного напряжения U для ячеек с различным соотношением полимеров PiBMA : PtBMA; В - зависимости, полученные для трех длин волн света, прошедшего через ЖК ячейку с соотношением полимеров PiBMA : PtBMA = 9:1

Литература:

[1] D. A. Kostikov et.al. Polymers, V. 13, P. 2993, 2021.

Методика расчета бюджета канала ближнепольной магнитной системы связи

Креков Сергей Дмитриевич

Сибирский федеральный университет

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

Беспроводные системы связи, в которых передача сигнала осуществляется посредством магнитного поля, генерируемого передающей антенной, называются ближнепольными магнитными системами связи (БПМСС). В таких системах затухание амплитуды генерируемого магнитного поля с расстоянием составляет 60 дБ на декаду, что существенно ограничивает дальность связи в БПМСС. Однако, в сравнение с электромагнитной (ЭМ) волной, величина затухания магнитного поля в меньшей степени зависит от проводимости и диэлектрической проницаемости среды. Поэтому при организации беспроводной связи в подземных и подводных пространствах БПМСС оказываются эффективнее ЭМ-систем.

В качестве передающих антенн в БПМСС применяются катушки индуктивности. По формулам, выведенным Дугласом-Вернером [1] для круглого витка с током, можно рассчитать амплитуду магнитного поля индукционной антенны в заданной точке пространства с учетом проводимости и диэлектрической проницаемости среды распространения сигнала:

$$H_r = N \frac{k(kR)^2 I \cos \theta}{2i} e^{-ik\sqrt{r^2+R^2}} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{2m-1} D_{ml}^2 \frac{[(k^2 R r \sin \theta)/2]^{2m-2}}{(k\sqrt{r^2+R^2})^{2m+l}}, \quad k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_r + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0 \omega}},$$
$$H_\theta = -N \frac{k(kR)^2 I \sin \theta}{2i} e^{-ik\sqrt{r^2+R^2}} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{2m-1} D_{ml}^2 \frac{[(k^2 R r \sin \theta)/2]^{2m-2}}{(k\sqrt{r^2+R^2})^{2m+l}} \left(1 - \frac{r(2m+l+ik\sqrt{r^2+R^2})}{2m(r^2+R^2)} \right),$$

где N – число витков в антенне; R – радиус антенны, м; I – амплитуда тока в антенне, А; r – расстояние от антенны до заданной точки в пространстве, м; θ – зенитный угол сферической системы координат, рад; ω – циклическая частота тока в антенне, рад/с; $c = 3 \cdot 10^8$ – скорость света, м/с; ε_r – относительная диэлектрическая проницаемость среды; $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ – электрическая постоянная, Ф/м; σ – проводимость среды См/м.

В результате проведенной работы собраны теоретические сведения для расчета бюджета канала БПМСС. Методика расчета бюджета канала реализована в виде программного продукта 0, цель создания которого – упрощение этапа проведения расчетов при проектировании БПМСС. С помощью данной программы сотрудники Института физики им. Л. В. Киренского могут отвечать на вопросы, о возможности реализации БПМСС по конкретному техническому заданию. Для подтверждения достоверности результатов расчетов разработан и изготовлен демонстрационный макет цифровой БПМСС с двухпозиционной частотной манипуляцией FSK-2. Макет включает в себя два модема и обеспечивает передачу голоса на расстояниях до 20 м.

Автор выражает благодарность научному руководителю работы Изотову А. В.

Литература:

- [1] Werner D. H. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. V. 44, № 2, PP. 157–165 (1996).
- [2] Креков С. Д., Боев Н. М. Программа автоматизированного расчета бюджета канала ближнепольной магнитной связи. Программа ЭВМ №2022669574. 2022. Бюл. №8.

Спиновая восприимчивость в реалистичной модели сверхпроводящих соединений железа

Ларионов Егор Александрович

ФИЦ КНЦ СО РАН

Сибирский федеральный университет

Интерес к высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях железа определяется как практическим применением исследуемых соединений, так и наличием нерешенных проблем, связанных с описанием таких систем. В работе представлена спиновая восприимчивость для соединений железа. Расчет был сделан в реалистичной десятиорбитальной модели из работы [1]. Параметры модели подбирались для получения поверхности Ферми, повторяющей экспериментально наблюдаемую из работы [2]. Восприимчивость $\chi(q, \omega)$ вычислялась как спиновый коррелятор в приближении случайных фаз (RPA) с учётом многорбитального одноузельного кулоновского взаимодействия, параметры которого включали внутриорбитальное и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и межорбитальный перескок J' [3]. Установлено, что пик в действительной части $\chi(q, \omega = 0)$ находится вблизи вектора $q \approx (\pi, \pi)$. Рост величины хаббардовского отталкивания приводит к росту спинового коррелятора, см. Рис.1.

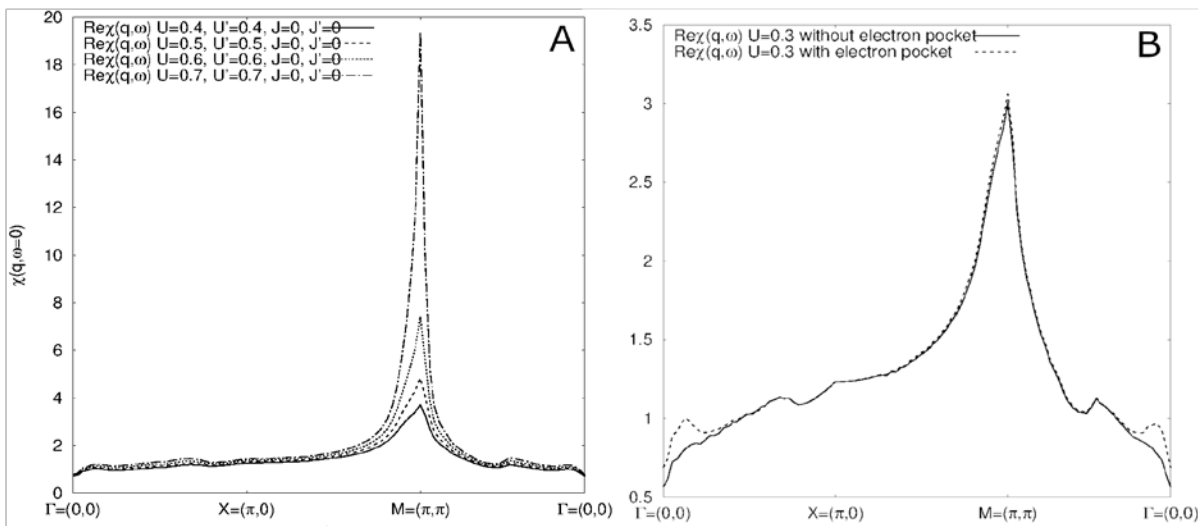


Рис. 1. А – $Re(\chi)$ на нулевой частоте $\omega = 0$ эВ как функция волнового вектора $q \in$ ГХГМ для различных значений параметра хаббардовского отталкивания; В – $Re(\chi)$ при $\omega = 0$ как функция $q \in$ ГХГМ для двух разных наборов параметров

Был сделан расчет для двух наборов параметров – один приводит к появлению электронных карманов на поверхности Ферми, а второй – нет. Проведен сравнительный анализ и установлено, что основной вклад от малых карманов проявляется в увеличении восприимчивости на малых волновых векторах.

Автор выражает благодарность соавтору работы Коршунову М.М.

Литература:

- [1] Eschrig H., Koepernik K. Physical Review B 80, 104503 PP. 6-7 (2009).
- [2] Kordyuk A.A., Zabolotnyy V.B., Evtushinsky D.V., Yaresko A.N., Büchner B., Borisenko S.V. Journal of superconductivity and novel magnetism V. 26 PP. 2837-2841 (2013).
- [3] М.М Коршунов Успехи физических наук Т. 184 С. 882–888 (2014).

Переход изолятор-проводник для взаимодействующих бозонов в ромбической решетке

Мураев Павел Сергеевич

Сибирский федеральный университет

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

В физике конденсированного состояния вещества и фотонике значительный интерес у исследователей вызывают системы, содержащие плоские энергетические зоны. В первую очередь эти системы интересны тем, что они могут поддерживать компактные локализованные собственные состояния, т.е. собственные состояния, которые распространяются на строго конечное число узлов решетки. Этот факт позволяет рассматривать данные системы как “плацдарм” для исследования различных непертурбативных фаз материи [1].

В данной работе изучается транспорт бозе-частиц через ромбическую решетку, рис. 1(a). Исследуемая система обладает рядом уникальных свойств, она демонстрирует очень необычную диссипативную динамику, что приводит к случайному устойчивому состоянию, которое является либо изолирующим, либо проводящим [2]. Исследован транспорт взаимодействующих бозе-частиц через ромбическую решетку с использованием классического (среднего поля) рис. 1(b), псевдоклассического рис. 1(c-e) и квантового подходов рис. (1d). Показано, что в классическом случае существует некоторое критическое значение параметра накачки системы Ω , после которого система переходит из изолирующего состояния в проводящее. В рамках квантового подхода численно было решено основное кинетическое уравнение для матрицы плотности взаимодействующих бозонов. Показано качественное согласие с классическим результатом при уменьшении параметра \hbar [2].

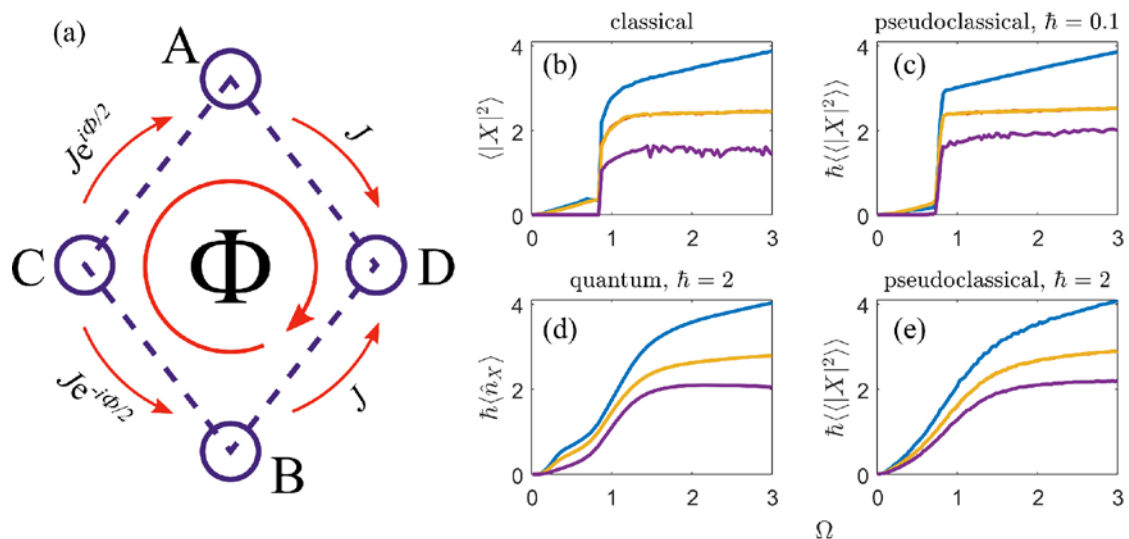


Рис. 1. Элементарный блок ромбической цепочки (a). Магнитный поток характеризуется фазой Пайерлса Φ , определяющей значение элементов матрицы перескока. Средние квадраты амплитуд классических осцилляторов в стационарном режиме (b) и средние заселенности узлов ромба при $\hbar = 2$ (d) как функции частоты Раби Ω . В классическом случае усреднение берется по ансамблю начальных условий из ε -окрестности нулевого начального условия. Результаты псевдоклассического подхода для $\hbar = 0.1$ (c) и $\hbar = 2$ (e). Синие кривые соответствуют узлу C, желтые – узлам A и B, фиолетовые – узлу D. Значение фазы Пайерлса $\Phi = 0$.

Литература:

- [1] Tovmasyan M., van Nieuwenburg E. P. L., Huber S. D., Physical Review B, V.88, PP. 220510 (2013).
- [2] Kolovsky, A. R., Muraev, P. S., Flach, S. arXiv preprint, 10.48550/arXiv. 2303.00509 (2023).

Разработка и исследование индукционного магнитометра

Негодеева Ирина Александровна

Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ

Индукционные магнитометры являются одними из наиболее часто используемых детекторов магнитного поля и используются для решения самых разных задач. Такие магнитометры обеспечивают высокую чувствительность, просты в изготовлении, надежны и имеют низкую стоимость [1].

Для многослойной катушки общее активное сопротивление переменному току может быть рассчитано следующим образом [2]

$$R_{S_AC} = R_{S_DC} \cdot \left(1 - \frac{z^2}{8} \cdot \operatorname{Im} \left(\frac{J_3(z\sqrt{-i})}{J_1(z\sqrt{-i})} \right) - u(N) \cdot \frac{d_i^2}{d_0^2} \cdot \frac{z^2}{8} \cdot \operatorname{Im} \left(\frac{J_2(z\sqrt{-i})}{J_0(z\sqrt{-i})} \right) \right), \quad (1)$$

где d_i – внутренний диаметр провода (без изолирующего покрытия), м; d_0 – расстояние между центрами проводов, м; $u(N)$ – коэффициент, необходимый для поиска сопротивления вследствие вихревых токов; J_n – функции Бесселя первого рода; R_{S_DC} – сопротивление на постоянном токе, Ом; z – глубина скин-слоя, м.

Полная индуктивность L_S получается путем суммирования собственной и взаимной индуктивностей: $L_S = L_0 + M_0$.

Для подтверждения корректности формул была намотана круглая катушка с прямоугольным сечением. Параметры катушки: тип провода – ПЭТВ-2; диаметр $d_i = 1,25$ мм; внутренний диаметр катушки $d_{in} = 80$ мм; внешний диаметр катушки $d_{out} = 116$ мм; количество слоев $N_L = 16$; количество витков на слой $N_v = 18$, расстояние между центрами проводов $d_o = 1,36$ мм. На рисунке 1 приведены результаты теоретического расчета по формулам и результаты измерений импеданса катушки с использованием прибора Keysight E4990A. Наблюдается хорошее согласие теории и эксперимента.

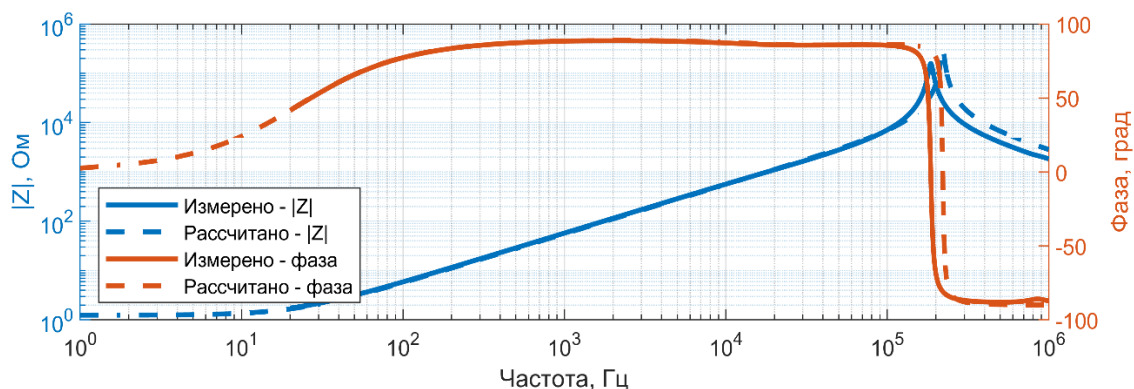


Рис. 4 – Комплексное сопротивление катушки измерено прибором Keysight E4990A и получено теоретически

Литература:

- [1] Antenna engineering handbook third edition / Richard C. Johnson // McGraw-Hill, 1993. – 1392.
- [2] Savukov, I., Seltzer, S. / Romalis, M. Detection of NMR signals with a radio-frequency atomic magnetometer. Journal of Magnetic Resonance 185, 214–220, doi:10.1016/j.jmr.2006.12.012 (2007).

Кластеризация на три группы на квантовом процессоре из пяти спинов $S = 1$, управляемом импульсами резонансных радиочастотных полей

Пичковский Иван Сергеевич

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Существует мнение, что квантовые компьютеры могут превзойти классические компьютеры для решения задач обучения без учителя [1]. Одна из популярных таких задач - задача кластеризации [2], которая заключается в разбиении множества данных из M элементов на заранее известное число групп K по близости свойств. Данная задача решилась в [3] посредством квантового отжига на кубитах (два энергетических уровня). При переходе к кутритам (три энергетических уровня) потребуется меньше элементов. Мы разрабатываем теорию управления кутритами, представленными спинами $S=1$. В предыдущих работах [3, 4] были найдены эффективный гамильтониан и последовательности селективных операторов поворота для его создания. В докладе мы рассматриваем реализацию данного алгоритма на квантовом процессоре из 5 спинов $S = 1$ с гамильтонианом:

$$H_5 = -\sum_{j=1}^5 \omega_j S_j^z + \sum_{i=j}^5 Q_j \left[3(S_j^z)^2 - 2 \right] + H_{dd},$$

где ω_j - ларморовская частота, Q_j - квадрупольные константы, $H_{dd} = 0.5 \sum_{i \neq j}^5 R_{ij} \varepsilon S_i^z S_j^z$ - гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия, где ε - масштабный множитель, а R_{ij} - расстояние между точками i и j . S_j^z - проекция на ось Z . Данная система управляется посредством селективных радиочастотных (РЧ) импульсов с частотами ω_{rf} , действующих на различные переходы между энергетическими уровнями кутрита $\omega_j^{1 \leftrightarrow 2} = E_j^1 - E_j^2 = -3Q_j + \omega_j$ и $\omega_j^{2 \leftrightarrow 3} = E_j^2 - E_j^3 = 3Q_j + \omega_j$. Гамильтониан РЧ импульса во вращающейся системе координат примет вид

$$H_{pulse} = -\sum_{j=1}^5 (\omega_j - \omega_{rf}) S_j^z + \sum_{j=1}^5 Q_j \left[3(S_j^z)^2 - 2 \right] + H_{dd} + h_{pulse} \sum_{j=1}^n (S_j^x \cos \varphi - S_j^y \sin \varphi),$$

где h_{pulse} - амплитуда импульса, φ - фаза приложенного импульса для X поворота $\varphi = 0$ или $\varphi = \pi$, в зависимости от направления поля, для Y $\varphi = 3\pi/2$ и $\varphi = \pi/2$. При этом длительность импульса должна быть кратна $2\pi/\omega_j$ и $2\pi/Q_j$. Неселективный поворот (импульс) получаем при одновременном включении двух РЧ полей с гамильтонианом:

$$H_{pulse} = -\sum_{j=1}^5 \begin{pmatrix} \omega_j - \omega_{1rf} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_j + \omega_{2rf} \end{pmatrix}_j + \sum_{j=1}^5 Q_j \left[3(S_j^z)^2 - 2 \right] + h_{pulse} \sum_{j=1}^5 S_j^x + H_{dd}.$$

В данной работе выполнено численное моделирование и найдены зависимости верности решения от физических параметров для задачи кластеризации множества из 6 элементов на 3 группы. Программа содержит 2369N РЧ импульсов, где N число шагов дискретного времени.

Исследование выполнено при финансовой поддержке фонда поддержки теоретической физики и математики «Базис» #20-1-5-41-1. Автор выражает благодарность соавтору Зобову В. Е.

Литература:

- [1] Aïmeur E., Brassard G., Gambs S., Machine Learning, V. 90, PP. 261-287. (2013)
- [2] Kumar V., Bass G., Tomlin C., Dulny J. III, QINP, V. 17, PP. 1-14 (2018).
- [3] Zobov V. E., Pichkovskiy I. S., Quantum Information Processing, V. 21, Is. 4, P. 144. (2022)
- [4] Zobov V. E., Pichkovskiy I. S., Proceeding SPIE, V. 12157, P. 540-548 (2022).

Спектры поглощения и магнитного кругового дихроизма ионов Ho^{3+} в $\text{Ho}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{Fe}_3(\text{VO}_3)_4$ при спин-реориентационном переходе

Соколов Валерий Владимирович

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

Изучены спектры поглощения и магнитного кругового дихроизма (МКД) в области полос поглощения $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ и 5F_5 иона Ho^{3+} в антиферромагнитном кристалле $\text{Ho}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{Fe}_3(\text{VO}_3)_4$ в диапазоне температур 5-90 К. Спектры поглощения полосы 5F_5 были исследованы и опубликованы в работе [1], где была найдена температура спин-реориентационного перехода $T_R = 6.9$ К. В данной работе обнаружено качественное изменение формы спектров МКД при T_R . Ниже T_R (Рис. 1А), при легкоосном состоянии кристалла, спектр МКД имеет типичную для парамагнетиков форму, т. е. состоит из диамагнитной и парамагнитной частей. Выше T_R (Рис. 1В), в легкоплоскостном состоянии, МКД имеет спектр аналогичный спектру поглощения, что характерно для парамагнитного МКД. Было показано, что в легкоплоскостном состоянии обменное поле железа, будучи перпендикулярным внешнему полю, направленному вдоль оси C_3 , подавляет обычные парамагнитный и диамагнитный МКД, но создаёт условие для появления большого температурно независимого парамагнитного МКД смешивания (В-член). С увеличением температуры спектр МКД постепенно превращается в спектр типичный для парамагнетиков с преобладанием знакопеременной диамагнитной части, поскольку влияние обменного поля уменьшается (вставка на Рис. 1С). Были вычислены парамагнитные магнитооптические активности переходов (МОА), которые определяются как отношение нулевых моментов полос МКД и поглощения. На рис. 1С показана МОА полосы поглощения как функция температуры. Обнаружено, что при $T < T_R$ парамагнитный МКД во внешнем поле уменьшается с понижением температуры в противоположность его поведению в парамагнетике. Показано, что это вызвано насыщением разности заселённости компонент расщепления основного состояния в обменном поле железа.

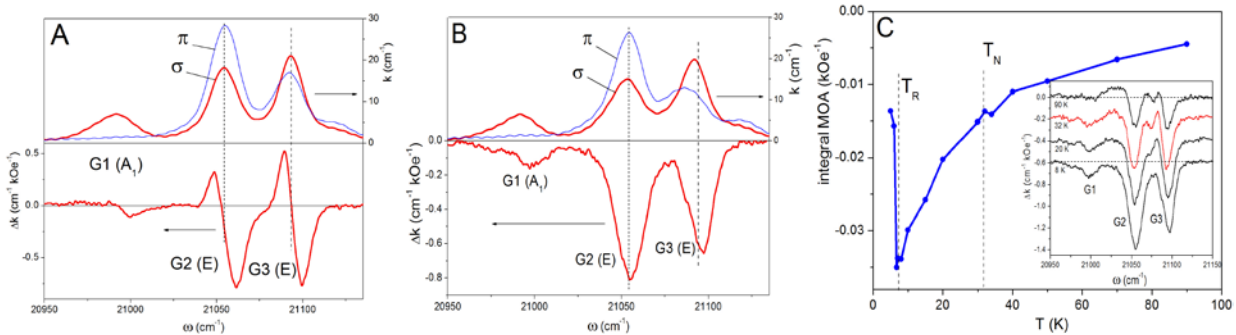


Рис. 5. Поляризованные спектры поглощения (k), МКД (Δk) перехода $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ при температуре: А) 5 К; В) 8 К. С) Магнитооптическая активность 5F_2 f-f перехода. Вставка Рис. 1С: изменение МКД в функции от температуры 8-90 К.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Малаховскому А.В., Сухачеву А.Л., Гудим И.А.

Литература:

[1] Malakhovskii, A. V., Sukhachev, A. L., Sokolov, V. V., Gudim, I. A., Kuchesheva-Titova, V. R. *Physica B: Condensed Matter*, 414706. (2023).

Электрооптический отклик КПЖК пленок на основе хирального нематика с коническими граничными условиями

Фейзер Кристина Андреевна

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

Капсулированные полимером жидкие кристаллы (КПЖК) используются в различных электрооптических компонентах. С точки зрения эксплуатации КПЖК пленок ключевыми электрооптическими характеристиками являются максимальный коэффициент светопропускания, контрастное отношение, управляющие напряжение и время отклика. В настоящее время развиваются различные подходы для улучшения этих электрооптических параметров. Одним из способов получения КПЖК пленок с малыми управляющими полями и высоким максимальным пропусканием является задание конических граничных условий для нематика [1]. Однако после выключения электрического поля такие пленки возвращаются к исходному рассеивающему состоянию в течение нескольких часов [2].

В данной работе исследован электрооптический отклик КПЖК пленок на основе капелек хирального нематика с коническим сцеплением [2]. Показано что КПЖК пленки, в которых относительный хиральный параметр капель $N_0 = 2d/p_0 \geq 0,32$ (d – диаметр капли, p_0 – шаг спирали холестерика), после выключения электрического поля возвращаются в сильно рассеивающее состояние менее чем за 85 мс, при этом напряжение насыщения возрастает с ростом N_0 , но не превышает значения $U_{90} = 25$ В (для $N_0 = 1,32$), а максимальный коэффициент светопропускания составляет примерно 90 %. Наблюдаемый возврат КПЖК пленок в рассеивающее состояние объясняется наличием двух процессов в отклике структуры капель. Один процесс – это поворот оси симметрии структуры вдоль поля, второй – раскрутка структуры под действием поля. При выключении поля сначала происходит обратная закрутка директора в каплях, а потом в течение нескольких часов переориентация оси симметрии капли. Для капель с $N_0 < 0,32$ только закрутки структуры недостаточно для появления сильного рассеяния каплями (рис. 1а), в то время как капли с $N_0 \geq 0,32$ сильно рассеивают свет при любой ориентации оси симметрии (рис. 1б).

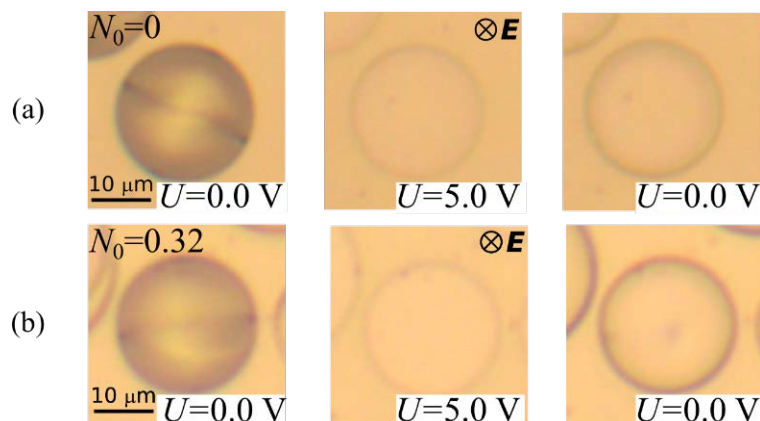


Рис. 6. Фотографии капель хирального нематика с относительным хиральным параметром $N_0 = 0$ (а) и $N_0 = 0,32$ (б) в исходном состоянии (первый столбец), при приложении напряжения $U=5$ В (второй столбец) и после выключения электрического поля (третий столбец).

Автор выражает благодарность соавторам работы: Крахалеву М.Н., Зырянову В.Я.

Литература:

[1] Фейзер К. А., Крахалев М. Н., Прищепа О.О., Сутормин В.С., Зырянов В. Я. Патент РФ № 2736815 от 14.04.2020.

[2] Фейзер К. А., Крахалев М. Н., Зырянов В. Я. Жидкие кристаллы и их практическое использование, Т. 22, № 4, С. 55-62 (2022).

Магнитоэлектрический эффект в орторомбических монокристаллах $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$

Хороший Иван Николаевич

Лаборатория сильных магнитных полей ИФ СО РАН

Исследован прямой и обратный магнитоэлектрический эффект в серии орторомбических монокристаллов с пространственной группой $Pbnm$ $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$ с замещением $x = 0 - 0.4$. Результаты измерений показали, что по мере замещения x , уменьшается как величина восприимчивости обратного магнитоэлектрического эффекта α_{ba} (рис. 1 а), так и величина поляризации P_a (рис. 1 б). Увеличивается величина поля перехода H_b и уменьшается диапазон температур, при котором наблюдается переход $P_c \rightarrow P_a$.

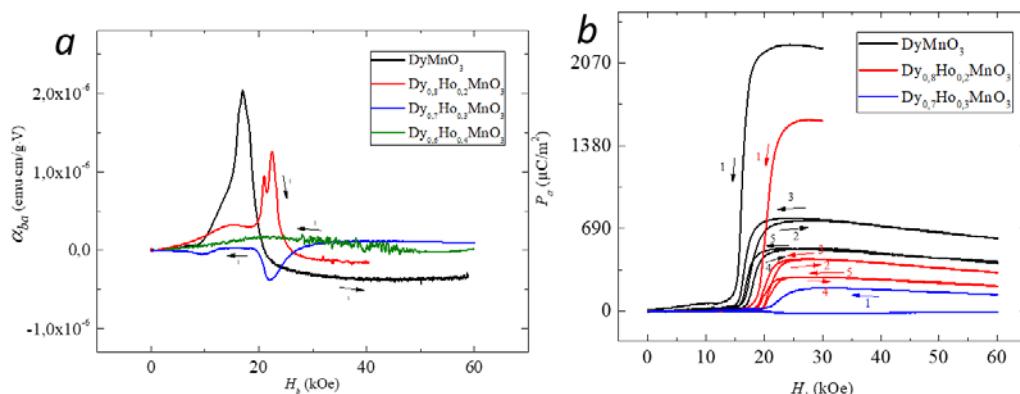


Рис. 1. А – Обратный магнитоэлектрический эффект; В – Прямой магнитоэлектрический эффект для серии орторомбических монокристаллов $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$ в зависимости от приложенного магнитного поля.

Исследования показали, что по мере увеличения содержания ионов Ho^{3+} петля гистерезиса сужается, и для $x = 0.3$ уже не проявляется (рис. 2).

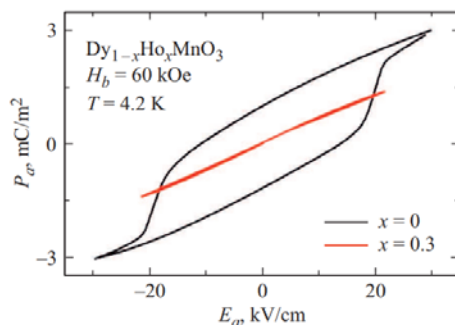


Рис. 2. Петля сегнетоэлектрического гистерезиса образцов $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$ ($x = 0, 0.3$) во внешнем магнитном поле.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №20-42-243008. Автор выражает благодарность соавторам работы: Фрейдман А. Л., Колков М. И., Терентьев К. Ю.

Литература:

- [1] Mochizuki M., Furukawa N., PHYSICAL REVIEW B.80, PP. 1 – 20 (2009).
- [2] Goto T., Kimura T., Lawes G., Ramirez A. P., Tokura Y., PHYSICAL REVIEW LETTERS V.92, PP. 1 – 4.

Сканирующая антенна на основе резонансной меандровой структуры с емкостной перестройкой

Шабанов Дмитрий Александрович

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

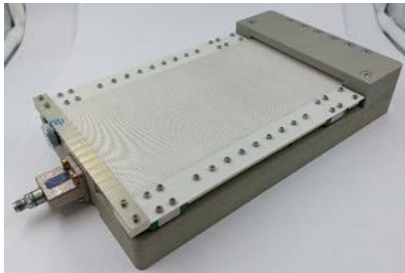
Разработана и изготовлена антенна на основе резонансной меандровой структуры с емкостной перестройкой. Антенна (Рис. 1. А) представляет собой металлическую поверхность в форме меандра с периодически модулированной амплитудой, над которой расположен перемещающийся вдоль поверхности лист диэлектрика с нанесенными на него металлическими полосковыми проводниками одинаковой ширины, период расположения которых совпадает с периодом меандра. Смещение листа диэлектрика в направлении, перпендикулярном направлению проводников, приводит к изменению угла направления излучения θ_m (Рис. 2. В), который определяется по формуле:

$$\theta_m = \arcsin\left(\frac{\beta_m}{k_0}\right), \quad (1)$$

$$\beta_m = \beta_0 + \frac{2\pi}{P} m, \quad (2)$$

где β_m – фазовая постоянная для m -ой пространственной гармоники, β_0 – фазовая постоянная для нулевой пространственной гармоники, k_0 – волновое число, P – период модуляции амплитуды меандра. Более подробно принцип работы подобных антенн описан в [1].

А



В

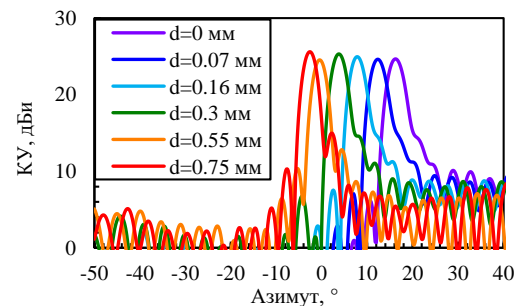


Рис. 7. А – Общий вид сканирующей антенны, В – результаты измерений диаграмм направленности макета антенны при различном смещении d листа диэлектрика

Антенна настроена на минус первую пространственную гармонику на рабочей частоте 27 ГГц. Габариты антенны $140 \times 236 \times 42$ мм³. Основные параметры антенны: период меандра 1.5 мм; период модуляции амплитуды меандра 6 мм; относительная диэлектрическая проницаемость листа диэлектрика 3.55; толщина листа диэлектрика 0.5 мм; ширина полос металлизации слоя диэлектрика 1.05 мм. Антенна имеет следующие характеристики: поляризация линейная; коэффициент направленного действия 30 дБи; коэффициент усиления 25 дБи; коэффициент отражения не более минус 14 дБ.

Литература:

[1] Лемберг, К. В., Журн. Сиб. федер. ун-та. Техника и технологии, 15(6). С. 750–758 (2022).

Низкотемпературный транспорт пленок TiN_xO_y легированных Cu , выращенных методом атомно-слоевого осаждения

Шанидзе Лев Викторович

Институт физики СО РАН

Спрос на тонкие пленки оксинитрида титана TiN_xO_y , как материала для интегральных резисторов, а также МИМ-конденсаторов с низкой утечкой в последние годы только растет. Нами ранее уже был продемонстрирован простой метод выращивания тонкой пленки TiN_xO_y , легированной Cu , с высокой однородностью, который подходит для дальнейшего изготовления устройств [1, 2].

Есть несколько особенностей сплавов TiN_xO_y , которые соответствуют свойствам состояния металлического стекла (МС). Температурная производная удельного сопротивления в сплавах TiN_xO_y с удельным сопротивлением выше 300 $\mu\Omega \cdot cm$ отрицательна, а образцы с удельным сопротивлением ниже 300 $\mu\Omega \cdot cm$ имеют положительную производную, что, по существу, соответствует правилу Муиджа [3], которому обычно следуют МС. Кроме того, показана зависимость сопротивления R от $T^{1/2}$ для нескольких пленок TiN_xO_y различного состава. Из этих данных видно, что удельное сопротивление образцов довольно близко к линейной или кусочно-линейной функции $-T^{1/2}$, что является признаком аномального поведения удельного сопротивления МС [4].

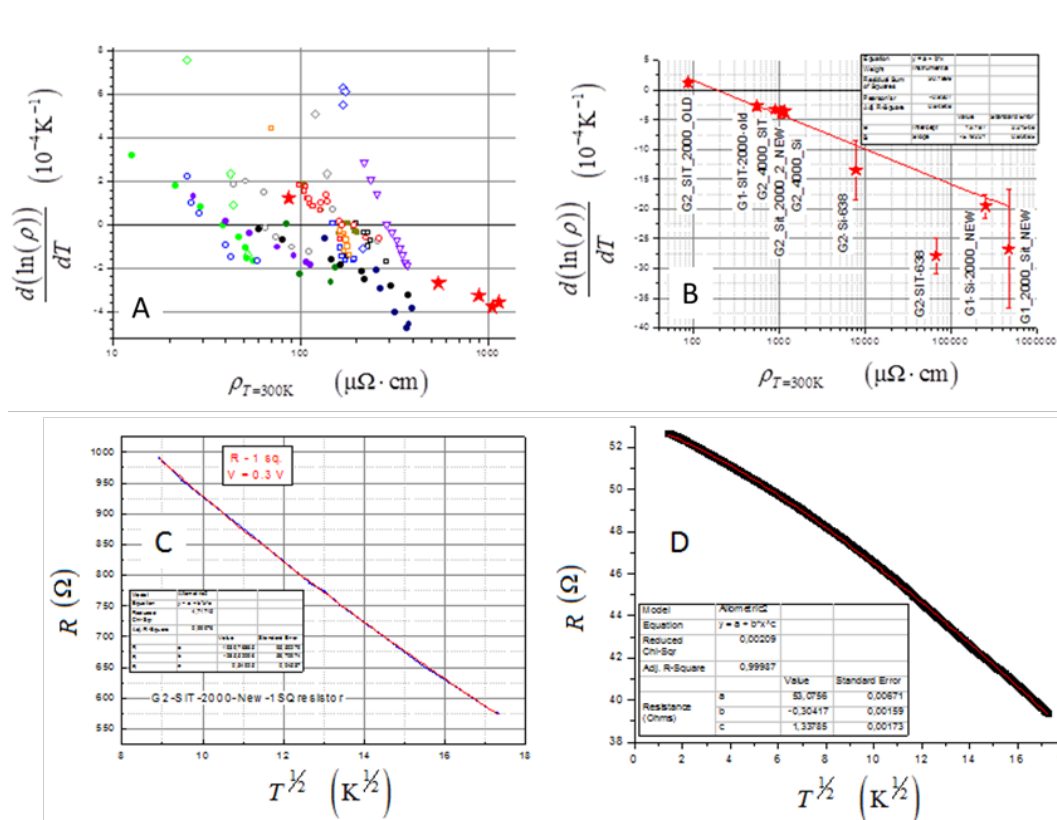


Рис. 8. – Логарифмическая T -производная в зависимости от удельного сопротивления для: (A) различных сплавов по правилу Муиджа $R(T) \sim -T^{1/2}$ и (B) пленок TiN_xO_y различной толщины, выращенных методом ALD с низким (G1) и высоким (G2) уровнем легирования медью. Температурные зависимости сопротивления от $T^{1/2}$ для: (C) G2-2000- и (D) G2-4000 циклов ALD пленок TiN_xO_y .

Литература:

- [1] Baron F.A., et al, ACS Appl. Mater. Interfaces, 13, 27, 32531 – 32541 (2021).
- [2] Shanidze L.V., et al, Appl. Sci., 11, 7498 (2021).
- [3] Mooij J. H., Phys. Status Solidi A, 17, 521 (1973).
- [4] Lee P.A., Ramakrishnan T.V., Rev. Mod. Phys., 57, 2, 287 – 337 (1985).

Монолитный полосно-пропускающий фильтр X-диапазона на полосковых резонаторах с двумя металлическими слоями

Шумилов Тимофей Юрьевич

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

Разработка новых миниатюрных конструкций фильтров, обладающих высокими частотно-селективными свойствами, и низкой стоимостью при массовом производстве является важной и актуальной задачей. Для ее решения в настоящее время активно исследуются различные конструкции на полосковых резонаторах [1]. Главными недостатками конструкций полосковых фильтров, изготавливаемых по технологии многослойных печатных плат, являются уменьшение ширины высокочастотной полосы заграждения при увеличении центральной частоты полосы пропускания, а также сильное влияние препрега, используемого для соединения металлизированных диэлектрических слоев на характеристики устройств.

В настоящей работе предложен новый подход, позволяющий в значительной степени ослабить указанные ограничения и создавать монолитные полосковые фильтры. На рисунке 1 представлены расчётные и измеренные АЧХ, а так же 3D модель фильтра пятого порядка. Размеры фильтра составляют $18,0 \times 5,4 \times 2,1$ мм, масса фильтра всего 0,5 г.

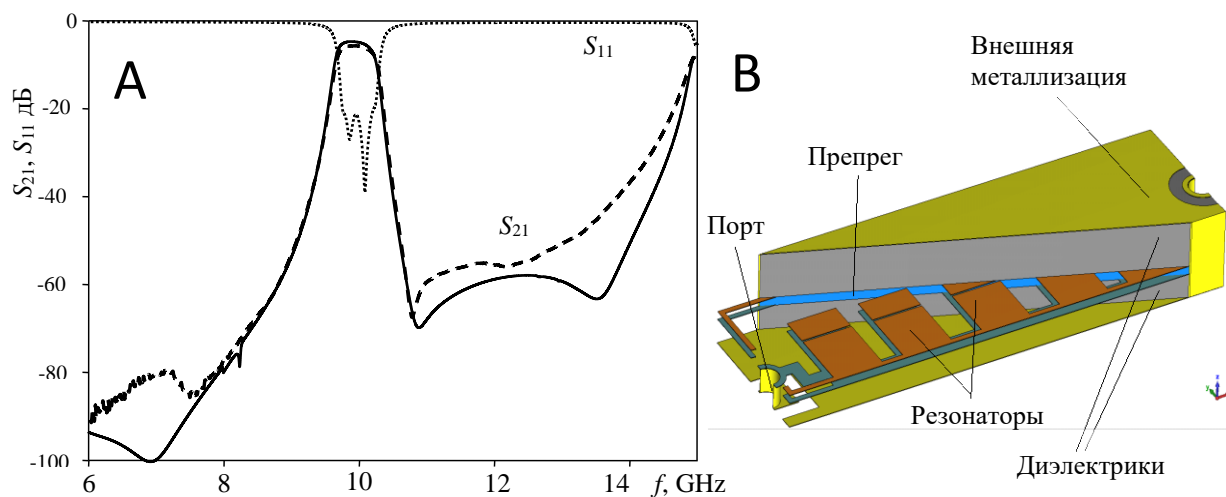


Рис. 9. А – Расчётные (сплошная линия) и измеренные (точки и штрихи) частотные зависимости прямых и обратных потерь пятирезонаторного фильтра; В – 3D модель фильтра

Измеренная центральная частота полосы пропускания составила $f_0 = 9.94$ ГГц, а относительная ширина полосы пропускания, измеренная по уровню -3 дБ, $\Delta f/f_0 = 5.8\%$. Минимальное вносимое затухание в полосе пропускания фильтра составило 4.2 дБ, уровень отражений в полосе пропускания не превышает -15 дБ. Низкая стоимость при массовом производстве, а также хорошая повторяемость характеристик, подтвержденная хорошим совпадением теоретических и измеренных АЧХ, доказывает перспективность использования разработанной конструкции в радиотехнических системах сантиметрового диапазона длин волн.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Завьялов Я. Б.

Литература:

[1] Belyaev B.A., Serzhantov A.M., Leksikov A.A., et al., IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 9, 579–581 (2015).

Секция «Химия и химические технологии»

Сульфатирование микрокристаллической целлюлозы березы сульфаминовой кислотой в присутствии катионно-обменных смол

Бережная Ярослава Дмитриевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Сульфаты целлюлозы являются важными биологически-активными веществами, обладающими широким спектром полезных свойств [1]. Современные методы получения сульфатов целлюлозы основаны на использовании либо токсичных и коррозионно-агрессивных реагентов (хлорсульфоновая кислота, олеум и др.), либо на использовании нерегенерируемых активаторов процесса (мочевина в смеси с сульфаминовой кислотой). Разработка новых методов получения сульфатов целлюлозы, основанных на использовании твердых катализаторов, является актуальной задачей.

Поскольку использование анионитов в качестве катализаторов процесса сульфатирования микрокристаллической целлюлозы березы сульфаминовой кислотой не привело к значимым результатам, в данной работе были исследованы катионно-обменные смолы. Для исследования были выбраны как сильноокислотные так и слабоокислотные катиониты. Данные по влиянию различных типов ионообменных смол на содержание серы, выход, молекулярную массу и полидисперсность образцов полученных сульфатов целлюлозы приведены в таблице 1.

Таблица 1. Влияние катализатора на выход, содержание серы и молекулярную массу сульфата целлюлозы в процессе сульфатирования сульфаминовой кислотой.

№	Образец	Содержание серы в СЦ, мас. %	Степень сульфатирования, %	Выход СЦ, %	Свойства катионитов	Mw	PD
1	-	7.6	0.50	следы	-	-	-
2	Amberlite IR 120	19.6	2.44	45,3	Сильнокислотный гелевый катионит с сульфонатными группами.	6708	2.256
3	KY-2-8	20.5	2.74	25,9	Сильнокислотный гелевый катионит с сульфогруппами	3146	1.613
4	CG-1m kationit	15.9	1.55	12,9	Слабокислотный макропористый катионит с карбоксильными группами.	8257	2.388
5	Purolit s390 plus	20.1	2.60	18,3	Слабокислотный макропористый катионит с иминодиуксусными группами	3325	1.552

Показано (таблица 1), что самым эффективным катализатором для сульфатирования микрокристаллической целлюлозы березы является катионит *Amberlite IR 120*, при использовании которого выход СЦ составил 45,3% с содержанием серы до 19,6 масс %. Полученные сульфаты целлюлозы исследованы комплексом физико-химических методов (ИК-спектроскопия, гель-проникающая хроматография, рентгено-фазовый анализ, термический анализ и элементный анализ).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда поддержки науки и технологий, грант № 2022102508951. Данное исследование выполнено в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН № 0287-2021-0017, с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования КНЦ СО РАН. Автор выражает благодарность соавторам работы: Боровковой В. С., Казаченко А. С.

Литература:

[1] Aziz, T., A. Farid, F. Haq, M. Kiran, A. Ullah, K. Zhang, C. Li, S. Ghazanfar, H. Sun, R. Ullah, A. Ali, M. Muzammal, M. Shah, N. Akhtar, S. Selim, N. Hagagy, M. Samy, S.K. Al Jaouni., *Polymers*, V.14(15), P. 3206 (2022).

Получение и характеристика пластифицированных композитных пленок арабиногалактана, модифицированных полифункциональными карбоновыми кислотами

Боровкова Валентина Сергеевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одним из перспективных направлений в мировой промышленности является замена синтетических полимерных материалов на искусственные полимеры. Арабиногалактан (АГ) в свою очередь является уникальной гемицеллюлозой, легко экстрагируемой из растительной биомассы и характеризующейся комплексом ценных свойств, важнейшими из которых являются высокая биологическая активность и водорастворимость [1, 2].

В данной работе предложен новый экологически безопасный способ модификации АГ многоосновными карбоновыми кислотами: щавелевой (ЩК), янтарной (ЯК), адипиновой (АК) и лимонной (ЛК) при разных условиях обработки реакционной смеси: термическая сушка и лиофилизация. Исследование полученных производных АГ комплексом физико-химических методов показало, что вне зависимости от вида сушки в ИК-спектрах проявляются полосы поглощения карбонильных групп (C=O) в области 1750-1690 cm^{-1} (Рис. 1А), свидетельствующих об образовании сложноэфирных связей. Однако плёнки, полученные в условиях термического высушивания ($\sim 80^\circ\text{C}$), продемонстрировали ограниченную растворимость в воде, связанную с образованием дополнительных внутри- и межмолекулярных связей. При этом температура начала основного разложения в модифицированных образцах снизилась на 70-80 $^\circ\text{C}$, за исключением АГ/ЩК, сохранившего термостойкость до 190 $^\circ\text{C}$ (Рис. 1В).

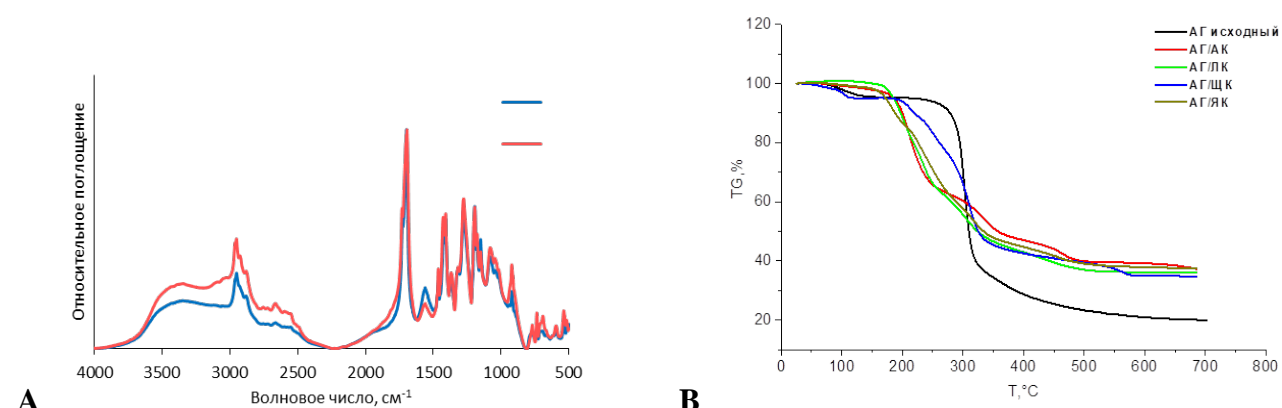


Рис. 1. А – ИК-Фурье-спектры АГ/АК: (1) термическая сушка и (2) лиофилизация; В – кривые ТГ арабиногалактана и его производных (термическая сушка).

При исследовании сорбционных свойств производных АГ было показано, что наибольшей сорбционной емкостью обладает образец АГ/ЯК (82,52 %), полученный методом лиофилизации, что в свою очередь говорит о перспективах использования полученных плёнок в качестве «зеленого» экологически чистого материала для носителей лекарственных средств, сорбентов и водоподготовки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-73-10212. Автор выражает благодарность соавторам работы: Маляру Ю.Н., Казаченко А.С.

Литература:

- [1] Chudina A.I., Malyar Y.N., Sudakova I.G. et al. Biomass Conv. Bioref. (2021).
- [2] Lucyszyn N., Ono L., Lubambo A.F. et al. Carbohydrate Polymers, V.151, PP. 889-898 (2016).

Каталитическая конверсия лигнинов в ванилин и другие ценные продукты

Вигуль Дмитрий Олегович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одним из перспективных методов для получения ванилина является каталитическое окисление лигнинов молекулярным кислородом. Мало исследованной проблемой такого способа конверсии лигнинов является влияние интенсивности массопереноса реагентов, в первую очередь O₂, на скорость и селективность этого процесса [1]. Целью настоящей работы является исследование и развитие процесса каталитического окисления лигнинов кислородом в ванилин и целлюлозу.

Показано, что мягкий кислотно-каталитический предгидролиз древесины сосны позволяет вдвое снизить расход щелочи в последующем процессе окисления полученной лигноцеллюлозы в ванилин и целлюлозу.

Установлено, что нативный лигнин древесины сосны неоднороден в процессе его окисления в ванилин и состоит из фракций – активно окисляющейся и остаточной фракции, селективность окисления которой очень мала. Определены условия конверсии, при которых суммарный выход целевого продукта достигает 28% – теоретического предела.

Показано, что в изученных условиях процесс окисления лигнинов протекает в полностью диффузионном режиме. Полученные результаты по влиянию интенсивности массопереноса на скорость окисления лигнинсодержащего сырья впервые описаны простой известной моделью, связывающей скорость процесса с плотностью мощности перемешивания в объеме жидкой фазы. Показано, что в диффузионном режиме удается получать максимальные выходы ванилина, совпадающие с максимальным выходом в кинетическом режиме.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №20-63-47109.

Литература:

- [1] Tarabanko V.E., Vigul D.O., Kaygorodov K.L., Kosivtsov Yu., Tarabanko N., Chelbina Y.V. *Bio. Conv. & Bioref.* (2022).
- [2] Tarabanko V.E., Kaygorodov K.L., Vigul D.O., Tarabanko N., Chelbina Y.V., Smirnova M.A. *J. Wood Chem. Tech.* V. 40, Iss. 6. P. 421-433 (2020).

Пинцерные бис((дифенил)фосфинокси)фенильные комплексы платины и никеля с алкинильными лигандами: синтез, строение и химические свойства

Волкова Дарья Сергеевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одной из основных задач современной химии является поиск функциональных соединений, которые могут найти применение в различных областях науки и техники. Пинцерные комплексы никеля РОСОР-типа проявляют высокую каталитическую активность в реакциях гидроборирования CO_2 , а σ -алкинильные - в процессах восстановления протонов до водорода [1, 2]. Соединения, сочетающие оба типа этих лигандов, встречаются редко и мало изучены. Поэтому целью работы является разработка систематических подходов к синтезу пинцерных бис((дифенил)фосфинокси)фенильных комплексов Pt и Ni, содержащих σ -алкинильные лиганды с различными заместителями (2,1,3-бензотиадиазол-4-ил, метил/этил ацетаты), изучение их строения и химических свойств.

Исходные комплексы $[\text{C}_6\text{H}_3\text{-1,3-(OPh}_2)_2]\text{MX}$ ($\text{M} = \text{Pt, Ni}$; $\text{X} = \text{Cl, I}$) получены по реакции циклометаллирования с последующей активацией связи $\text{C}^2\text{-H}$ [3]. Комплексы $(\text{ROSO}^{\text{Ph}})\text{Pt-C}\equiv\text{C-R}$ ($\text{R} = 4\text{-C}_6\text{H}_3\text{N}_2\text{S, C(O)OCH}_3, \text{C(O)OC}_2\text{H}_5$) и $(\text{ROSO}^{\text{Ph}})\text{Ni-C}\equiv\text{C-R}$ ($\text{R} = \text{C(O)OCH}_3, \text{C(O)OC}_2\text{H}_5$) синтезированы по реакции Cu-катализируемого сочетания пинцерных соединений с терминальными алкинами или с использованием стехеометрических реакций соответствующих пинцеров с $\text{Cu-C}\equiv\text{C-C(O)OZ}$ ($\text{Z} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5$). Реакция сочетания $(\text{ROSO}^{\text{Ph}})\text{NiX}$ ($\text{X} = \text{Cl, I}$) и 4-этинилбензо[1,2,5]тиадиазола не протекает. Комплекс никеля $(\text{ROSO}^{\text{Ph}})\text{Ni-C}\equiv\text{C-(4-C}_6\text{H}_3\text{N}_2\text{S)}$ получен по реакции $(\text{ROSO}^{\text{Ph}})\text{NiOC(O)CF}_3$ с соответствующим ацетиленом. Новые соединения изучены методом ЯМР-спектроскопии, предложено их строение, которое подтверждено методом РСА монокристаллов. Исследованы химические свойства новых комплексов на примере их реакций с другими металлофрагментами.

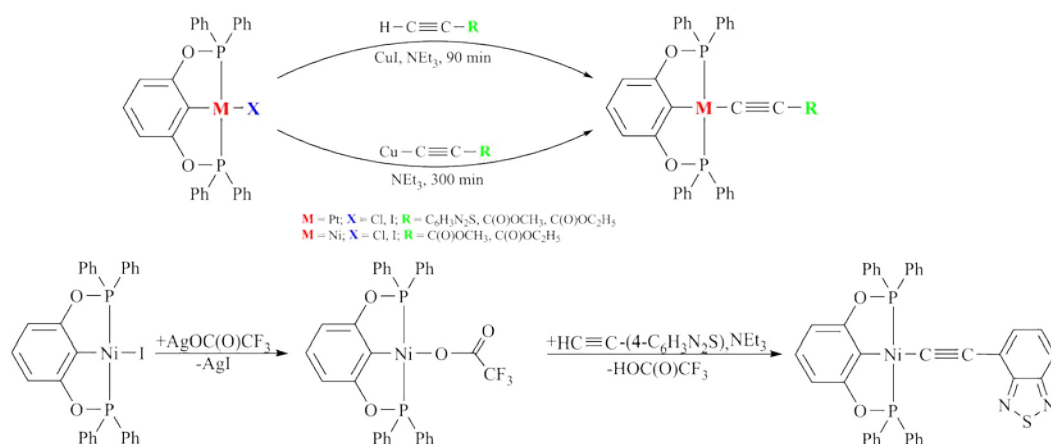


Рис. 10. Химические превращения пинцерных комплексов Pt и Ni.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект 121031500209-6). Автор выражает благодарность соавторам работы: Верпекин В. В., Чудин О. С., Бурмакина Г. В., Васильев А. Д., Иваненко Т. Ю.

Литература:

- [1] Zhang J., Chang J., Li, T., Cao B., Ding Y., Chen X., Catalysts, V. 8, P. 508 (2018).
- [2] Pandarus V., Zargarian D., Organometallics, V. 26, PP. 4321-4334 (2007).

Влияния твёрдых кислотных катализаторов на структуру целлюлозы в процессе гидролиза

Голубков Виктор Александрович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Целлюлоза – один из самых распространённых возобновляемых ресурсов, который может быть преобразован во множество востребованных продуктов, а её применение в химии не конкурирует с пищевыми потребностями. Для промышленности значительный интерес представляет замена гомогенных кислотных катализаторов гетерогенными – твёрдыми веществами с кислотными группами на поверхности из-за возможности лёгкого отделения и повторного использования [1]. Несмотря на то, что активно изучаются многие аспекты твёрдокислотного гидролиза целлюлозы, наблюдается недостаток исследований взаимодействия твёрдой целлюлозы с катализатором и массопереноса в этой системе.

В работе изучены структурные изменения целлюлозы в процессе гидролиза с твёрдыми кислотными катализаторами (Amberlyst-15, окисленный уголь Сибунит-4®) при низкой интенсивности массообмена. С помощью физико-химических методов (РФА, ИК-спектроскопией, СЭМ, определение степени полимеризации, ВЭЖХ, ГПХ) установлено, что гидролиз целлюлозы в водной среде на твёрдых катализаторах с сильными и слабыми кислотными группами проходит по разным механизмам. Например, в «изокинетических» условиях, когда конверсия целлюлозы и выход растворимых продуктов близки, влияние катализаторов на макромолекулярную структуру целлюлозы различно (Рис. 1).

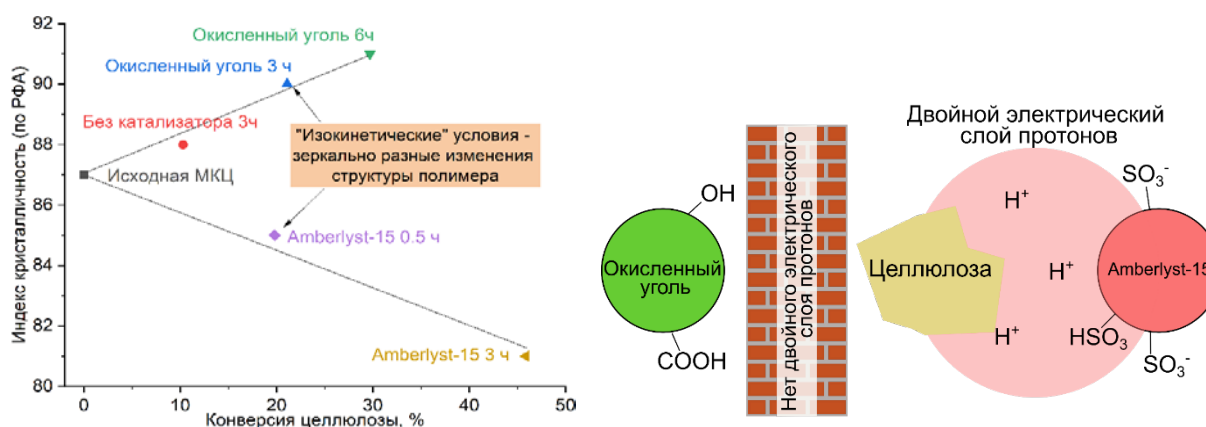


Рис. 1. Зависимость индекса кристалличности остатков целлюлозы от конверсии при гидролизе с твёрдыми кислотными катализаторами. Условия реакции: 180° С, 5 об/мин, 0,75 г целлюлозы, 0,25 г катализатора, 15 мл воды. Схема различий взаимодействия катализаторов с целлюлозой.

Известно, что важную роль в катализе может играть диффузный слой протонов вблизи поверхности твёрдых кислот [2]. Концентрация кислых протонов в зависимости от расстояния, их активность зависят от природы кислотных центров и их концентрации. Данная модель позволяет объяснить различия сильно- и слабокислотных катализаторов, Amberlyst-15 и окисленного угля.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект FWES-2021-0012). Благодарность соавторам работы: Зайцева Ю.Н., Мальяр Ю.Н., Таран О.П.

Литература

- [1] Громов Н.В., Медведева Т.Б., Таран О.П., Тимофеева М.Н., Пармон В. Н. Катализ в промышленности. Т. 20, № 36 С.234-242 (2020).
- [2] Tarabanko N., Tarabanko V. E., Kukhtetskiy S. V. and Taran O. P., ChemPhysChem, V. 20, PP. 706-718 (2019).

Самодопирование нанотрубок TiO_2 для фотоэлектрохимического получения водорода

Зосько Николай Андреевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Диоксид титана в качестве фотокатализатора был впервые использован в 1970 году и с тех пор хорошо зарекомендовал себя из-за низкой стоимости, простоты получения и превосходной химической стойкости. Нанотрубки TiO_2 , получаемые методом электрохимического анодирования титановой фольги, являются эффективной структурой для фотокаталитического разложения воды. Такая морфология поверхности фотокатализатора способствует образованию развитой границы электрод/электролит и ускоренному переносу фотогенерированных носителей заряда. Тем не менее, TiO_2 обладает низкой активностью в видимой части солнечного спектра и высокой скоростью рекомбинации электронно-дырочных пар [1].

Одним из способов преодоления этих недостатков является процесс самодопирования ионами Ti^{3+} . Это приводит к улучшению абсорбционной способности и электронной проводимости, и, как следствие, повышению фотокаталитической активности электродов на основе наноструктурированного TiO_2 . Для создания O_2 -дефицитных наноструктур применяют различные методы восстановления, включая высокотемпературное гидрирование и электрохимическое восстановление [2].

В работе представлены сравнительные результаты активности наноструктурированных анодных плёнок TiO_2 , гидрированных методом циклической вольтамперометрии (ЦВА), либо высокотемпературным восстановлением в атмосфере водорода, а также исходной TiO_2 наноструктуры.

Электрохимическое гидрирование образцов анодных плёнок TiO_2 проводили методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) в 1М растворе КОН и 0,5М растворе Na_2SO_4 . Высокотемпературное гидрирование ($450^\circ C$) проводили в атмосфере чистого водорода.

Фотоактивность электродов в реакции разложения воды оценивали путем измерения плотности фототока и количества выделившегося водорода, определяемого с помощью волюметрического метода. Установлено, что активация электродов приводит к увеличению плотности фототока в 2-7 раз при использовании УФ и в 4-6 раз при облучении видимым светом относительно исходного образца. Количество выделившегося водорода при длительном УФ облучении в 5,4-6,8 раз больше для гидрированных образцов по сравнению с исходными наноплёнками TiO_2 .

Методами электрохимической импеданс спектроскопии, время-разрешённой фотолюминесцентной спектроскопии и электронного парамагнитного резонанса установлено, что самодопирование вызывает перераспределение поверхностных и объёмных дефектов в TiO_2 .

Улучшенная электронная проводимость, эффективное разделение электронов и дырок, повышенная скорость переноса заряда на границе раздела полупроводник/электролит, а также улучшенное поглощение света для образцов, подвергнутых термической обработке водородом приводит к увеличению фотоэлектрохимической активности в реакции разложения воды.

Литература:

[1] S. Palmas, A. M. Polcaro, J. R. Ruiz, A. D. Pozzo, M. Mascia and A. Vacca, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35, 6561-6570 (2010).

[2] Y. Yang, J. Liao, Y. Li, X. Cao, N. Li, C. Wang and S. Lin, *RSC Advances*, 6, 46871-46878 (2016).

Синтез функциональных материалов на основе органических соединений, выделенных из растительного сырья

Ионин Владислав Александрович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Традиционные технологии получения функциональных материалов основаны на переработке нефтепродуктов, потребление которых увеличивается благодаря постоянно повышающемуся спросу. Это приводит к ухудшению экологической обстановки, необратимым изменениям климата и истощению ископаемых ресурсов. Альтернативой является вовлечение в производство материалов возобновляемого растительного сырья и применение принципов «зеленой химии». Перспективным органическим сырьем для получения функциональных материалов являются легкоизвлекаемые из растительной биомассы таннины, обладающие высокой реакционной способностью и все чаще используемые как замена токсичным фенолам [1].

Цель данной работы – разработка методик получения пористых функциональных органических материалов из таннинов и фурфуроливого спирта.

В данной работе таннины выделяли из коры хвойных пород деревьев по методике, подробно описанной в работе [1] и изучали их физико-химические свойства. Синтез пористых материалов проводили с использованием 67% фурфуроливого спирта, поливинилового спирта, эмульгатора Твин 80, катализатора (п-толуолсульфокислоты) и вспенивающего агента (диэтилового эфира). Полученная реакционная смесь в течение 10 минут после завершения процесса самопроизвольно затвердевает в результате экзотермической реакции между таннинами и фурфуроливым спиртом, а диэтиловый эфир выступает в качестве пенообразующего агента, испаряясь из смеси. Полученные образцы твердых пен изучали методами ТГА/ДСК, СЭМ (Рис. 1).

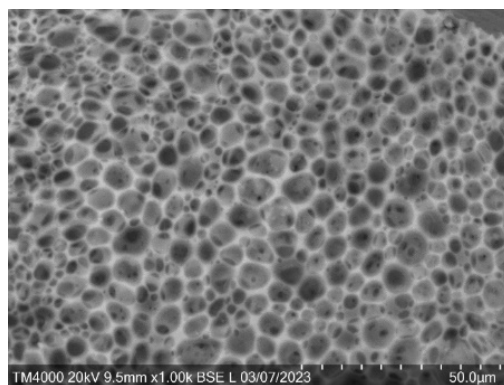


Рис. 11. Микротографии твердых пен, полученные СЭМ.

Для полученных твердых пен определили огнеустойчивость по отношению к прямому потоку пламени газовой горелки, что позволило классифицировать полученные пены как трудновоспламеняемые.

Исследование проведено в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (FWES-2021-0017). Работа выполнена с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН». Автор выражает благодарность соавторам работы: Таран О. П., Фетисовой О.Ю., Жижаеву А.М.

Литература:

[1] Ионин В.А., Казаченко А.С., Елсуфьев Е.В. Вестник Томского государственного университета. Химия, 23, 54–66 (2021).

Комплексная переработка лигнита с выделением редких элементов

Казанцев Яков Викторович

Институт цветных металлов и материаловедения СФУ

Редкие элементы, включая редкоземельные металлы (РЗМ) и германий, широко используются в различных областях науки и техники [1]. Более половины добычи, соответственно, – мощностей мирового производства РЗМ и германия сосредоточены в Китае, который в значительной мере определяет цены на редкометалльное сырье, РЗМ и германиевые продукты. Спецификой отечественных месторождений редких металлов при колоссальных запасах является значительная их удаленность от развитых инфраструктур и сложная технология обогащения руд.

В связи с этим интерес представляют новые сырьевые источники, к которым можно отнести лигниты, значительные запасы которых выявлены в среднем течении р. Енисей (район Нижнего Приангарья). По концентрации германия и РЗМ лигниты представляют собой уникальное природное сырье.

Работа направлена на определение состава лигнита, закономерностей и продуктов его комплексной переработки.

Установлено, что содержание германия и суммы РЗМ в лигнитах составляет 0,012–0,020 масс. % (120–200 г/т) и 0,0178 масс. % (178 г/т), соответственно [2].

С целью извлечения германия и РЗМ предложен способ сжигания лигнита в кипящем слое с контролируемым парциальным давлением кислорода.

Выявлены закономерности процесса сжигания лигнита в интервале температуры от 1000 до 1200 °С и парциального давления кислорода 10^{-11} – 10^{-12} атм. Показано, что максимальная степень извлечения германия 80–85 % наблюдается при температуре 1150 °С и скорости продувки воздухом от 8 до 12 м³/(мин·м²), содержание германия в золе уноса достигает 1,8 масс. %. Таким образом, зола уноса представляет собой первичный германиевый концентрат, который может быть использован для переработки на специализированных предприятиях, например, АО «Германий» (Красноярск).

Установлено, что не менее 85 % РЗМ в составе исходной пробы лигнита концентрируется в зольном остатке в количестве до 1,2 масс. %, преобладают элементы Се, La и Nd, концентрации которых составляют 0,31; 0,25 и 0,20 масс. %, соответственно.

Извлечение РЗМ из зольного остатка производили в интервале температуры от 20 до 90 °С с использованием растворов кислот HCl, HNO₃ и H₂SO₄ с концентрацией 2–6 М, с соотношением Т:Ж = 1:20, времени – 2–6 ч. Максимальная степень извлечения РЗМ составляет 90 % при использовании 4 М раствора хлороводородной кислоты HCl и времени выщелачивания 4 ч.

Выделение РЗМ из полученных растворов проведено сорбционным методом с использованием кремнезёмов, химически модифицированных аминофосфоновыми группами, которые количественно (99 %) извлекают РЗМ из растворов с pH 1–5, при pH 1–2 достигается отделение РЗМ от преобладающих количеств сопутствующих ионов металлов. РЗМ количественно (99 %) десорбируются с поверхности модифицированных кремнезёмов 1–2 М растворами неорганических кислот (HNO₃, HCl). В результате использование такого подхода получены богатые по РЗМ растворы, пригодные для переработки по стандартным схемам.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 20-43-242905, с использованием оборудования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] Maestro P., Huguenin D. *Journal of Alloys and Compounds*, 225, 520-528 (1995).
- [2] Шиманский А. Ф., Казанцев Я. В., Лосев В. Н., Буйко О. В., Моисеенко И. М., Наидко В. И. *Журн. Сиб. федер. ун-та. Химия*, 15(3), 398-408 (2022).

Электрокаталитическое окисление крахмала в водных электролитах

Капаева Светлана Николаевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Крахмал представляет собой природный полисахарид, получаемый из многочисленных растительных источников, таких как злаки, корни и клубни. Он биоразлагаем, в изобилии доступен и имеет различные возможности для модификации [1]. Химическая модификация вызывает структурные изменения и введение новых функциональных групп, что влияет на физико-химические свойства крахмалов и делает их пригодными для различных промышленных применений [2].

В данной работе исследован процесс электрокаталитического окисления крахмала на различных анодных материалах: Pb/PbO₂, ОРТА, ДБА в 2-х типах ячеек: с мембраной, разделяющей анодное и катодное пространства (2-х камерная) и без мембраны (однокамерная). Исследования проводили при различных значениях плотности тока, pH электролита, концентрации субстрата и окислителя. В качестве электролитов использовали водные растворы сульфата калия и натрия.

В 2-х камерной ячейке на анодных материалах Pb/PbO₂ и ОРТА использовали метод периодатного окисления. Определены оптимальные условия получения диальдегида крахмала на аноде из Pb/PbO₂: исходная концентрация крахмала 3,3 г/л, концентрация КIO₃- 0,93 г/л; плотность тока 25 мА/см². Получен целевой продукт с содержанием альдегидных групп 44-50%. На аноде из ОРТА при исходной концентрации крахмала 13,3 г/л; концентрации КIO₃- 0,93 г/л, плотности тока 100 мА/см² содержание альдегидных групп составляет 32%. При предварительной ультразвуковой обработке, содержание альдегидных групп- 40%.

При электрокаталитическом окислении крахмала в однокамерной ячейке на анодах из Pb/PbO₂, ДБА и ОРТА с участием активных форм кислорода получен продукт с содержанием альдегидных групп 30%. Определены оптимальные схемы генерации активных форм кислорода: для анода из Pb/PbO₂ - анодное окисление с добавлением H₂O₂ и солей Fe²⁺; для ДБА и ОРТА - анодное окисление с добавлением H₂O₂.

Полученный модифицированный крахмал находит широкое применение в таких областях, как пищевая промышленность, производство биоразлагаемых пластиков, а также в качестве платформы для дальнейших химических реакций.

Литература:

- [1] Komulainen S., Verlackt C., Pursiainen J., Lajunen M., Carbohydrate polymers, V. 93, № 1, PP. 73-80 (2013).
- [2] Sandhu K. S., Kaur M., Singh N., Lim S.-T., LWT-Food Science and Technology, V. 41, № 6. PP. 1000-1010 (2008).

Синтез и свойства сильно коррелированных гидрозолей Fe_3O_4

Карпов Денис Вадимович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Наночастицы магнетита – перспективный наноматериал для использования в биомедицине, катализе, очистке сточных вод, гидрометаллургии [1 – 2]. Коммерчески доступные образцы феррофлюидов содержат, однако, керосин или минеральные масла в качестве дисперсионной среды, а также гидрофобные ПАВ, что исключает их применение в биомедицине. Имеющиеся же в продаже коллоидные растворы наночастиц магнетита для биомедицинского применения имеют низкую концентрацию (1 – 20 г/л) при весьма высокой цене (более \$150 за 1 мл) [3].

В данной работе представлена методика получения высококонцентрированных (более 1000 г/л) гидрозолей наночастиц магнетита, а также исследованы механизмы, лежащие в основе их аномальной стабильности. Наночастицы магнетита со средним диаметром 11 нм были получены путем щелочного соосаждения солей железа (II) и (III) и стабилизированы монозамещенным цитратом натрия. Путем дальнейшего упаривания при 90 °С концентрация золя поднимали вплоть до 1400 г/л. Золи охарактеризованы различными физико-химическими методами (рисунок 1). Показано, что полученная система проявляет рекордную агломеративную и седиментационную устойчивость.

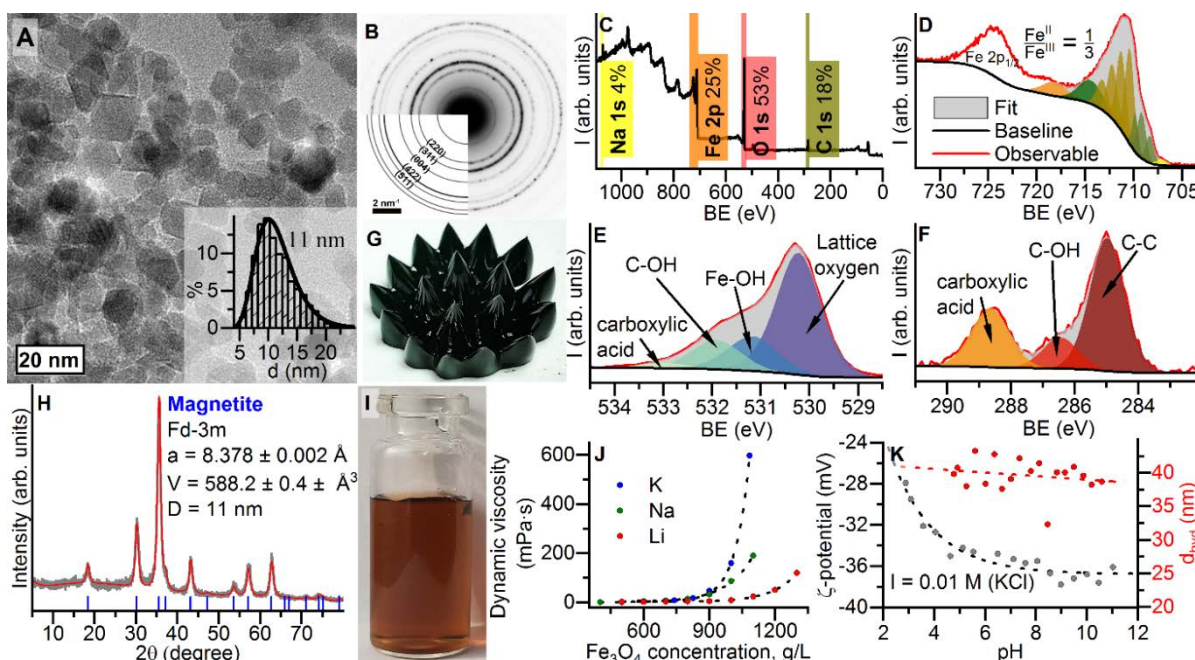


Рис. 12 – А – микрофотография образца; В – данные SAED; С – F – РФЭ-спектры (С – широкий скан, D – Fe 2p, E – O 1s, F – C 1s); G – фотография концентрированного золя в магнитном поле; H – дифрактограмма образца; I – фотография разбавленного золя; J – концентрационные зависимости вязкости для золь с различными противоионами; K – зависимости дзета-потенциала и гидродинамического диаметра от pH для золя 1 г/л

Автор выражает благодарность соавторам работы: Воробьеву С.А., Павликову А.Ю., Михлину Ю.Л., Сайковой С.В.

Литература:

- [1] Huang S., Meijia W., Molecular and Clinical Oncology, V. 7, № 5, PP. 738-746 (2017).
- [2] Wu Y., Shi Y., Chen H., Zhao J., Dong W., Process Safety and Environmental Protection, V. 116, PP. 468 – 476 (2018).
- [3] www.nanocomposix.com/collections/material-magnetite (Nanocomposix company).

Синтез карбоната иттрия с применением анионообменного осаждения и теоретическое исследование его свойств и структуры

Киришнева Елизавета Александровна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Современные тенденции развития электроники определяют высокий спрос на низкоразмерные многофункциональные материалы. Одно из наиболее перспективных направлений – создание двумерных (2D) материалов. К настоящему моменту синтезировано довольно много двумерных структур [1], однако большая их часть представлена ван-дер-Ваальсовыми материалами со слабыми связями между слоями.

Относительно недавно были получены 2D материалы с ковалентным типом связи. К ним относятся, например гематен, ильменен и др. Благодаря своим свойствам подобные материалы обладают большим потенциалом в сфере оптоэлектроники, спинтроники, фотопроводимости и др. [1].

Карбонаты редкоземельных элементов – это класс соединений, включающий как карбонатные минералы, содержащие смесь РЗЭ, так и синтетические карбонаты. Синтетический тенгерит-У может быть представлен формулой $Y_2(CO_3)_3 \cdot 2-3H_2O$. Он имеет орторомбическую кристаллическую решетку и относится к пространственной группе $Bb2_1m$ [2]. Данный материал может представлять интерес для исследований в области получения люминесцентных материалов, путем допирования структуры редкоземельными элементами. Структура карбоната иттрия представлена гофрированными слоями, соединенными между собой карбонатными группами, что позволяет предположить возможность расслоения данного материала.

Целью работы является получение карбоната иттрия путем комбинирования методов анионообменного осаждения и гидротермального синтеза. А также теоретическое исследование полученного продукта с применением программного пакета VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), в основе алгоритмов которого лежит теория функционала плотности (density functional theory - DFT).

Анионообменное осаждение осуществляли с применением анионитов двух типов: сильноосновный (АВ17-8, карбонатная форма) и слабоосновный (АН-31, карбонатная форма). Подробное описание методики анионообменного осаждения приведено в [3].

Исходя из данных, полученных в ходе эксперимента, можно сказать, что оптимальным вариантом синтеза $Y_2(CO_3)_3 \cdot 2H_2O$ является анионообменное осаждение иттрия при помощи сильноосновного анионита АВ-17-8 с последующей гидротермальной обработкой в течение 24ч. Данный метод обеспечивает получение свободной от примесей фазы карбоната иттрия.

Для объемного $Y_2(CO_3)_3 \cdot 2H_2O$ была оптимизирована структура, и рассчитаны его электронные и оптические свойства. Карбонат иттрия представляет собой слоистый не ван-дер-Ваальсовый материал с шириной запрещенной зоны 7,06 эВ, при расчете с применением функционала HSE06, и максимумом поглощения в УФ области спектра при длине волны $\lambda=155$ нм. Кроме того, были проведены расчеты энергии расслоения тенгерита-(У). Полученные результаты позволяют предположить, что 2D структура карбоната иттрия может быть получена методами «сверху-вниз».

Работа выполнена совместно с А.В. Куклиным. Научный руководитель С.В. Сайкова.

Литература

- [1] Barnowsky T., Krashenninnikov A. V., Friedrich R. *Advanced Electronic Materials*. P. 2201112 (2023).
- [2] Miyawaki R., Matsubara S. *A Bulletin of the National Science Museum Series C*. Т.30. С. 1-4 (2004).
- [3] Сайкова С. В., Киришнева Е.А., Пантелеева М.В., Пикурова Е.В., Евсевская Н.П. *Журнал неорганической химии*. Т. 64., № 10. С.1013 (2019).

Изучение электронного строения дикарбонильных комплексов родия (I) с хелатообразующими лигандами методами квантовой химии

Кормес Елизавета Сергеевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Дикарбонильные комплексы родия (I), типа $Rh(CO)_2(bident)$, содержащие различные донорные O,O- и N,O- бидентатные лиганды, являются одними из перспективных соединений для получения новых родиевых катализаторов. Несмотря на широкий интерес к данному типу комплексов, остается открытым вопрос о влиянии лигандного окружения на их каталитические свойства. Данное влияние невозможно оценить без детального изучения электронного строения комплексных соединений.

Целью данной работы является изучение природы металл-лигандного взаимодействия между дикарбонильными фрагментами комплексов родия (I) и хелатообразующими лигандами ацетилацетонат и иминокетонат методами *NBO*, *QTAIM* и *ECDA* (Рис. 1).

Изучение природы металл-лигандного взаимодействия проводилось методами квантовой химии. Все квантово-химические расчеты были выполнены с помощью пакета программ *Gaussian*. Анализ электронного строения проводился методами *NBO*, *QTAIM* и *ECDA*. Оптимизация изучаемых структур была выполнена методом функционала плотности с функционалом *TPSSh*.

Всеми методами было показано, что перенос электронной плотности осуществляется непосредственно с лиганда на фрагмент содержащий родий.

Методами *NBO* и *QTAIM* удалось установить, что взаимодействие между дикарбонилем родия (I) и лигандом (ацетилацетонатом, иминокетонатом) носит доминирующий ионный характер связывания, однако, присутствует доля ковалентного вклада. Введение атома азота в структуру лиганда усиливает взаимодействие между Rh-N, по сравнению с взаимодействием Rh-O.

В результате фрагментарного анализа было установлено, что в большей степени в образовании связи между фрагментами участвуют *p*-орбитали кислорода/азота лиганда и *p*-, *d*-орбитали родия. Возможность обратного донирования исключается. Так же методом фрагментарного анализа было установлено, что молекулярная орбиталь *HOMO-6* является ответственной за перенос электронной плотности (Рис. 1).

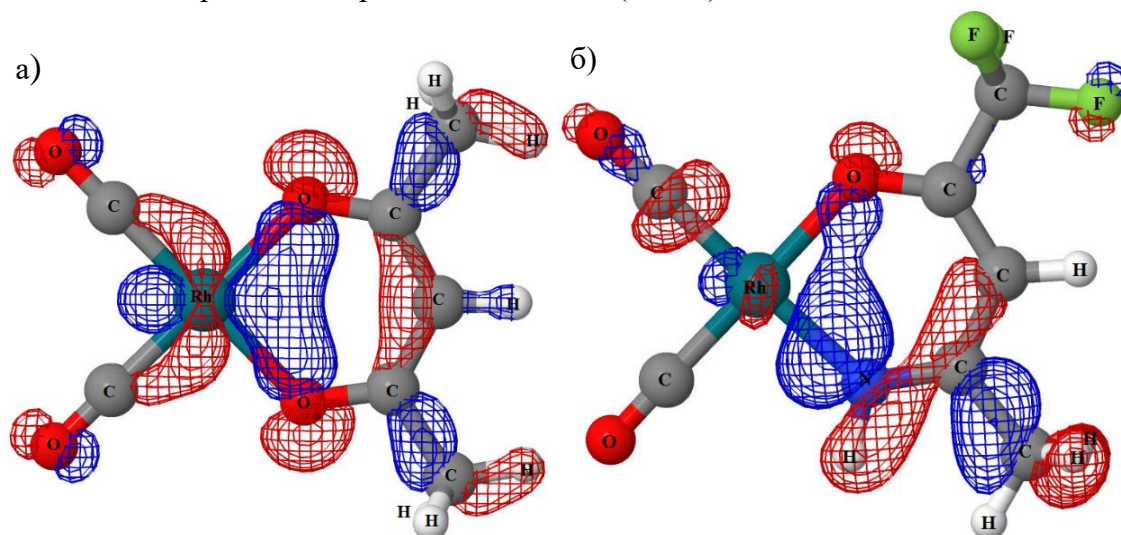


Рис. 1. Орбиталь *HOMO-6* комплексов: а) ацетилацетонат-дикарбонил родия (I) и б) 3-фтор-метил-иминокетонат-дикарбонил родия (I).

Автор выражает благодарность научному руководителю Рубайло А.И. и научному консультанту Шор А.М.

Влияние добавки нановолокон оксида алюминия на прочность эпоксидных смол

Куулар Айраана Ак-ооловна

Институт химии и химических технологий СО РАН

Эпоксидные смолы являются важной основой полимерных композитных материалов [1]. Современная промышленность предоставляет широкий спектр подобных смол от текучих до твёрдых при комнатной температуре. Важным свойством эпоксидных смол является их высокая прочность, которая, например, позволяет связать углеткань или стеклоткань в единое композитное изделие, сочетающее высокую прочность и лёгкость [2]. Обычным способом повышения механических свойств полимеров является использование различных минеральных наполнителей и особенно наноматериалов [3]. Важной анизометрической добавкой являются нановолокна оксида алюминия, которые повышают энергию когезии полимерных материалов. Это приводит к росту прочности некоторых полимеров [4] и нанокомпозитных покрытий.

Таблица 1. Механические характеристики нанокомпозитов с различным содержанием нановолокон оксида алюминия.

Образец	Предельная прочность	Модуль упругости	Е (T=40°C)	Е (T=200°C)	tg δ _{max}	T _{max loss}	T _{min dE/dT}
	МПа	МПа	МПа	МПа		°C	°C
Ероху reference	41	0,643	12998	690	0,3029	197	182
Ероху + 0,05% NFA	53	0,714	7051	222	0,4022	194	178
Ероху + 0,2% NFA	71	0,862	8418	276	0,3674	194	178
Ероху + 0,5% NFA	56	0,742	15398	502	0,397	189	173
Ероху + 1% NFA	43	0,704	15382	391	0,3969	189	173
Ероху + 2% NFA	42	0,801	9460	250	0,3773	185	171
Ероху + 4% NFA	42	0,868	15500	243	0,3843	182	166

В работе показано (табл. 1), что упрочнение полимера определяется формированием целостной однородной субструктуры нановолокон. Предельная прочность на изгиб повышается с 41 МПа, до 71 МПа при добавлении 0,2% нановолокон оксида алюминия. Модуль упругости повышается с 0,643 до 0,862 ГПа. Исходя из наличия эпоксипропиловых функциональных групп на поверхности нановолокон оксида алюминия предполагаем, что отвердитель сшивает их с молекулами смолы. На это косвенно указывает понижение температуры витрификации нанокомпозита с ростом количества добавки. Полученные данные механических испытаний и дифференциального механического анализа могут быть использованы для упрочнения эпоксидных смол в полимерных композитных материалах и заливочных композициях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на реализацию проекта «Разработка многофункциональных умных материалов» и конструкций на основе модифицированных полимерных композиционных материалов, способных функционировать в экстремальных условиях» (проект № 2020-0015).

Литература:

- [1] Nadeem, B.; Irshad, K.; Wail, F. Mater. Adv., PP.1821–1871 (2021).
- [2] Saghafi, H.; Fotouhi, M.; Minak, G. Appl. Sci., 8, P. 2406 (2018).
- [3] Bhattacharya M. Materials, 9, 262 (2016).

Каталитическая деполимеризация древесного лигнина в жидкие биотоплива

Мирошникова Ангелина Викторовна^{1,2}

¹*Институт химии и химической технологии СО РАН*

²*Сибирский федеральный университет*

Древесный лигнин является источником ценных фенольных и ароматических углеводов, однако при этом остается малоиспользуемым сырьем [1]. Его деполимеризация может быть осуществлена в атмосфере водорода в среде низших алифатических спиртов в присутствии твердых катализаторов на основе металлов платиновой группы (Pd, Ru, Pt), закрепленных на устойчивых носителях. Для получения из лигнина мономерных фенольных соединений предложен метод восстановительного каталитического фракционирования лигноцеллюлозной биомассы (ВКФ) в процессе которого, лигнин подвергается деполимеризации, а основная часть целлюлозы сохраняется.

Впервые предложено использовать недорогой катализатор NiCuMo/SiO₂ для замены Ru, Pt, Pd-содержащих катализаторов для получения бионефти в процессе ВКФ древесины пихты [2]. Подобраны оптимальные условия, обеспечивающие эффективную деполимеризацию лигнина древесины (250 °С, 3 ч, начальное давление H₂ 4 МПа) [1]. Установлены состав и строение, получаемых жидких продуктов. Катализатор NiCuMo/SiO₂ трехкратно (до 37 мас. %) увеличивает содержание алкилпроизводных метоксифенолов, преимущественно 4-пропилгваякола и 4-пропанолгваякола. Полученный результат сопоставим с результатом, полученным при ВКФ древесины ели с катализатором Ru/C, где выход мономеров составил 36 мас. %.

При гидрировании этаноллигнина пихты в присутствии катализатора NiCuMo/SiO₂ выход жидких продуктов составил 88 мас. %, что сопоставимо с выходами в присутствии бифункциональных катализаторов на основе благородных металлов Ru/C и Pt/ZrO₂ (85 мас.% и 90 мас.% соответственно).

Таким образом было показано, что путем ВКФ с использованием, не содержащего дорогих благородных металлов катализатора NiCuMo/SiO₂ можно получить высокий выход жидких продуктов из древесного лигнина. Получаемые метоксифенолы могут использоваться для получения, компонентов моторных топлив и других химических веществ. В частности, на основе преобладающих соединений (4-пропилгваякол и 4-пропанолгваякол) могут быть получены противораковые и противомикробные препараты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-13-00250. Автор выражает благодарность соавторам работы: Казаченко А.С., Скрипникову А.М., Ли Сяоминь, Кузнецову Б.Н., Таран О.П.

Литература:

- [1] Taran O.P., Miroshnikova A.V., Baryshnikov S.V., Kazachenko A.S., Skripnikov A.M., Sychev V.V., Malyar Y.N., Kuznetsov B.N. *Catalysts*, V.12, PP. 1384 (2022).
- [2] Kuznetsov B.N., Miroshnikova A.V., Kazachenko A.S., Baryshnikov S.V., Malyar Y.N., Yakovlev V.A., Skripnikov A.M., Fetisova O.Y., Xu Y., Taran O.P. *Catalysts*, 13, 413 (2023).

Синтез и физико-химическое исследование новых карбонил(β -дикетонат)изоцианидных комплексов родия (I)

Патрушева Анастасия Андреевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Изоцианидные комплексы переходных металлов находят широкое применение в химии. Они служат исходными реагентами для синтеза гетероциклических соединений [1], являются мономерами для получения перспективных функционализированных полимеров [2, 3], выступают стабилизаторами наночастиц [4]. Изоцианидные лиганды, координированные атомами переходных металлов, селективно присоединяют молекулы нуклеофилов, образуя при этом различные карбеновые лиганды, представляющие особый интерес в качестве предшественников функциональных материалов и катализаторов. Настоящая работа посвящена разработке методик синтеза и исследованию свойств новых изоцианидных комплексов карбонил(β -дикетонатов) родия (I).

Установлено, что при взаимодействии (β -diketonato)Rh(CO)₂ с адамантилизоцианидом происходит селективное замещение одного СО-лиганда с образованием новых комплексов (β -diketonato)Rh(CO)(CNAd), а при подобном взаимодействии (β -diketonato)Rh(CO)₂ 1-3 с эквивалентными количествами 3,4-дихлорфенилизотиоцианида (CN-C₆H₃Cl₂) и 1-(изоцианометилсульфонил)-4-метилбензола (TosMIC) образуются комплексы типа (β -diketonato)Rh(CO)(L) (рисунок 1).

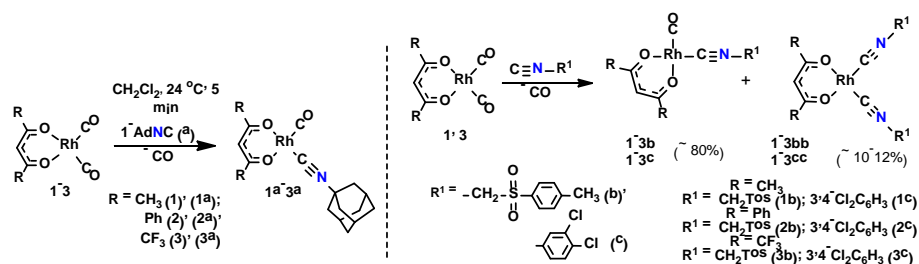


Рис. 1. Схемы реакции (β -дикетонат)Rh(CO)₂ с CNAd, CN-C₆H₃Cl₂ и CNCH₂Tos.

При добавлении нуклеофилов (диэтиламин, пиперидин, морфолин) к комплексу **1b** образуются новые ациклические диаминокарбеновые комплексы типа **1d-i** (рисунок 2). Таким образом, получены новые карбонилдикетонатные комплексы родия (I), содержащие различные изоцианидные и диаминокарбеновые лиганды при атоме родия.

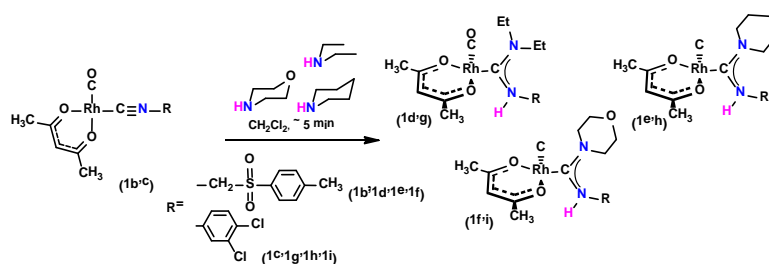


Рис. 2. Схема взаимодействия комплекса **1b** с нуклеофилами.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН № 0287-2021-0012. Благодарность соавторам работы: к.т.н., с.н.с. Кондрасенко А.А. (ИХХТ СО РАН), к.х.н., с.н.с. Верпекину В.В. (ИХХТ СО РАН); научные руководители: к.х.н., н.с. Чудин О. С. (ИХХТ СО РАН), г.н.с., д.х.н. Рубайло А. И. (СФУ).

Литература:

- [1] Lygin A.V., *Angew. Chem. Int. Ed.*, V. 49, P. 9094–9124 (2010).
- [2] Sugimoto M., *Polymer Synt.*, V. 171, P. 77–136 (2004).
- [3] Cai Zh., *Acc. Chem. Res.*, V. 53(12), P. 2879–2891 (2020).
- [4] Angelici R.J., *Inorg. Chem.*, V. 47, P. 9155–9165 (2008).

Синтез и изучение координационных свойств новых бета-дикетоннов и кетоиминнов на их основе

Пономарев Илья Сергеевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одним из наиболее перспективных классов люминофоров на данный момент является 2,1,3-бензотиадиазол(btd) и его производные из-за простого и доступного метода получения, а так же благодаря ранее обнаруженным фото- и электролюминесцентным свойствам. В частности, было показано, что производные btd характеризуются высокими квантовыми выходами, что важно для разработки органических светодиодов [1]. Кроме того, они могут быть использованы в качестве биохимических маркеров в диагностики болезней печени или раковых образований. Другим полезным свойством хелатных лигандов, содержащих координационные центры различной природы является способность селективно координировать атомы металлов различной природы [2, 3] в зависимости от условий, что может использоваться для разделения и извлечения металлов. Таким образом синтез ранее неизвестных кетоиминнов на основе btd с ацетилацетонатами, содержащих различные циклические и ациклические заместителями, является важной задачей.

Для решения поставленной задачи были синтезированы ранее известные замещенные ацетоуксусные эфиры методом конденсации ацетоуксусного эфира с соответствующими хлорангидридами бензойных кислот. В дальнейшем полученные соединения вводили в конденсацию с 4-амино-2,1,3-бензотиадиазолом по уже известной методике [1] с получением новых кетоиминнов, а именно этил(Z)-3-(бензо[c][1,2,5]тиадиазол-4-иламино)-3-(4-нитрофенил)пропаноат и этил(Z)-33-(бензо[c][1,2,5]тиадиазол-4-иламино)-3-(п-толил)пропаноат.

Начаты работы по изучению координационных свойств новых соединений. Взаимодействие этил 3-(бензо[c][1,2,5]тиадиазол-4-иламино)-3-(п-толил)пропаноат с хлоридом меди(I) привело к образованию крист. осадка, изучение ИК и ЯМР спектров этого осадка показало, что это комплекс данного енаминона с медью.

Исследование выполнено в рамках базового проекта № 0287-2021-0012. Автор выражает благодарность своему научному руководителю с.н.с., к.х.н. Верпекину В.В. и соавтору работы Иваненко Т.Ю. А также кандидату химических наук, доценту кафедры ОХТ Роот Е.В за помощь в синтезе бета-дикетонатных эфиров.

Литература:

- [1] Sukhikh T. S., Bashirov D. A. RSC Adv. № 6. P. 43901–43910 (2016).
- [2] Conte G., Bortoluzzi A.J., Gallardo H. Synthesis. № 23. P.3945-3947 (2006).
- [3] Trofimenko, S. // Journal of the American Chemical Society. V. 92. P. 5118-5126 (1970).

Восстановительное каталитическое фракционирование древесины ели в присутствии бифункционального катализатора Ru/C в среде этанола и водорода

Сычев Валентин Владимирович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Современная мировая экономика основана на использовании продуктов переработки ископаемого углеродсодержащего сырья (топливо, химикаты, синтетические полимеры и др.), что приводит к постепенному истощению запасов нефти и природного газа, а также обуславливает высокий спрос на эти ресурсы [1]. Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ), источником которой могут быть отходы деревопереработки и растениеводства, а также высокопродуктивные культуры (мискантус, просо, топинамбур и др.) является возобновляемой углерод-нейтральной альтернативой ископаемому углеводородному сырью для производства биотоплива, химикатов и других продуктов, производимых в нефтехимической промышленности [2].

Как отдельную стратегию переработки ЛЦБ, выделяют восстановительное каталитическое фракционирование (ВКФ) [3]. ВКФ ориентировано на переработку ЛЦБ и включает в себя растворение лигнина в водно-органическом растворителе, сопровождающееся одновременной его деполимеризацией и стабилизацией реакционноспособных промежуточных продуктов в восстановительной среде.

В настоящей работе предложено ВКФ древесины ели в присутствии бифункционального катализатора Ru/C на основе мезопористого графитоподобного углеродного материала (УМ) Сибунит, в среде этанола и молекулярного водорода для получения мономерных фенольных соединений из лигнина, полиолов из гемицеллюлоз и микрокристаллической целлюлозы.

Цель работы - определить влияние таких характеристик катализатора, как его кислотность, фракционный состав, содержание и дисперсность Ru на эффективность процесса ВКФ.

Повышение кислотности носителя, дисперсности рутения и уменьшение размера зерна катализатора приводит к увеличению выхода фенольных мономеров, полиолов и содержания целлюлозы в твердом остатке. Основными фенольными мономерами являются 4-пропилгваякол, 4-пропенилгваякол и 4-пропанолгваякол. Изучено влияние температуры и времени процесса на выход и состав жидких, твердых и газообразных продуктов ВКФ древесины ели. Оптимальный компромисс между выходами фенольных мономеров (30,0 мас.%) полиолов (18,6 мас.%) и твердого продукта, содержащего 84,4 мас.% целлюлозы, достигается при 225°C и 3 ч. В присутствии 3 мас.% Ru/C с наиболее выраженными кислотными свойствами и размером зерна 56–94 мкм.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20269. Автор выражает благодарность соавторам работы: Таран О.П., Мирошниковой А.В., Барышникову С.В., Казаченко А.С., Скрипникову А.М., Маляру Ю.Н., Кузнецову Б.Н.

Литература:

- [1] Ross K., Giuseppe M. International Journal of Molecular Sciences.V.11. (2010).
- [2] Chen H. Lignocellulose Biorefinery Engineering. Hongzhang Chen. Woodhead Publishing., С. 37-86 (2015).
- [3] Galkin M. V., Samec J. S. ChemSusChem. V.9. № 13. P. 1544-1558 (2016).

Ni-SiO₂ – катализатор гидрирования левулиновой кислоты до γ -валеролактона в водной среде

Троцкий Юрий Анатольевич

Институт химии и химических технологий СО РАН

γ -Валеролактон (ГВЛ) – молекула-платформа, получаемая из лигноцеллюлозной биомассы, при помощи каскада каталитических превращений. ГВЛ представляет собой бесцветную жидкость с выраженным травянистым запахом. Такие свойства ГВЛ, как низкая токсичность, высокая температура кипения (207 °С), низкая температура плавления (-37 °С), стабильность и отсутствие азеотропов с водой делают ГВЛ перспективным растворителем. ГВЛ может являться сырьем для производства жидкого биотоплива и использоваться в качестве топливной присадки. ГВЛ также применяется в фармацевтической, пищевой и парфюмерной промышленности [1].

ГВЛ получают каталитическим гидрированием левулиновой кислоты (ЛК) и ее эфиров - алкил-левулинатов (АЛ) [1]. Особый интерес представляют катализаторы на основе неблагородных металлов ввиду их низкой стоимости. Высокую эффективность при гидрировании ЛК и АЛ до ГВЛ демонстрируют катализаторы на основе Ni [2]. Цель данной работы – проведение каталитических испытаний Ni-содержащих катализаторов гидрирования ЛК до ГВЛ.

Катализатор Ni-SiO₂ синтезирован золь-гель методом, кремнезём выступает в качестве стабилизатора [3]. Катализатор исследован методами хемосорбции СО, адсорбции N₂, СЭМ, ПЭМ, РФА, РФЭС, и испытан в реакции прямого гидрирования ЛК до ГВЛ в водной среде в интервале температур 80-200°С при 4 МПа Н₂.

Максимальный выход полученный при 200 °С составил 90 мол.%, поскольку гидрирование ЛК сопровождается образованием побочных продуктов (2-метилтетрагидрофурана и 1,4-пентандиола [4]). Понижение температуры до 160 °С положительно отражается на селективности процесса по ГВЛ; количественный выход при 160 °С удалось достичь за 120 минут, при этом скорость конверсии ЛК снижается незначительно. При 120 °С также наблюдается количественный выход ГВЛ, а дальнейшее понижение температуры до 100 и 80 °С приводит к существенному снижению скорости конверсии субстрата, выход ГВЛ в течении 5 ч. составил 36 и 19 мол.%, соответственно.

Литература:

- [1] Alonso D.M., Wettstein S.G., Dumesic J.A. Green Chem. V.15. P. 584 (2013).
- [2] Kasar G.B., Date N.S., Bhosale P.N. Rode C.V. Energy & Fuels. V. 32. P. 6887 (2018).
- [3] Smirnov A.A., Khromova S.A., Ermakova D.Y. Applied Catalysis A: General. V.514. P. 244 (2016).
- [4] Kasar G.B. Date N.S. Bhosale P.N. Rode C.V. Energy & Fuels/. V. 32. P. 6887 (2018).

Оптимизация электролитической очистки высококонцентрированных гидрозолей серебра

Флерко Максим Юрьевич

Институт Химии и Химической технологии СО РАН

Наночастицы серебра могут быть использованы для производства гетерогенных катализаторов, антимикробных материалов, оптических систем, электронных и сенсорных устройств, фотонной техники, композитных материалов и структур, 2D- и 3D-печати, SERS и др. Существует множество способов получения НЧ серебра, однако наиболее распространен «мокрый» химический синтез из-за широких возможностей контроля процесса, путем использования различных химических соединений (восстановителей, стабилизаторов и др.) и условий синтеза. Простой метод синтеза концентрированных гидрозолей серебра предложил ученый Carey Lea в 1889 году [1]. Несмотря на продолжительную историю и уникальность системы практически не было изучено влияние постреакционных манипуляций на агрегативную стабильность частиц.

В данной работе было исследовано влияние объемного отношения Na_3Cit к золю на интенсивность поглощения, ширину на полувысоте и длину волны максимума ППР. Исследование оптимальной концентрации «осадителя» показало, что наиболее однородные и мелкие наночастицы образуются при очистке 0,4 М цитратом натрия (рисунок 1).

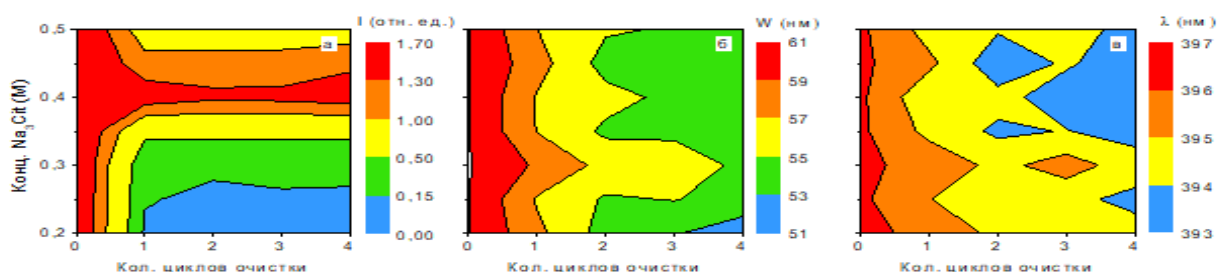


Рис. 1. А – Влияние концентрации Na_3Cit на интенсивность поглощения; Б – ширину на полувысоте; В – длину волны максимума ППР.

Было установлено, что при концентрации $\text{Na}_3\text{Cit} = 0,4$ М оптимальное объемное отношение раствора Na_3Cit к золю составляет 1:1 (рисунок 2). При этом наблюдается уменьшении склонности частиц к агрегации и укрупнению от стадии к стадии очистки с использованием цитрата натрия в качестве коагулянта.

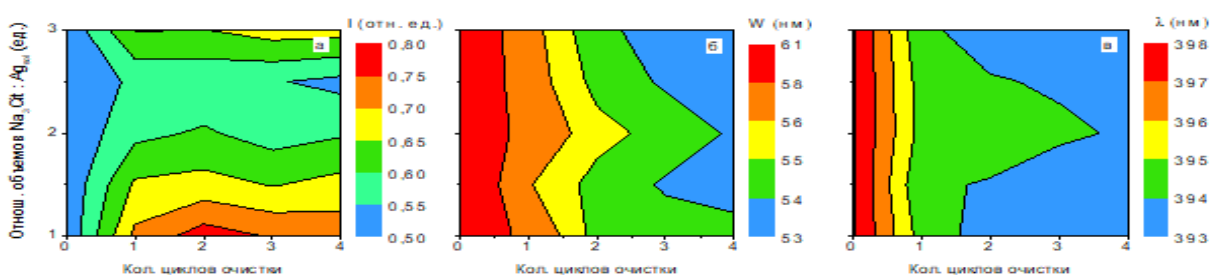


Рис. 2. А – Влияние соотношения объемов Na_3Cit /золь на интенсивность поглощения; Б – ширину на полувысоте; В – и длину волны максимума ППР.

Выражаю благодарность соавторам работы: Воробьев С. А., Николина Н. Д.

Литература

[1] Lea, M.C. Allotropic forms of silver. American Journal of Science, V.37, PP.476 - 491. (1889).

Секция «Био- и медицинские технологии»

Качества семян и развития сеянцев лиственницы сибирской контрастных экотопов Сибири

Аверьянов А.С.

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

В условиях сложной структурной организации природных ландшафтов Сибири лиственница сибирская (*Larix sibirica* Ledeb.) характеризуется высокой поливариантностью проявления наследственных свойств в конкретных зонально-климатических, эдафических и ценологических условиях. В этой связи перспективной является диагностика качества семян и развития сеянцев в природных популяциях на уровне эко- и морфотипов, как неотъемлемый этап создания продуктивных и устойчивых насаждений.

Эксперимент по изучению грунтовой всхожести семян, сохранности и хода роста сеянцев, заложенный на опытном участке ИЛ СО РАН в Академгородке г. Красноярск, проводился в течение 2016-2019 гг. для выборок семян: а) суходольной и болотной ценопопуляций южно-таежной подзоны Западной Сибири; б) степной ценопопуляции Ширинской степи и лесостепных предгорий Кузнецкого Алатау; в) ценопопуляции редколесья тундрового типа п-ова Таймыр. Исследовались грунтовая всхожесть семян (динамика в 2016 г.); текущая (2017, 2018 гг.) и итоговая (2019 г.) сохранность сеянцев. Динамика вертикального годичного прироста сеянцев за 2016-2018 гг. определялась на 3-летних сеянцах в учетный период 2018 г. Итоговая оценка результатов посевного эксперимента проведена для вариантов выборок, сохранившихся в течение всего периода наблюдений. В 2022 г. перспективные формы сеянцев, отобранные и сгруппированные по происхождению – лесоболотное и лесостепное, были высажены в лесном массиве Академгородка г. Красноярск. Производились первичная обработка посадок (полив, прополка), мониторинг их сохранности и роста.

Посевной эксперимент показал, что в посевах из семян лесотундровой ценопопуляции, а также некоторых других вариантов посевов, всхожесть семян и сохранность сеянцев оказались нулевыми или крайне низкими. Для семян болотного и суходольного экотипов характерно постепенное увеличение числа всходов и более высокая сохранность сеянцев с плавным их отпадом по сравнению с семенами лесостепного экотипа, которым свойственно ускоренное прорастание и более низкая сохранность сеянцев. Грунтовая всхожесть семян, динамика прироста сеянцев и их итоговая сохранность характеризуются значительно более высокими значениями у деревьев типичной формы, по сравнению с аномальными и редкими формами и морфотипами деревьев. После завершения посевного эксперимента, в ходе пересадки на лесной участок, саженцы лиственницы лесоболотного и лесостепного происхождения показали абсолютную приживаемость. Повреждения хвои, обнаруженные у части молодых саженцев, не оказали влияния на их приживаемость. Лучшая сохранность хвои выявлена у саженцев лесоболотного происхождения, максимальный прирост – у саженцев лесостепного происхождения.

Автор выражает признательность д.б.н. Седельниковой Т.С., д.б.н. Пименову А.В., д.с.-х.н. Данилину И.М. за курирование данной работы, д.б.н. Гродницкой И.Д. и к.б.н. Сенашовой В.А. – за научные консультации.

Определение ключевых аминокислот и нуклеотидов, отвечающих за связывание аптамера LC_50 с белковой мишенью, методами малоуглового рентгеновского рассеяния и молекулярного моделирования

Артюшенко Полина Владимировна

Лаборатория цифровых управляемых лекарств и тераностики ФИЦ КНЦ СО РАН

Аптамер LC_50 является укороченной версией аптамера LC_80, специфичного к белковому биомаркеру рака лёгких, оценка экспрессии которого позволяет охарактеризовать степень злокачественности опухоли лёгких. Вторичная структура аптамера была получена с помощью сервера mFold на основе последовательности нуклеотидов. Третичная структура аптамера была смоделирована с помощью программ SimRNA и VMD. Стыковка аптамера с мишенью проводилась в программе для молекулярного докинга HDOCK. Для всех пяти моделей комплексов были выполнены расчёты молекулярной динамики продолжительностью более 200 нс (GROMACS/amber14sb/TIP3P). Для всех структур кластерный анализ показал наличие только одного значимого кластера. Согласно результатам сравнения моделирования и МУРР, структуры комплексов M2 и M5 (Рисунок 1B) показывают лучшее совпадение с формой комплекса в растворе (Рисунок 1C). Для моделей M2 и M5 после расчётов МД был выполнен анализ водородных связей между остатками аминокислот и нуклеотидами. На рисунке 1D представлены результаты для комплекса M2, показавшего лучшее совпадение с данными МУРР. Таким образом, с помощью экспериментов МУРР в сочетании с молекулярным моделированием было подтверждено связывание укороченного аптамера LC_50 с мишенью, была установлена пространственная структура комплекса, преобладающая в растворе, определены ключевые аминокислоты и нуклеотиды, обеспечивающие связывание аптамера с мишенью. Полученная информация о сайтах связывания будет использована для дальнейшей модификации аптамера: для выбора нуклеотидов, которые могут быть заменены мутированными аналогами для защиты аптамера от разрушающего действия нуклеаз без «ущерба» для его связывающих характеристик.

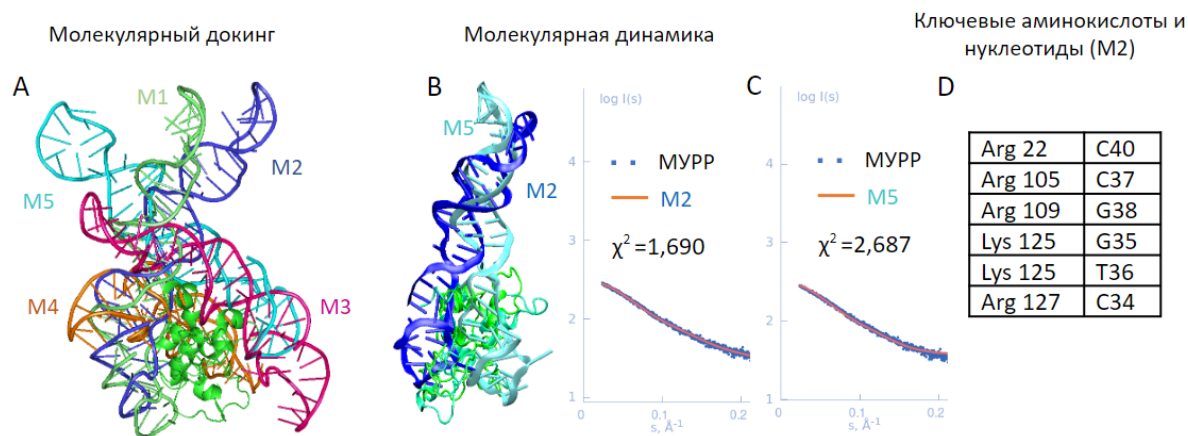


Рис. 1. А – результаты докинга аптамера LC_50 к мишени; В – модели комплексов аптамера с мишенью после расчётов МД; С – сравнение моделей комплексов с данными МУРР; D – аминокислоты и нуклеотиды, участвующие в связывании аптамера LC_50 с мишенью (для модели M2).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20240. Автор выражает благодарность соавторам работы: Щугорева И. А. Морячков Р. В., Кичкайло А. С.

Взаимосвязь густоты и эффективности фотосинтезирующего аппарата сосновых молодяков в условиях юга Арктики

Арясов Владимир Евгеньевич

Институт леса им В.Н. Сукачева СО РАН

Для оценки связей между густотой и жизненным состоянием древостоев используют множество различных методов, нами была апробирована оценка эффективности функционирования фотосинтетического аппарата, методом амплитудно-импульсной модуляции флуоресценции с использованием прибора Walz junior PAM [1].

Опытным полигоном для исследований служит территория Туруханского лесничества, близ мачты ZOTTO (60° с.ш., 89° в.д.). Объектами исследований служили сосновые молодяки естественного происхождения, сформировавшиеся на вырубке (табл.).

Табл. Основные таксационные характеристики пробных площадей

№	Размер ПП, м.	Густота, тыс. шт./га	А, лет	Состав древостоя	m хвои, т./га
ПП1	15x15	19,778	17	10С	6,33
ПП2	20x15	15,9	17	10С	4,01
ПП3	20x15	8,1	17	10С	3,14

Установлено, что при любых значениях фотосинтетически активной радиации, в исследованном диапазоне, наибольшие величины скорости переноса электронов характерны для варианта сосняка, деревья в котором развивались в условиях меньшей конкуренции и большей доступности ресурсов (ПП3) (рис.). Однако не следует считать, что эффективность работы фотосинтетического аппарата посредством флуориметрического метода будет объективно отражать процессы роста и продуктивности древостоев как целостных систем. Продуктивность древостоев будет зависеть не только от интенсивности фотосинтеза, но и от количества фотосинтетически активных фракций фитомассы величина которых больше в перегущённых ценозах.

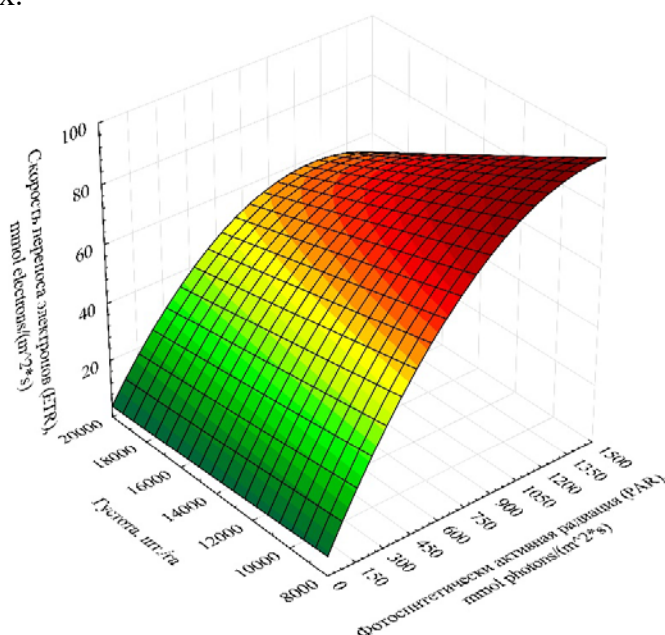


Рис. 1. Скорость электронного транспорта (ETR) в зависимости от фотосинтетически активной радиации (PAR) хвои сосны обыкновенной и структуры насаждения.

Литература:

[1] Pfündel E., JUNIOR-PAM chlorophyll fluorometer operators guide, H Walz GmbH: Effeltrich, Germany (2007).

Особенности фенотипа клеток иммунной системы у больных перитонитом

Беленюк Василий Дмитриевич

Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС

За последние годы были выдвинуты и прошли практическую проверку постулаты, утверждающие главенствующую роль системы иммунитета в поддержании внутреннего гомеостаза, контроле процессов метаболизма, защите от внутренних и внешних патогенов [1]. Было показано, что при РГП значительную роль в формировании характера течения заболевания играют процессы, развивающиеся в системе иммунитета [2]. Как следствие, важным шагом стало углубление понимания основных механизмов функционирования клеток иммунной системы на фоне таких тяжелых состояний как сепсис и перитонит (РГП) и, соответственно, разработка на их основе новых персонафицированных методов иммуноопосредованной терапии, что в перспективе позволит снизить летальность от РГП.

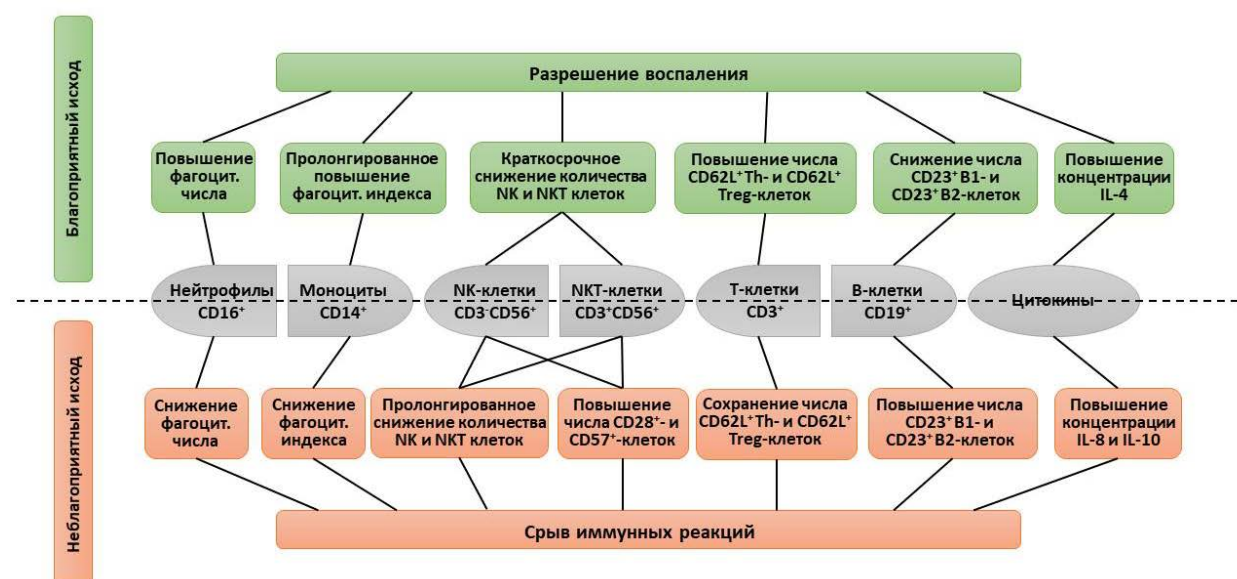


Рис. 1. Изменения иммунной системы и их влияние на исход РГП.

Обследовано 35 пациентов с РГП на базе Красноярской краевой больницы №1 и 30 относительно здоровых донора. Получены данные об изменении иммунологических показателей у больных РГП в зависимости от исхода заболевания (рис. 1). На основании полученных данных разработан способ прогнозирования исхода РГП. В основе метода прогноза лежит расчёта коэффициента Т-клеточной регуляции (КТКР), представляющего собой соотношение процентного содержания В1-лимфоцитов к процентному содержанию активированных Т-регуляторных клеток, определяющий благоприятный исход при повышении Т-регуляторной активности и снижении количества В1-клеток у больных.

Литература:

- [1] Хаитов Р.М., Габир Ф.Ю. Иммунология. Атлас / Москва: ГЭОТАР-Медиа. – 2020. – 416 с.
- [2] Савченко А.А., Борисов А.Г., Кудрявцев И.В., Беленюк В.Д., Инфекция и иммунитет, 9(3-4), 539-548 (2019).

Влияние пожаров на запас пирогенного углерода в сосняках Красноярского края

Билуха Ирина Александровна, Кукавская Елена Александровна
Институт леса им В.Н. Сукачева СО РАН

Пожары являются одним из основных факторов, определяющих динамику запаса углерода в экосистемах бореальных лесов [1]. В процессе горения органического вещества основная часть углерода высвобождается в атмосферу, значительная часть преобразуется в пирогенное органическое вещество, которое остается в экосистеме и имеет высокую устойчивость к разложению в окружающей среде [2]. Сосновые леса Средней Сибири характеризуются высокой природной пожарной опасностью и повышенной горимостью по сравнению с темнохвойными и лиственными насаждениями [3].

Данные по комплексной оценке пирогенного углерода в лесах и его вкладу в потоки и баланс углерода на территории России отсутствуют. В связи с этим целью наших исследований являлась оценка запасов пирогенного углерода, образующегося при пожарах разного вида и силы в основных лесах юга Красноярского края.

Объектами исследования являлись чистые сосновые насаждения, пройденные в 2021 и 2022 гг. пожарами разного вида и силы, а также контрольные к ним, не горевшие насаждения. Первая и вторая пробные площади представляют собой сосновые молодняки, пройденные низовым беглым пожаром средней силы и верховым сильным пожаром, соответственно. Третья и четвертая пробные площади представлены спелыми сосновыми насаждениями, которые были пройдены пожарами разной интенсивности - низовым беглым пожаром средней силы (ПП № 3) и сильным верховым пожаром (ПП № 4). Пробная площадь № 5 представляет собой низкополнотное насаждение, пройденное сильным низовым пожаром, переходящим в верховой. Напочвенные горючие материалы отбирали по методике Н.П. Курбатского (1970). Содержание углерода в образцах определяли с помощью элементарного анализатора *Vario*

В результате исследований выявлено, что на не горевших контрольных пробных площадях запасы напочвенного органического вещества варьировали от 6 до 30 т/га, основная доля запаса (до 87 %) приходится на подстилку. Пожары снижают запасы напочвенного покрова на 45 - 100 %, наибольшее снижение отмечается в молодняках и в насаждении, пройденным верховым пожаром. Запасы пирогенного углерода, образованные при горении органического вещества на поверхности почвы варьировали от $0,11 \pm 0,01$ до $2,83 \pm 1,2$ тС/га, (5-34 % от сгоревшего запаса) в зависимости от силы пожара и допожарных характеристик насаждений. С повышением интенсивности горения и увеличением возраста древостоя, запас пирогенного органического вещества возрастает.

Авторы работы выражают искреннюю благодарность д.б.н., г.н.с. Л.В. Буряк и с.н.с., к.б.н. С.В. Жила за неоценимую помощь в исследовании.

Литература:

- [1] Jonsson M., Wardle D.A., *Biology Letters*, V. 6, PP. 116-119 (2010).
- [2] Santin C., Stefan H. Doerr, Caroline M. Preston, Gil González-Rodríguez, *Glob Change Biol*, 21, 1621-1633 (2014).
- [3] Иванова Г.А., Иванов В.А., *Известия ВУЗов, Лесной журнал*, 4, 376 (2020).

Длинноцепочечные алкеноны в верхних слоях донных отложений озер Северо-Минусинской котловины (Южная Сибирь): значение для палеоклиматических реконструкций

Бульхин Александр Олегович

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

До сих пор закономерности климатических колебаний в высокоширотных регионах Азии, например, в Сибири, изучены недостаточно [1]. Хронология изменений солености, реконструированная по отложениям озер Минусинской котловины, является важным источником данных о региональных изменениях влажности климата прошлого. Одним из наиболее перспективных термо- и солечувствительных биомаркеров палеоклимата являются длинноцепочечные алкеноны (ДЦА) [2-3]. Таким образом, целью работы стал анализ зависимостей в распределении ДЦА и таксономического состава их продуцентов от солености, а также оценка потенциала региональных палеореконструкций по ДЦА.

В ходе полевых исследований в летние месяцы с 2019 по 2021 гг. были отобраны образцы верхних слоев донных отложений (1 см) из центральной части 22 озер, расположенных в Северо-Минусинской котловине. В лаборатории пробы анализировались методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС). Отбор проб воды и полевые измерения проводились вблизи точек забора кернов.

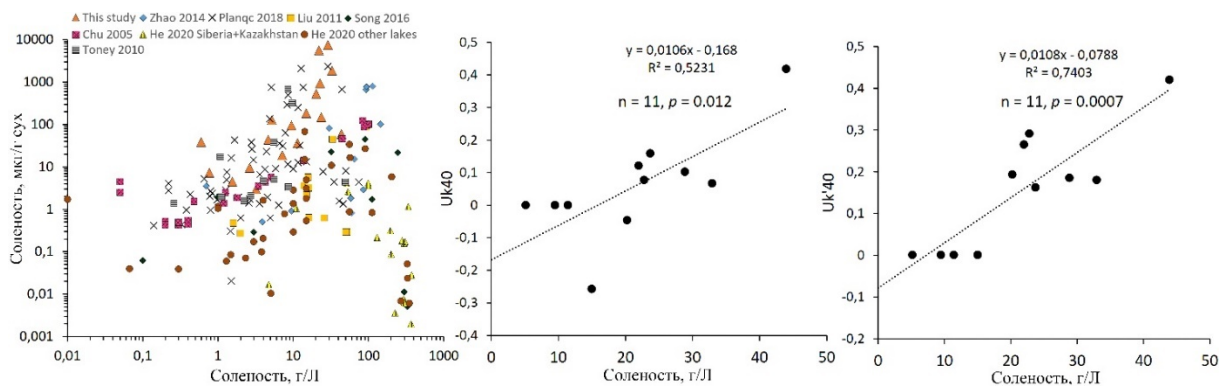


Рис. 13. Общее содержание алкенонов в поверхностных отложениях и индексы U_{40}^K , $U_{40}^{K'}$ в зависимости от солености в озерах и средних широтах.

Было установлено, что общие концентрации ДЦА резко возрастают при солености около 20 г Л^{-1} и их пики в кернах отложений могут указывать на увеличение солености (Рис. 1). Дополнительно, индексы ненасыщенности U_{40}^K и $U_{40}^{K'}$ (Рис. 1) положительно коррелируют с соленостью, таким образом, показывают потенциал в качестве косвенного показателя солености для реконструкции регионального климата.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-17-00185. Автор выражает благодарность соавторам работы: Зыкову В. В., Марченко Д. Н., Кабилову М. Р., Батуриной О. А., Бояндину А. Н., Анищенко О. В., Рогозину Д. Ю.

Литература:

- [1] Rudaya, N., Krivonogov, S., Słowinski, M., Cao, X., Zhilich, S., Quaternary Science Reviews, V.249, PP. 106616 (2020).
- [2] Longo, W.M., Theroux, S., Giblin, A.E., Zheng, Y., Dillon, J.T., Huang, Y., Geochimica et Cosmochimica, V.180, PP. 177-196 (2016).
- [3] Bulkhin, A. O., Zykov, V. V., Marchenko, D. N., Kabilov, M. R., Baturina, O. A., Boyandin, A. N., Anishchenko, O. V., Rogozin, D. Y., Organic Geochemistry, V.176, PP. 104541 (2023).

Угольные макро-частицы в верхних слоях донных отложений озёр Северо-Минусинской котловины (юг Сибири) как индикатор динамики пожаров на окружающей территории

Бурдин Леонид Алексеевич

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

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

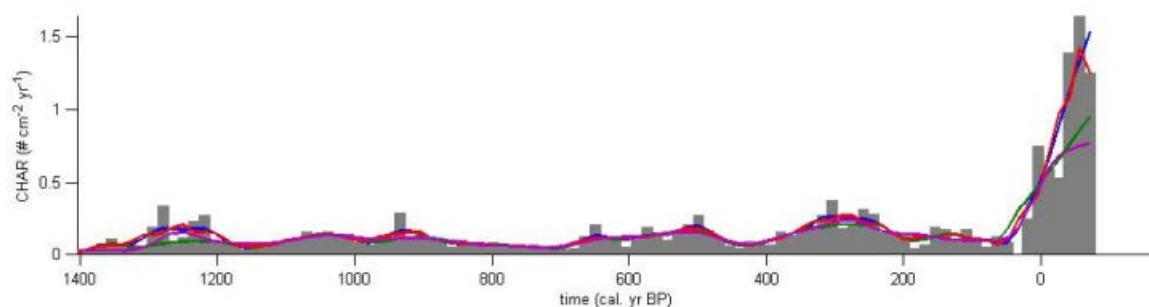


Рис. 1. Динамика потока угольных частиц размером свыше 100 мкм в донные отложения на примере оз. Ши́ра за прошедшие около 1400 лет (за начало отсчета принят 1950 год).

Частицы древесных углей размером свыше 100 мкм в донных отложениях являются индикаторами пожаров, происходивших на прилегающей к водоему территории в несколько километров. На основе микроскопического анализа датированных слоев керн донных отложений озер юга Сибири (Хакасия) нами показано, что последние около 100 лет отличаются резким увеличением потока угольных частиц в озеро (Рис. 1). Данное увеличение согласуется с результатами по многим озерам мира и предположительно обусловлено современным усилением антропогенного воздействия, как в виде случайных и умышленных поджогов, так и в виде сжигания древесины и углей для отопления жилых домов и отдыха на прилегающей к озеру территории. Также на исследуемых озерах устанавливались седиментационные ловушки и брались пробы поверхности льда с целью анализа наличия угольных макрочастиц углей и оценки сезонной динамики поступления этих частиц в донные отложения озер. Полученные данные позволят более точно интерпретировать распределения углистых частиц в кернах донных отложений и реконструировать динамику пожаров на юге Сибири в позднем голоцене.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда № 22-17-00185. Автор благодарен Рогозину Д.Ю. за научное руководство и помощь на всех этапах работы.

Литература:

- [1] Marlon, J. R. Quaternary Research, V.96, PP.66-87 (2020).
- [2] Unkelbach J., Dulamsuren C., Punsalpaamuu G. et al. Vegetation History and Archaeobotany, V.27, PP.665-677 (2018).

Получение и анализ геномных вариантов генов изоформ люциферазы *Metridia longa*

Вяткина Мария Олеговна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Сибирский федеральный университет

Ранее было идентифицировано одиннадцать кДНК генов, кодирующих четыре типа различных изоформ люциферазы *M. longa* с межгрупповую идентичность от 54% до 83% [1]. Такие существенные различия в кДНК последовательностях дают основания предполагать, что они являются продуктами неаллельных генов. Это означает, что биолюминесцентная функция копепод поддерживается по меньшей мере четырьмя парами паралогичных генов, которые развились независимо друг от друга после многократных дупликаций в геноме предкового светящегося копепода [2].

Для лучшего понимания возникновения и развития биолюминесценции копепод *M. longa* необходимо изучение геномных последовательностей, которые обеспечивают этот процесс. Интроны, подвергающиеся наибольшему эволюционным изменениям, так как не испытывают сильного давления естественного отбора для поддержания функции биолюминесцентного белка, могут помочь в точной идентификации паралогичных генов. Это позволит лучше понять генетическую основу и пути эволюции биолюминесцентной функции копепод.

Нами были выделены и проанализированы геномные и кДНК гены для трех изоформ люциферазы *M. longa* – MLuc2, MLuc7 и MLuc39. Ранее в последовательностях всех исследованных изоформ люциферазы было идентифицировано 2 тандемных неидентичных повтора, формирующих высококонсервативную область молекулы [1]. У гена MLuc2 изоформы обнаружено 4 интрона, 2 из которых находятся в одинаковых местах в середине высококонсервативных повторов что означает, что интрон консервативного повтора уже был в предковой последовательности до образования люциферазного гена путем тандемного повтора. 2 других явно разделяют функциональные части: первый расположен в начале консервативной части, третий почти разделяет повторы. У более короткой изоформы MLuc7 имеется 3 интрона, положение которых совпадает с интронами MLuc2. У большей MLuc39 идентифицировано 5 интронов, положение первого и с третьего по четвертый совпадает с геном MLuc2 изоформы. Эти данные предполагают независимую эволюцию генов изоформ после множественной дупликации гена предковой люциферазы, которая также была образована путем дупликации. Это подтверждает, что исследованные изоформы кодируются паралогичными генами.

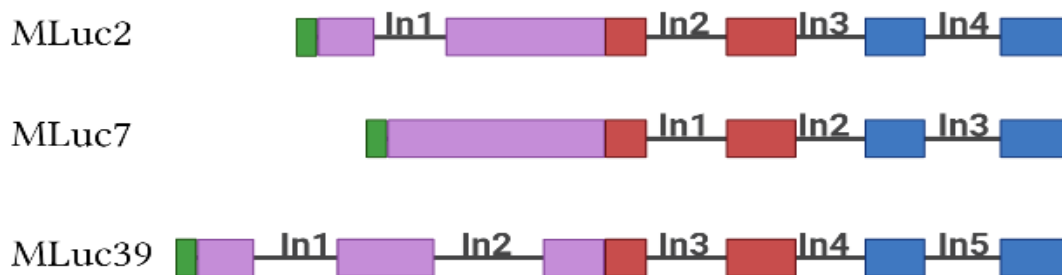


Рис. 14. Схема интронов в генах изоформ люциферазы *M. longa*: зеленый – сигнальный пептид, фиолетовый – вариабельный конец, красный – первый повтор, синий – второй повтор, In – интрон.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю, в.н.с. лаборатории фотобиологии Института биофизики СО РАН, к.б.н. Марковой Светлане Владимировне.

Литература:

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

Клинико-биохимические и иммунологические проявления инвазии Opisthorchis felineus

Горчилова Е.Г., Цуканов В.В

Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС

Цель работы. Изучить клинические, биохимические и иммунологические проявления и частоту фиброза печени у больных с инвазией *Opisthorchis felineus*.

Материалы и методы. Всего было обследовано 103 больных хроническим описторхозом (58 мужчин и 45 женщин, средний возраст 41,9 лет) и 51 практически здоровых пациентов (28 мужчин и 23 женщин, средний возраст 41,1 лет) в возрасте от 24 до 60 лет. Диагностику описторхоза проводили на основании выявления яиц или тел взрослых паразитов в дуоденальном содержимом и/или в кале пациента. Фиброз печени изучался методом сдвиговолновой транзистентной эластометрии с оценкой по шкале METAVIR.

Результаты. Больные с описторхозом имеют клиническую симптоматику, которая отчетливо связана с выраженностью фиброза печени. У значительной части пациентов с описторхозом регистрируются биохимические эквиваленты цитолитического и холестатического синдромов. То есть, описторхоз сопровождается агрессивным воспалительным процессом в печени. Мы обнаружили высокую частоту выраженного фиброза печени (фиброз печени F2 по METAVIR регистрировался у 20,4% обследованных лиц, F3 по METAVIR – у 17,5% больных с описторхозом), что верифицирует основную концепцию нашего исследования. Иммунологические исследования продемонстрировали значительное снижение функциональной активности основных фагоцитов крови: нейтрофилов и моноцитов у больных описторхозом в сравнении со здоровыми лицами, а также у пациентов с фиброзом печени F3 по METAVIR в сравнении с лицами с фиброзом печени F0-F1 по METAVIR. У больных описторхозом в сравнении со здоровыми лицами и у пациентов с выраженным фиброзом печени обнаружено значительное повышение содержания МДА, свидетельствующего о наличии интенсивного оксидативного стресса, который в свою очередь поддерживает хроническое воспаление и активизирует процессы фибро- и канцерогенеза. Очевидно, что перечисленные характеристики позволяют реализовывать новые подходы к тактике комплексного обследования пациентов.

Заключение. Учитывая высокую распространенность инвазии *Opisthorchis felineus* в ряде регионов Сибири, полученные данные позволяют считать описторхоз значимой медицинской и социальной проблемой, которая требует к себе внимательного отношения.

Нетканые наноматрицы из резорбируемых «зеленых» пластиков полигидроксиалканоатов (ПГА) для клеточных технологий

Дудаев Алексей Евгеньевич

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Электростатическое формование (электроспиннинг) является перспективным методом, который может быть использован для изготовления нано- и микроволокнистых матов и мембран. Изделия электропрядения используются в различных областях, таких как фильтрация, тканевые каркасы и доставка лекарств, нанокомпозиты и датчики. Было обнаружено, что процесс электроформования имеет большой потенциал в клеточной и тканевой инженерии [1]. Целью настоящей работы было получение электропряденных ультратонких волокон, различающихся по своим физико-химическим свойствам, с использованием резорбируемых «зеленых» пластиков полигидроксиалканоатов (ПГА) с разным химическим строением, а также исследование влияния параметров электропрядения и химического состава ПГА на морфологию ультратонких волокон и физико-механические и биологические свойства волокнистых матриц.

Образцы полигидроксиалканоатов (ПГА) различного химического состава синтезированы в культуре штамма *Cupriavidus necator* B10646 в Лаборатории биотехнологии новых биоматериалов СФУ [2]. Ультратонкие волокна получали методом электроформования 4% растворов из высокочистых образцов ПГА различного химического строения, содержащих разные фракции мономеров, на автоматической установке *Nanon 01A*. Скорость подачи раствора варьировали от 6 мл/ч, приложенное напряжение от 25 кВ, рабочее расстояние 15 см. Беспорядочно ориентированные или выровненные сверхтонкие волокна собирали на плоской стальной пластине или вращающемся барабане (при 1000 об/мин) соответственно.

Результаты сравнения физико-механических характеристик образцов из ПГА различного химического состава показали существенное различие в степени кристалличности (S_x), при этом независимо от химического состава все сополимерные наномембраны имели более высокое удлинение при разрыве, что свидетельствует об их повышенной эластичности, при этом они характеризовались резким снижением прочности по двум показателям (модуль Юнга и разрывная нагрузка). Наиболее высокие значения этих показателей характерны для неориентированных мембран из П(ЗГБ) $356,23 \pm 40,62$ и $9,32 \pm 2,54$ МПа соответственно. Ориентированные волокна, полученные из П(ЗГБ), имели средний диаметр 2,1 мкм; диаметр ориентированных волокон сополимеров, в отличие от неориентированных, имел близкие значения. В отличие от результатов значительного изменения физико-механических характеристик наномембран из различных типов ПГА, существенного влияния состава и ориентации ПГА на гидрофильность и поверхностные свойства исследованных полимерных продуктов не обнаружено.

Биологический потенциал наномембран ПГА как клеточных матриц оценивали на примере сополимера П(ЗГБ-со-4ГБ), обладающего наиболее высокими показателями эластичности. При непосредственном контакте с клетками не было выявлено признаков цитотоксичности в культурах фибробластов человека *M22* и фибробластов мыши *NIH 3T3*. Пролиферативная активность клеток не претерпевала видимых изменений в течение всего периода культивирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0287-2021-0025).

Литература:

- [1] Still TJ, von Recum HA. Electrospinning: Applications in drug delivery and tissue engineering. *Biomaterials*, 29, 1989-2006 (2008).
- [2] Волова Т.Г., Шишацкая Е.И. Штамм бактерий *Cupriavidus eutrophus* ВКМП-10646 - Продукт полигидроксиалканоатов и способ их получения, Патент РФ № 2439143 (2012).

Исследование характеристик штаммов-продуцентов молочной кислоты при использовании глюкозного сиропа в качестве источника углерода

Ермилецкая Наталья Леонидовна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Биотехнологическое получение молочной кислоты основано на сбраживании ценных сахаросодержащих субстратов, что значительно отражается на себестоимости конечного продукта. Среди субстратов выделяют чистые углеводы (глюкоза, сахароза, лактоза и др.), а также мелассу и различные гидролизаты, в том числе глюкозный сироп [1, 2]. Данный субстрат, являясь продуктом гидролиза крахмалосодержащего сырья, состоит преимущественно из глюкозы, но значительно дешевле последней. Целью данной работы было сравнение продуктивности ряда штаммов-продуцентов молочной кислоты при периодическом глубинном культивировании с использованием глюкозного сиропа в качестве углеродного субстрата.

В качестве объектов исследования использовали штаммы МКБ *L. delbrueckii* subsp. *bulgaricus* 19-11, *L. acidophilus* 5 Дс, *L. lactis* subsp. *lactis*. В-1662. Культивирование проводили на жидкой среде MRS при температуре 40 °С (для *L. delbrueckii* subsp. *bulgaricus* и *L. acidophilus*) или 32 °С (для *L. lactis* subsp. *lactis*) при перемешивании со скоростью 150 об/мин в ферментере объемом 5 л. Длительность культивирования составила 72 часов. Начальное значение pH в колбах составило 6,2-6,4. Через каждые 4 часа культивирования измеряли pH культуральной среды, содержание биомассы, глюкозы и молочной кислоты.

По результатам периодического глубинного культивирования выбранных трех штаммов-продуцентов молочной кислоты на глюкозном сиропе установлены различия их в потреблении субстрата и продуктивности (Таблица 1).

Таблица 1. Сравнительные показатели роста штаммов-продуцентов молочной кислоты

Наименование показателя	Штаммы-продуценты		
	<i>L. delbrueckii</i>	<i>L. acidophilus</i>	<i>L. lactis</i>
Потребление глюкозы, г/л	151,7	189,9	64,7
Концентрация биомассы, г/л	3,62	2,0	0,95
Выход молочной кислоты, г/л	132,0	127,3	51,6
Продуктивность, г/(л×ч)	1,94	1,87	0,76
Степень конверсии, %	87,0	67,0	79,7

Наиболее продуктивным из выбранных оказался штамм *Lactobacillus delbrueckii* subsp. *bulgaricus* 19-11 – он позволяет получать до 1,94 г/(л×ч) молочной кислоты с конечным ее выходом 132,0 г/л за 72 часа культивирования. *Lactobacillus acidophilus* 5 Дс и *Lactococcus lactis* subsp. *lactis* В-1662 продемонстрировали продуктивность 1,87 и 0,76 г/(л×ч), соответственно. Хроматографический анализ показал, что все исследованные штаммы продуцировали смеси L- и D- молочной кислоты с содержанием L-изомера от 49,4 до 73,0 %.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Сухановой А. А., Бояндину А. Н., Сырцову С. Н., Серее А. А., Прокопчук Ю. А., Бротт В. В.

Литература:

- [1] Евелева В. В., Коршунова Н. А., Баракова Н. В., Низкотемпературные и пищевые технологии в XXI веке, С. 74-78 (2019).
- [2] Wang J., Wang Q., Xu Z., Zhang W., Xiang, J., Journal of microbiology and biotechnology, Т. 25, № 1, С. 26-32 (2015).

Сопряженный анализ интенсивности горения и степени пожарного воздействия на древостои по данным дистанционного мониторинга

Забродин Андрей Николаевич

Лаборатория космических систем и технологий ФИЦ КНЦ СО РАН

Оценка интенсивности пожаров и степени воздействия пожаров на древостои является важнейшей задачей, решаемой в целях контроля и прогнозирования послепожарных восстановительных процессов. Для масштабных пожарных явлений, наблюдаемых в Сибири, использование спутниковой информации и спектральных индексов является наиболее эффективным подходом [1, 2]. Цель данного исследования – адаптация технологии тематического анализа дистанционных данных в целях мониторинга интенсивности пожаров и классификации пожарного воздействия.

Уровень пожарного воздействия оценивалась с использованием спектрального индекса NBR/dNBR и стандартных процедур пороговой классификации [1]. Дополнительно анализировались данные о радиационной мощности теплоизлучения пожаров (Fire Radiative Power), что косвенно характеризует интенсивность горения [3].

В работе использовались спутниковые снимки Landsat-8 и Sentinel-2, а также данные о FRP активных зон горения. Обработана выборка 70 снимков для послепожарных участков за 2013–2021 гг. (35 пожаров в 7 древостоях на 19350 км²).

Статистически значимые различия спектральных признаков позволили разделить участки 4 степеней нарушенности растительности: неповрежденная растительность, низкий, средний и высокий уровень нарушенности. Для послепожарных участков в светлохвойных насаждениях эти классы составляли 10%, 34%, 29% и 27%, для темнохвойных – 28%, 35%, 14% и 23% и для пожаров в зоне редколесий и тундры – 15%, 44%, 26% и 15% соответственно.

Усредненные значения FRP при пожарах варьировали в светлохвойных насаждениях на уровне 1600–23500 МВт, 3350–7500 МВт в зоне редколесий и тундры, 1800–3860 МВт в темнохвойных.

Результаты зафиксировали прямую корреляцию между классами dNBR и интегральными значениями радиационной мощности активных зон горения, с достоверностью на уровне $R^2=0,87-0,97$ ($p<0,05$). Установлено, что степень пожарного воздействия согласуется с данными об интенсивности горения. Инструментально подтверждено, что пожары высокой интенсивности преимущественно фиксируются в светлохвойных насаждениях, где доля категорий «средняя» и «высокая степень пожарного воздействия» также наибольшая (~46% от общей площади пожаров).

Исследование выполнено в рамках тем № 0287-2021-0008 и FWES-2022-0001, при поддержке Российского научного фонда, грант № 23-14-20007. Автор выражает благодарность научному руководителю к.т.н. Пономареву Е.И. за помощь в работе.

Литература:

- [1] Ponomarev E.I., Zabrodin A.N., Ponomareva T.V., Fire, 5, 19 (2022).
- [2] Лупян, Е.А., Лозин Д.В., Балашов И.В., Барталев С.А., Стыценко Ф.В., Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса, 19(3), 217-232 (2022).
- [3] Wooster M.J., Roberts G., Perry G.L.W., Kaufman Y.J., J. of Geophysical Research, 1(110), D24311 (2005).

Сравнение структурных переходов карбоксиангидразы Б под действием разных дестабилизирующих факторов методом время-разрешенной флуоресценции

Карузина Наталья Евгеньевна

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Собственная флуоресценция белка – параметр, чувствительный к нарушению его структуры. Поскольку значения времени жизни обусловлены только структурой и окружением флуорофора, а не его концентрацией, ранее было предложено на примере карбоксиангидразы Б использовать компоненты времени жизни флуоресценции белков для описания их структурных переходов в ходе разворачивания/сворачивания [1]. В данной работе исследовали структурные переходы карбоксиангидразы Б при вариации рН раствора методом время-разрешенной флуоресцентной спектроскопии, а затем проводили сравнительный анализ с параметрами, полученными при денатурации мочевиной.

Для исследования использовали лиофилизированный препарат карбоксиангидразы Б быка (BCA II), полученный в группе спектроскопии белка Института белка РАН (г. Пушкино). Объектом исследования являлись дикий тип BCA II и его мутантные формы L78A, L139A, I208A, M239A.

Оптические характеристики: спектр поглощения (спектрофотометр Cary 5000, Agilent Technologies), флуоресценция при стационарном и импульсном возбуждении с длиной волны 296 нм (спектрофлуориметр Fluorolog-3, Horiba, JobinYvon) были измерены после инкубирования образцов в течение >20 часов при комнатной температуре в цитратно-фосфатном буфере при рН 2-8. Времена жизни флуоресценции вычисляли с помощью методов деконволюции [2] и глобального анализа [3] по спадам флуоресценции, измеренным в диапазоне 305 – 417 нм. Спектры флуоресценции были откорректированы с учетом эффекта внутреннего фильтра и фона растворителя.

Получено, что триптофановая флуоресценция белков характеризуется двумя основными временами жизни: $\tau_1 = 1-2$ нс и $\tau_2 = 4,8-5,8$ нс. Наложение рассчитанных значений времени жизни флуоресценции на параметрические графики $\tau_1(\tau_2)$, полученные при равновесной денатурации BCA II в мочеине, показало, что в области нативного состояния белков (рН 6,5-8) время-разрешенные характеристики совпадают. Для корректной интерпретации и сравнения характеристик белков было проведено измерение зависимости времени жизни свободного триптофана от рН среды. Получено, что при увеличении рН от 2 до 6,5 флуоресценция триптофана характеризуется двумя компонентами с увеличивающимися значениями: τ_1 – с 1,01 до 1,38 нс и τ_2 – с 1,98 до 3,10 нс.

Таким образом, было показано, что для корректного сравнения путей разворачивания белка под действием различных факторов требуется учитывать изменение характеристик репортерных групп белка (триптофановых остатков) под действием этих факторов.

Литература:

- [1] Nemtseva E.V., Gerasimova M.A., Melnik T.N., Melnik B.S., PLoS ONE, 14(1), e0210361 (2019).
- [2] Ameloot M., Hendrickx H., Biophys. J., 44 (1), 27-34 (1983).
- [3] Knutson J.R., Beechem J.M., Brand L. Chem. Phys. Lett., 102 (6), 501-507 (1983).

Биологическая активность наночастиц оксида железа Fe_3O_4 .

Биолюминесцентный мониторинг

Кичеева Арина Геннадьевна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Наночастицы оксида железа широко используются для различных биомедицинских применений, включая магнитно-резонансную томографию, целенаправленную доставку лекарств, разделение и мечение клеток и магнитоопосредованную гипертермию [1]. Также наночастицы оксида железа могут быть применимы в индуцирование ферроптоза, одного из типов программируемой окислительной некротической гибели клетки, характерной особенностью которого является железо-зависимое перекисное окисление липидов, которое связано с выработкой активных форм кислорода (АФК). Ферроптоз известен для раковых клеток и играет важную роль в возможном лечении опухолей [2].

Многие наночастицы оксида железа характеризуются помимо магнитных свойств, также биосовместимостью, химической и коллоидной стабильностью, и возможностью функционализации поверхности, помимо этого, они являются биологически активными веществами. Эти свойства делают наночастицы оксида железа перспективными для применения их в биомедицине, но также могут создавать возможные риски для окружающей среды и живых организмов. [3]

В качестве тестовой системы для определения биологической активности и мониторинга токсичности применялись биотесты с использованием биолюминесцентных бактерий. Биолюминесцентные биотесты характеризуются простотой применения, высокой скоростью тестирования, которая позволяет одновременно анализировать большое число проб-образцов в сопоставимых условиях.

В нашем исследовании оценивается роль АФК в биоэффектах трех типов наночастиц: немодифицированные (Fe_3O_4), модифицированные гуминовыми кислотами (Fe_3O_4 -HA) и модифицированные 3-аминопропилтриэтоксисиланом (Fe_3O_4 -APTES) наночастицы оксида железа. Для мониторинга токсичности и анти-(про-)оксидантной активности наночастиц оксида железа применяли бактериальные биолюминесцентные биотесты. Содержание АФК определяли с помощью хемилюминесцентного люминольного метода, оценивали корреляции с коэффициентами токсичности/анти-(про-)оксидантной активности. Токсическое действие модифицированных наночастиц оксида железа было обнаружено при высоких концентрациях ($>10^{-2}$ г/л); оно было связано с накоплением АФК в бактериальных суспензиях. Все три типа наночастиц стимулировали продукцию АФК бактериями в широком диапазоне концентраций (10^{-15} –1 г/л). В условиях модельного окислительного стресса и высоких концентрациях наночастиц оксида железа ($>10^{-4}$ г/л) бактериальный биотест выявил прооксидантную активность всех трех типов наночастиц при соответствующем снижении содержания АФК. Результаты объясняются с точки зрения связи токсических и прооксидантных эффектов с генерацией АФК бактериями [4].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-73-10222. Автор выражает благодарность соавторам работы: Сушко Е. С., Кудряшевой Н. С.

Литература:

- [1] Mai T., Hilt J. Z. Colloids and Surfaces A 576, PP. 9-14 (2019).
- [2] Dixon S.J., et al. Cell, Vol. 149, PP. 1060–1072 (2012).
- [3] Arias L.S., et al. Antibiotics (Basel), Vol. 9, PP. 46 (2018).
- [4] Kicheeva A.G., et al. Int. J. Mol. Sci., Vol. 24, PP. 1133 (2023).

Модификация климатического отклика древесных растений под влиянием аэротехногенного загрязнения

Кладько Юлия Вадимовна

Институт леса им. В.Н. Сукчева СО РАН

Цель работы – выявить изменение в реакции растений на климатические факторы в городе Красноярске.

Исследования проводились в г. Красноярске на 5 пробных площадках (пп), различающихся по степени и характеру техногенного загрязнения. Исследовались модельные деревья ели колючей, березы повислой, вяза приземистого, тополя бальзамического, рябины обыкновенной, черемухи Маака и яблони ягодной, произрастающие на всех пп.

Реакция растений на климатические факторы выявлялась при построении и анализе скользящих корреляционных климатических функций отклика индексов радиального прироста. Они рассчитывались в «окне» длительностью в 20 дней и шагом в 5 дней с 1 апреля по 1 сентября. Сравнивались скользящие функции отклика определенного вида на загрязненных пп с функциями отклика того же вида на «контрольных» условно-чистых пп. Отличие одного от другого интерпретировалось как «модификация климатического отклика представителей древесного вида в связи с загрязнением».

Результаты исследования. Снижение интенсивности радиального роста (по сравнению с условно-чистыми пп) выявлено у вяза приземистого, чувствительность к влиянию климатических факторов слабая. Снижение интенсивности радиального роста у березы повислой, тополя бальзамического и яблони ягодной сопровождается повышением чувствительности к климатическим факторам, а именно, к весенней температуре у березы, а у тополя и яблони – к осадкам летом. У рябины обыкновенной и черемухи Маака интенсивность радиального роста не изменилась по сравнению с условно-чистыми пп; чувствительность к климатическим факторам незначительна. Единственный вид, ель колючая, характеризуется повышенной интенсивностью роста на загрязненной пп при слабой чувствительности к климатическим факторам.

Многочисленными дендрохронологическими исследованиями ранее было показано, что радиальный прирост деревьев, растущих в экстремальных условиях, имеет пониженную интенсивность радиального роста и повышенную чувствительность к воздействию климатических факторов [1]. К экстремальным условиям роста относится и техногенное загрязнение. Наши исследования не показали выраженной тенденции к повышению (или снижению) чувствительности к климатическим факторам для исследованных видов на пп.

По результатам проведенных исследований рекомендуется применение ели колючей для озеленения сильно загрязненных от предприятий химической промышленности и теплоэнергетического комплекса участков. Целесообразно высаживать рябину обыкновенную и черемуху Маака на участки, подвергающиеся техногенному загрязнению от промышленности и автотранспорта. Тополь бальзамический успешно адаптируется вблизи промышленных предприятий цветной металлургии и предприятий химической промышленности и теплоэнергетического комплекса. Автор выражает благодарность соавторам работы: Беньковой В.Е., Беньковой А.В., Скрипальщиковой Л.Н.

Литература:

[1] Schweingruber, F. N., Tree Rings and Environment, Dendroecology, Brimensdorf, Bern, Stuttgart: Viena Haupt Publ., P. 609 (1996).

Радиопротекторные свойства гуминовых веществ и фуллеренола C_{60,70}

Колесник Ольга Владиславовна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Низкоинтенсивные радиоактивные загрязнения являются современной актуальной проблемой. Низкоинтенсивное излучение характеризуется концентрацией радионуклидов альфа- и бета-типа или/и мощностью дозы гамма-лучей, оказывающих «низкодозовое» воздействие на организмы. Чувствительность организмов к низкодозовому радиационному воздействию пока недостаточно изучена и представляет особый интерес.

Изучение влияния детоксицирующих веществ на низкодозовые ионизирующие воздействия актуально с точки зрения сохранения безопасности окружающей среды. В качестве примеров детоксицирующих соединений можно рассматривать гуминовые вещества (ГВ) и фуллеренолы. Детоксицирующая активность гуминовых веществ и фуллеренолов активно изучается [1,2].

Образцы бактериальной суспензии готовили из лиофилизированных препаратов бактерий по стандартной методике: для имитации морской среды для бактериальных клеток и балансировки осмотических процессов использовали 3% раствор NaCl. В качестве источника трития использовали тритиевую воду (НТО). НТО добавляли к растворам 3% NaCl и смешивали с бактериальными суспензиями до конечных удельных радиоактивностей: 0,3; 2; 50 и 500 МБк/л. В качестве источника гуминовых веществ использовали препарат Гумат-80, («Гумат», Иркутск, Россия), полученный методом безэкстракционной обработки угля. Выбранная концентрация ГВ составляла 10⁻³ г/л. Фуллеренол C_{60,70}O_y(OH)_x (x=22-24, y=2-4) был получен в Институте Физики им. Л.В. Киренского СО РАН (Красноярск, Россия). Растворы фуллеренола готовили в дистиллированной воде. Измерения интенсивности биolumинесценции и хемилуминесценции проводили с помощью планшетного люминометра Luminoskan Ascent (Thermal Fisher Corp.).

Гуминовые вещества и фуллеренолы уменьшают как ингибирующее, так и активирующее действие трития на светящиеся бактерии. Этот результат свидетельствует о важной роли детоксикантов в природных процессах в регионах с радиоактивным загрязнением. Данные вещества могут быть использованы в качестве детоксицирующих агентов (радиопротекторов) при очистке производственных стоков.

Результаты могут способствовать пониманию перспектив биolumинесцентных биотестов для мониторинга низкоинтенсивного радиоактивного облучения. Морские бактерии можно рассматривать как упрощенную модель высших организмов.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Рожко Т. В., Кудряшевой Н. С.

Литература:

- [1] Rozhko T. V., Kolesnik O. V., Badun D. A. et al., International Journal of Molecular Sciences, V. 21, PP. 6783 (2020).
- [2] Kovel E. S., Sachkova A. S. Vnukova, N. G. et al., International Journal of Molecular Sciences, V. 20, PP 2324 (2019).

Сезонная динамика ручейников *Apatania cymophila* в среднем течении реки Енисей

Коновалова Дарья Андреевна

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Енисей – одна из крупнейших рек мира и самая многоводная река России. Среднее течение Енисея располагается на участке между Красноярской ГЭС и устьем р. Ангары. Личинки *Apatania cymophila* являются одним из основных компонентов питания хариуса [1] и индикатором радиационного загрязнения Енисея [2]. Массовые скопления личинок *A. cymophila* наблюдаются на водном мхе (*Fontinalis antipyretica*), однако сезонная динамика численности, жизненный цикл и другие аспекты их жизнедеятельности в р. Енисей не изучены.

Цель данной работы – изучить сезонную динамику ручейников *A. cymophila* на водном мхе *F. antipyretica*, определить периоды вылетов имаго и скорость роста личинок.

Для анализа использованы пробы сообщества беспозвоночных водного мха, собранные в р. Енисей в 2021-2022 гг. на расстоянии около 20 км ниже плотины Красноярской ГЭС.

Помимо *A. cymophila* в сообществе беспозвоночных водного мха единично встречались ещё 8 видов ручейников [3]. Среди ручейников по биомассе и численности личинки *A. cymophila* доминировали во всех пробах. Минимальная численность и биомасса личинок *A. cymophila* зарегистрирована в июне-июле, максимальная – в сентябре-октябре. Анализ размерных групп домиков личинок показал, что массовый вылет имаго происходит в июне-июле, однако менее масштабные вылеты происходят также в августе-октябре. Скорость роста личинок, оцененная по сдвигу пика самой многочисленной размерной группы, достигала максимума в августе, что соответствует периоду максимальной температуры воды в реке. К ноябрю скорость роста личинок снижалась до нуля.

Полученные результаты позволят оценить вклад личинок ручейников, обитающих на водном мхе, в энергетический баланс и потоки вещества в экосистеме р. Енисей.

Литература:

[1] Зуев и др., Журнал Сибирского федерального университета. Биология., 4(3), 281–292 (2011).

[2] Zotina, T. A., Trofimova, E. A., Dementyev, D.V., J. Environ. Radioactiv. PP. 208–209, 106028 (2019).

[3] Konovalova, D. A., Kislitsyna, N. I., Zotina, T. A., Zootaxa. (2023, in press).

Химерные белки на основе фотопротеинов акворина и митрокомина: конструирование, клонирование и свойства

Коновалова Ольга Вячеславовна

Сибирский федеральный университет

Рекомбинантные Ca^{2+} -регулируемые фотопротеины гидромедуз – это устойчивый комплекс апобелка с целентеразином. Связывание ионов кальция в EF-hand петлях инициирует биолюминесцентную реакцию. К настоящему времени клонирован ряд фотопротеинов, в том числе акворин из *Aequorea victoria* (AV) и митрокомин из *Mitrocoma cellularia* (MC). Идентичность аминокислотных последовательностей акворина и митрокомина составляет около 68%. При этом они имеют отличия в удельной биолюминесцентной активности, стабильности и чувствительности к ионам кальция. Фотопротеины часто используют как маркерные молекулы, в том числе, как индикаторы кальция. На примере химерного белка «фотина» с заменой участка II EF-hand обелина на таковой клитина показана возможность получения фотопротеинов с новыми свойствами [1]. К таким белкам, как акворин и митрокомин, подобный подход еще не применялся.

Целью работы являлось создание генно-инженерных конструкций на основе акворина и митрокомина, получение высокоочищенных белков и их характеристика.

Были получены два варианта генно-инженерных конструкций для экспрессии химерных белков на основе вектора pET22b, содержащих гены акворина с заменой I EF-hand на таковой митрокомина (AVI-MCII-IV) и наоборот (MCI-AVII-IV). На базе штамма *E. coli* созданы продуценты для индуцируемой экспрессии генов, подобраны условия получения и фолдинга апобелков. Охарактеризован высокоочищенный фотопротеиновый комплекс AVI-MCII-IV, проведена сравнительная характеристика его свойств с акворинном и митрокомином дикого типа. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Свойства химерного фотопротеина.

Фотопроtein	Условия фолдинга	Выход активного белка, %	Относительная удельная активность	K_d , с ⁻¹	Биолюминесценция, λ_{max} , нм	Флуоресценция, λ_{max} , нм	Термостабильность при 37 °С 1 ч, % от исх. акт-ти ⁺
AVI-MCII-IV	pH 8,0; 1 М NaCl, 10 мМ ДТТ; 24 ч	100	1,99	0,92	470	470	98
MCwt	pH 7,0; 5 мМ ЭДТА; 0,2 М NaCl, 10 мМ ДТТ; 24 ч	20	1,00	1,10	473	470	79
AVwt	pH 7,0; 5 мМ ЭДТА; 10 мМ ДТТ; 24 ч	100	0,82	0,81	470	465	10

Таким образом, химерный фотопроtein AVI-MCII-IV демонстрирует большую активность и термостабильность, чем MC и AV, а также более эффективный фолдинг, чем у митрокомина. Константа спада биолюминесцентной реакции химерного белка косвенно отражает чувствительность к кальцию и показывает среднее значение между акворинном и митрокомином.

Литература:

[1] Bovolenta S., Foti M., Lohmer S., Corazza S., J Biomol Screen, 12,694-704 (2007).

Динамические аттракторы нейронной активности у простых нейронных сетей

Маркова Галия Муратовна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Рефлексия в широком смысле – внутреннее отображение (представление) внешнего мира [1]. Для ряда задач, например, рефлексивных игр, наличие у игрока рефлексии является условием эффективного решения задачи.

В ходе рефлексивной игры, с точки зрения игрока партнер проявляет себя как последовательность символов, организованная определенным образом и потенциально неограниченная (ω -язык). Формой внутреннего представления партнера, обеспечивающей адекватную реакцию, является динамический аттрактор в фазовом пространстве нейронной активности [2]. В работе проверена способность искусственных нейронных сетей (ИНС) формировать динамические аттракторы на примере рефлексивных игр «чет-нечет», «камень-ножницы-бумага».

Использовались 15-нейронные рекуррентные ИНС, обученные игре в партиях с другими сетями в течение 1000 ходов, по алгоритму обратного распространения ошибки (глубина 5 ходов). Далее весовые коэффициенты ИНС фиксировались, записывалась динамика нейронной активности в режиме: 1) инициация (200 ходов игры против другой обученной сети/фиксированной временной последовательности ходов или одиночный входной стимул), 2) свободное поведение (1000 ходов при отсутствии входных стимулов). Для обеих игр выявлено наличие странных динамических аттракторов при свободном поведении ИНС (см. Рис.1), что свидетельствует о рефлексивном потенциале даже таких простых систем.

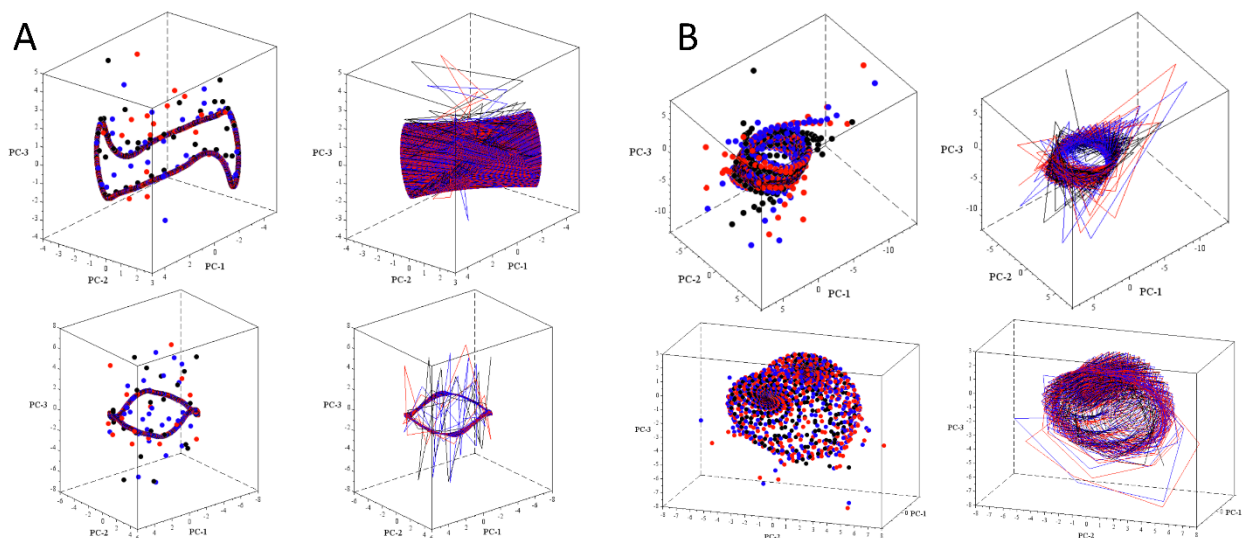


Рис. 1. Примеры динамических аттракторов нейронной активности в пространстве главных компонент, при отсутствии внешнего воздействия на ИНС: (А) в игре «чет-нечет», (В) в игре «камень-ножницы-бумага». Синий цвет – инициация с помощью другой ИНС, красный – с помощью фиксированной последовательности ходов, черный – с помощью одиночного стимула.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-21-10041, Красноярского краевого фонда науки. Благодарности: соавтору и научному руководителю д.ф.-м.н. Барцеву С.И., разработчику программы для визуализации нейронной активности Батуриной П.М.

Литература:

- [1] Лефевр В.А. Рефлексия. М.: Когито-центр, 2003.
- [2] Cabessa J., Villa A.E.P., PLoS ONE, V.9(4), PP. e94204 (2014).

Диеты, которые не позволяют бензойным лососевым рыбам *Thymallus baicalensis* реализовать свой потенциал по накоплению большого содержания омега-3 ПНЖК в мышечной ткани

Машонская Юлия Олеговна

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

В Сибири, в больших реках, таких как Енисей, и многих мелких затененных лесом реках и ручьях многочисленным видом является байкальский хариус *Thymallus baicalensis* (Dybowski, 1874), относящийся к лососеобразным рыбам [3-5]. Лососеобразные – ценные промысловые рыбы с высоким содержанием физиологически важных омега-3 длинноцепочечных полиненасыщенных жирных кислот (ДЦ-ПНЖК), а именно эйкозапентаеновой (ЭПК; 20:5n-3) и докозагексаеновой (ДГК; 22:6n-3) [1-2]. Содержание ЭПК и ДГК в рыбах зависит от большого числа факторов, ключевыми из которых являются спектр питания и таксономическая принадлежность.

Нами был изучен состав и содержание жирных кислот байкальского хариуса, обитающего в шести реках, различающихся по кормовой базе рыб. В четырех затененных реках (Тамасул, Крутая Кача, Гладкая Кача и Базаиха) большую долю рациона рыб составляли наземные беспозвоночные, не содержащие ЭПК и ДГК. В незатененной реке (Мана) рацион хариуса был основан на водных насекомых, богатых ЭПК, но бедных ДГК. В большой незатененной реке (Енисей) основу рациона рыб составляли ракообразные (гаммариды), богатые ЭПК и ДГК, чья пищевая цепь базировалась преимущественно на диатомовых водорослях. Разные спектры питания оказывали сильное влияние на содержание ЭПК и ДГК в мышечной и жировой тканях рыб, и минимальное влияние на содержание этих ПНЖК в головном мозге. Пищевая ценность рыб в отношении омега-3 ДЦ-ПНЖК из затененных рек и Маны была в два раза ниже, чем пищевая ценность рыб из Енисея.

Автор выражает благодарность соавторам работы: д.б.н. Махутовой О. Н., к.б.н. Зуеву И. В., Андрущенко П. Ю., Султонову Ш. А.

Литература:

- [1] Gladyshev M. I., Makhrov A. A., Sushchik N. N., Makhutova O. N., Rudchenko A. E., Balashov D. A., Vinogradov E. V., Artamonova V. S., *Aquaculture*, 556, 738265 (2022).
- [2] Gladyshev M. I., Sushchik N. N., Tolomeev A. P., Dgebuadze Y. Y., *Rev. Fish Biol. Fish*, 28, PP. 277–299 (2018).
- [3] Weiss S. J., Gonçalves D. V., Secci-Petretto G., Englmaier G. K., Gomes-Dos-Santos A., Denys G. P. J.; Persat H., Antonov A., Hahn C., Taylor E. B., Froufe, E., *Org. Divers. Evol*, V. 21, PP. 25–42 (2020).
- [4] Zuev I. V., Andrushchenko P. Yu., Zotina T. A., *Environ. Biol. Fish*. 104, PP 1293–1302 (2021).
- [5] Андрианова А. А., Дербинева Е. В., Гадинов А. Н., Криволицкий А. Н., Мельников И. И., *Биология*, Т 45, С 142-163 (2019).

Новые для Енисея виды водных лютиков (*Ranunculus* sect. *Batrachium*, *Ranunculaceae*)

Минаков Илья Дмитриевич

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Сибирский Федеральный Университет

Информация о видовом составе макрофитов необходима для оценки динамики видового разнообразия, экологического состояния и продукционных характеристик фитоценозов. Объектом нашего исследования стали водные лютики (*Ranunculus*) из секции шелковников (*Batrachium*) – широко распространённая в р. Енисей группа макрофитов, представители которой образуют заросли с большой биомассой или включаются в иные сообщества. Это группа водных растений является таксономически сложной за счёт частой гибридизации и высокой фенотипической изменчивости [1]. При обработке полевых проб, собранных летом-осенью 2022 года, и анализе гербария были отмечены образцы морфологически не похожие на известные для Енисея виды. В частности, обратили на себя внимание следующие ключевые особенности обнаруженных растений: (1) грушевидные нектарники, обволоснённый стебель, длина листа до 2,5 см, гомофиллия; (2) грушевидные нектарники, лысый стебель, длина листа более 2,5 см, гетерофиллия.

Проанализировав морфологию наших образцов и литературные данные, мы пришли к выводу, что неизвестные гомофилльные растения, нектарники которых мы могли наблюдать, принадлежат ранее не упоминаемому для Енисея азиато-североамериканскому виду *R. subrigidus* W.B. Drew. Многие образцы, в связи с особенностями экологии шелковников, не имели цветков, и мы не могли с уверенностью отнести их к этому виду, поскольку сходными чертами может обладать иной, распространённый в Сибири, и очень полиморфный вид – *R. trichophyllus* Chaix. В тоже время гетерофилльные растения невозможно отнести ни к одному ранее известному виду шелковников. Мы считаем, что речь идёт либо об обнаружении нового вида (возможно гибридного происхождения), либо ранее неизвестного гибрида или уникальной формы известного вида. Имеющиеся у нас данные по морфологии, экологии, фертильности пыльцы и ареалам потенциальных родительских таксонах этих растений допускают справедливость всех вариантов. Поскольку анализ морфологических признаков не позволил однозначно идентифицировать таксоны, был проведён филогенетический анализ водных лютиков по нуклеотидным последовательностям ITS региона, генов *matK* и *gbcL*, межгенных спейсеров *trnL-trnF* и *psbA-trnH* [2]. В результате анализа было подтверждено соответствие всех коротколистных и обволоснённых растений к виду *R. subrigidus*. Растение с гетерофилльными листьями в кладу к *R. subrigidus* не вошло, показав генетические связи с другими видами, в том числе известными для бассейна Енисея. Таким образом, впервые было обнаружено широкое распространение *R. subrigidus*, в р. Енисей, популяции которого встречаются как минимум от Красноярской ГЭС до устья р. Подкаменная Тунгуска. Также зарегистрировано две популяции растений, с ранее не описанными в мировой литературе признаками.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Путилину И. Р. и Зотиной Т. А.

Литература:

[1] Wiegand G., Bobrov A.A., Zalewska-Gałosz J. A., *Phytotaxa*, 319(1), 1–55 (2017).

[2] Telford A. et. al. *Aquat. Bot. Elsevier B.V.*, 95(1), 65–70 (2011).

Исследование технологической эффективности баковой смеси гербицидов в посеве яровой пшеницы

Михайлец Михаил Аркадьевич

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства, ФИЦ КНЦ СО РАН (г. Красноярск)

Потери урожая зерновых культур от сорной растительности составляют в среднем 40 - 45%, а при сильной степени засорения до 70 %. Кроме того, сорняки значительно ухудшают условия культурным растениям, постоянно конкурируя с культурными растениями за свет, воду и питательные вещества [1,2].

Постоянно встречаются и наиболее распространены следующие виды: овсюг обыкновенный, осоты полевой и розовый, просо волосовидное (сорнополевое), аистник цикutowый, марь белая, подмаренник цепкий, пикульник обыкновенный, просо куриное, хвощ полевой и другие [3].

Таким образом, разработка схемы защиты яровой пшеницы от сорных растений позволит снизить негативное воздействие сорного компонента на растения в течение вегетационного периода и способствует повышению урожайности и улучшению качества полученной продукции.

Исследования проводились в 2020-2021 гг в ОП «Минино» Красноярского НИИСХ по следующей схеме: 1. Контроль (без обработки гербицидами); 2. Овсюген Экспресс, КЭ – 0,6 л/га + Лорнет, ВР – 0,6 л/га;

Фенологические наблюдения за ростом и развитием растений на опытных участках проводили на визуальной основе в двух повторениях. Началом фазы считался момент, когда в нее вступало 10 % растений, окончанием – 75 % растений.

Для оценки технической эффективности гербицидов было зафиксировано по 5 точек на каждом варианте с максимальным количеством сорняков. Учёт сорняков проводили два раза – первый перед обработкой гербицидами, второй через 21 день после обработки [4].

Засоренность посевов яровой пшеницы на фиксированных площадках составляла от 3,6 до 31,6 шт/м², в том числе осотов 3,6 шт/м². Преобладающими видами сорных растений являются просо сорное (*Panicum miliaceum ruderae*), овсюг (*Avena fatua*). Исследуемая баковая смесь гербицидов Овсюген Экспресс, КЭ и Лорнет, ВР успешно боролась со всеми сорными растениями, представленными в посеве. Эффект защиты по овсюгу, осоту желтому составил 100,0 %. По остальным сорнякам эффективность работы гербицидов несколько ниже, но эффект от применения этих препаратов остается на достаточно высоком уровне. Общий эффект от применения гербицидов, в составе баковой смеси, достиг уровня 97,4 %.

Литература:

- [1] Артохин К.С. Сорные растения: справочное и учебно-методическое пособие. - М.: Печатный город, 2010. 172 с.
- [2] Власенко Н.Г., Власенко А.Н., Садохина Т.П. Сорные растения и борьба с ними при возделывании зерновых культур в Сибири. – Новосибирск, 2007. 126 с.
- [3] Терехова В.Ф., Паркаль В.С. Технология применения пестицидов. – Красноярск.: КрасГАУ, 2012. 94 с.
- [4] Методические рекомендации по изучению гербицидов в растениеводстве. – М.: ВНИИЗР, 1981. 46 с.

Разработка латерального проточного апта-сенсора для экспресс-анализа кардиомакера тропонина I

Морозова Елизавета Павловна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

В случае неотложного или экстренного состояния пациента важная роль принадлежит лабораторным экспресс исследованиям. В настоящее время все более широко используется системы быстрой диагностики на месте (Point-of-Care диагностика). В отличие от тестирований в центральной лаборатории, РОС-тесты могут использоваться вне зависимости от наличия специального помещения, оборудования или специально обученного персонала для выполнения быстрого теста, необходимого в конкретный данный момент [1]. Наиболее распространенным вариантом РОС теста является метод латерального проточного иммуноанализа (иммуно-хроматографический анализ), который осуществляется при помощи тест полосок, содержащих все необходимые для анализа компоненты в готовом виде. Во время проведения анализа мишень связывается со специфическими антителами, нанесенными на тест-полоску, а также на поверхность частиц коллоидного золота. В результате их взаимодействия образуется комплекс, который обнаруживается в виде цветной линии. В то время как антитела часто обеспечивают исключительную специфичность и низкие пределы обнаружения, их высокая стоимость производства и сложность, связанная с их созданием, стимулируют значительные усилия по поиску подходящих высокоспецифичных молекул – аналогов антител.

Аптамеры – одноцепочечные ДНК или РНК олигонуклеотиды с уникальной пространственной структурой, способные специфично «узнавать» молекулу-мишень и присоединяться к ней. Благодаря их высокой аффинности, специфичности, стабильности и возможности химического синтеза и модификации различными функциональными группами, аптамеры рассматривают как перспективную альтернативу антителам в том числе и при создании биосенсоров диагностически важных маркеров.

Целью данной работы было разработать латеральный проточный анализ на основе ДНК аптамеров, пригодный для быстрого выявления кардиомакера тропонина I. Сердечный тропонин I (сTnI) является одним из ранних высокоспецифичных маркеров, появление которого в периферической крови свидетельствует о повреждении кардиомиоцитов при инфаркте миокарда.

В качестве биоспецифичных компонентов разрабатываемого латерального сенсора использовали два специфичных и высокоаффинных к сTnI ДНК аптамера, полученные ранее в лаборатории экологических и биолюминесцентных технологий ИБФ СО РАН [2]. Для визуальной детекции результатов анализа использовали наночастицы золота (ЗНЧ). В представленной работе были получены ЗНЧ разного размера, исследованы различные способы иммобилизации аптамеров на поверхность ЗНЧ, а также на несущую нитроцеллюлозную мембрану, оптимизирован дизайн и условия латерального анализа, позволяющие выявлять сTnI в модельном образце. Показано, что при иммобилизации аптамера Apt2.4 на ЗНЧ с диаметром 30 нм в результате комплементарного взаимодействия SH-олиготимидилата на ЗНЧ и олигоденилата в составе аптамера, разработанный вариант латерального анализа позволяет выявлять сTnI в модельной сыворотке в концентрациях от 30 нМ.

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

Литература:

- [1] Дементьева И. И. и др., Клиническая лабораторная диагностика, 7, 5-10 (2013).
- [2] Krasitskaya V.V. et al., Photochem Photobiol., 21, 1041-1046 (2020).

Сдвиг максимума спектра биолюминесценции фотопротеинов заменой консервативного изолейцина на гистидин

Нур Шейла Акбар

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Молекула Ca^{2+} -регулируемого фотопротеина представляет собой стабильный фермент-субстратный комплекс, состоящий из односубъединичного полипептида и «преактивированного» кислородом субстрата, 2-гидропероксицелентеразина, прочно, но нековалентно связанного с белком. Люминесценция инициируется ионами Ca^{2+} и возникает вследствие окислительного декарбоксилирования связанного с белком субстрата. Переход образовавшегося целентерамида из возбужденного состояния в основное сопровождается излучением кванта света [1].

Целью этой работы является получение и исследование биолюминесцентных свойств двух фотопротеинов, обелина (OL) и акворина (AV), с заменой консервативного изолейцина на гистидин. Предполагалось, что замена Ile138 в акворине и Ile144 в обелине на гидрофильный гистидин должна привести к смещению максимума биолюминесценции этих белков в красную область спектра, так как спектр хемилюминесценции целентеразина в полярных растворителях смещен в длинноволновую область. В случае успеха такие измененные фотопротеины можно будет применять в качестве репортеров в аналитических системах *in vitro* и *in vivo*. Необходимые замены были произведены в клонированных генах диких типов фотопротеинов методом сайт-направленного мутагенеза. Экспрессию фотопротеинов дикого типа и полученных мутантов проводили в рекомбинантных клетках *E. coli*.

Показано, что удельная биолюминесцентная активность OL I144H составила 0,42% от OL и 0,51% AV I138H от AV. Кинетика активации апофотопротеинов целентеразином показала, что эффект одинаковых замен в акворине и обелине может быть противоположным, несмотря на большую аминокислотную и структурную гомологию этих белков. Спектры биолюминесценции выделенных фотопротеинов показали, что максимум биолюминесценции AV I138H сместился на 11 нм в длинноволновую область и составил 473 нм, а OL I144H – на 26 нм и составил 503 нм (Рис. 1).

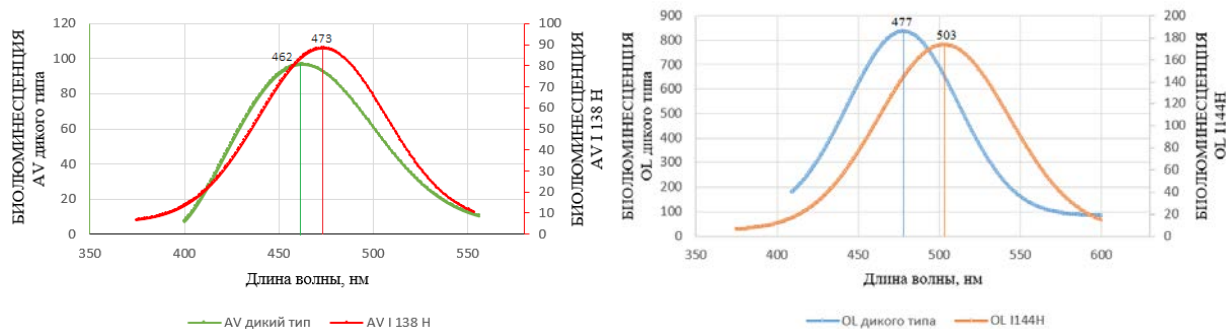


Рис. 1 – Спектры биолюминесценции диких и мутантных фотопротеинов.

Таким образом, аминокислотная замена изолейцина на гистидин приводит к сдвигу максимума биолюминесценции в красную область спектра.

Литература:

[1] Высоцкий Е. С., Маркова С. В., Франк Л. А., Молекулярная биология, 40(3), 404-317 (2006).

**Анализ жирнокислотного состава керамических сосудов стоянки
бронзового века Нижнего Приангарья**
Округина Анастасия Константиновна
Сибирский федеральный университет

На сегодняшний день анализ липидного состава в археологии довольно актуален. При помощи естественнонаучных методов стало возможным изучение остаточного липидного следа на керамике и определение палеодиет. Для памятников, на которых слабо выражен остеологический контекст или проблемным вопросом является функционал сосудов, метод газовой хроматографии позволяет идентифицировать остатки отдельных жирных кислот.

Все образцы были взяты из одного керамического сосуда, найденного в полу жилища № 1 поселения Ельчимо-1 в ходе археологических работ 2022 года. Памятник приурочен к поверхности надпойменной террасовидной площадки р. Ангары в Богучанском районе Красноярского края. В образцах состав жирных кислот (табл. 1) включал их диапазон с длиной углеродной цепи от 14 до 20, с преобладанием насыщенных неразветвленных соединений, за исключением одной ненасыщенной кислоты (C18:1). *Таблица 1. Состав жирных кислот, присутствующих в образцах*

Жирная кислота	Образец №1, %	Образец №2, %	Образец №2 (поверхностный слой), %	Образец №3, %	Образец №3 (поверхностный слой), %
Миристиновая(C14:0)	8,3	3,1	2,5	1,4	10,5
Пентадекановая(C15:0)	9,9	1	0	0,9	9,5
Пальмитиновая(C16:0)	43,6	32,3	30,3	26,1	39,1
Маргариновая(C17:0)	0	2,7	0	3,7	0
Стеариновая(C18:0)	38,2	48,3	67,2	62,2	40,8
Олеиновая(C18:1)	0	11,1	0	4,9	0
Эйкозановая(C20:0)	0	1,4	0	0,8	0

Результаты анализа указывают на преимущественно животное происхождение липидов из данных образцов, в частности, можно отметить маркер жвачных животных, представленный парой пентадекановой (C15:0) и маргариновой (C17:0) кислотами [1]. Помимо него вероятно присутствие липидов водного происхождения (олеиновая, C18:1) [2], косвенным подтверждением чего является множество находок остатков ихтиофауны на поселениях населения Нижнего Приангарья периода бронзового века [3]. Успешное применение метода газовой хроматографии позволило установить, что сосуд, найденный в полу жилища № 1 поселения Ельчимо-1 использовался человеком для приготовления пищи. Таким образом, нами отработан метод, который будет полезен для определения палеодиеты древнего населения.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Рогозину Д.Ю., Мандрыке П.В., Сенотрусовой П.О., Бояндину А.Н., Лисину В.Э.

Литература:

- [1] T. Van de Velde et al., *Journal of Archaeological Science: Reports.*, 24, 30–38 (2019).
[2] R.P. Evershed et al., *Archaeometry*, 50(1), 101–113 (2008).
[3] Дударёк С. П., Лохов Д. Н., *Известия Иркутского государственного университета*, 7, 54–80 (2014).

Некоторые свойства стимулятора биолюминесценции базидиомицета *Neonothopanus nambi*

Посохина Екатерина Дмитриевна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Для выделения экстраклеточных оксидаз из мицелия светящегося высшего гриба *Neonothopanus nambi* предложен оригинальный способ его обработки β-глюкозидазой [1]. В экспериментах с полученными таким образом экстрактами был обнаружен интересный феномен. Добавки аликвот экстракта к светящемуся мицелию значительно увеличивали уровень его эмиссии, при этом сами экстракты не обладали регистрируемым свечением. Была высказана гипотеза о наличии в экстрактах стимулятора свечения гриба *N. nambi*.

Цель настоящей работы состояла в изучении некоторых свойств обнаруженного стимулятора биолюминесценции базидиомицета *Neonothopanus nambi*.

В исследованиях использована культура базидиального гриба *N. nambi* IBSO 2391 из Коллекции микроорганизмов (CCIBSO 836) ИБФ ФИЦ КНЦ СО РАН (Красноярск). Шарообразные пеллеты мицелия получали при культивировании гриба в погруженных условиях [2]. Выращенные пеллеты: промывали деионизированной (ДИ) водой (Milli-Q system, Millipore, США), помещали в свежий объем ДИ, содержащей β-глюкозидазу (Serva, Германия), и инкубировали в течение 24 часов при 25°C. Жидкую часть (водный экстракт) отделяли фильтрацией биомассы через бумажный фильтр. Высоко- и низкомолекулярные компоненты экстракта разделяли фильтрацией через мембрану 10 кДа (EMD Millipore Amicon, Darmstadt, Германия). Для полного отделения низкомолекулярных соединений при фильтрации в экстракте трижды заменяли ДИ воду, каждый раз собирая подмембранные фильтраты. Фильтраты объединяли и концентрировали на роторном испарителе Rotavapor R-215 (Buchi, Швейцария). Фракционирование низкомолекулярных компонентов и оценку молекулярной массы стимулятора проводили хроматографией концентрата на колонке с Bio-Gel P2 (Bio-Rad, США), в качестве маркеров использовали НАД, АТФ и АДФ (Serva, Германия). Для спектральных исследований использовали спектрофотометр UV-1800 (Shimadzu, Япония) и спектрофлуориметр Varian Cary Eclipse (Agilent Technologies, США). Эффект стимуляции свечения гриба *N. nambi* оценивали в экспериментах *in vivo* на пеллетах мицелия (см. выше) и *in vitro* с использованием люминесцентной системы, выделенной из гриба *N. nambi* [3]. Интенсивность и динамику световых сигналов регистрировали на люминометре Glomax® 20/20 (Promega, США). Для термообработки образцов, содержащих стимулятор свечения, использовали термостат ТВ-85 Thermo Batch (Shimadzu, Япония).

В исследованиях установлено: компонент, стимулирующий *in vivo* свечение гриба *N. nambi*, является низкомолекулярным, термостабильным соединением (имеет величину кажущейся молекулярной массы 0.46 кДа, сохраняет эффект после обработки при 100°C в течение 5 минут); спектр поглощения водного образца стимулятора содержит два основных пика при 205 и 260 нм и плечо в диапазоне 350-370 нм; стимулятор свечения обладает синей флуоресценцией с максимумом эмиссии 440-445 нм после возбуждения при 350-370 нм; стимулятор не является субстратом люминесцентной системы гриба *N. nambi*.

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

Литература:

- [1] Mogilnaya O.A., et al., Asian J. Mycol., V.3, PP.408-418 (2020).
- [2] Mogilnaya O.A., et al., Curr. Res. Environ. Appl. Mycol., V.8, PP.75-85 (2018).
- [3] Bondar V.S., et al., Dokl. Biochem. Biophys., V.455, PP.56-58 (2014).

Магниторезонансная гипертермия

Пьянков Владимир Федорович

ФИЦ КНЦ СО РАН МНЦИЭСО

В биомедицине применяют магнитные наночастицы (МНЧ) для гипертермии с целью угнетения роста опухолевых клеток. Классическая магнитная гипертермия подразумевает использование эффекта нагрева МНЧ в процессе перемагничивания, характеризуемого петлей гистерезиса. Используются при этом МНЧ магнетит-маггемитового ряда или ферриты на их основе. Мы предлагаем использовать явления магнитного резонанса [1-3] для нагрева МНЧ. Для случая ферромагнитного резонанса движение вектора намагниченности \mathbf{M} в магнитном поле \mathbf{H}_{eff} описывается уравнением Ландау-Лифшица (1) где γ — гиромагнитное отношение, α — параметр затухания.

$$\dot{\mathbf{M}} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff} - \frac{\gamma \alpha}{M} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}) \quad (1)$$

Если на вектор намагниченности частицы \mathbf{M} , помимо постоянного внешнего поля \mathbf{H} , воздействует высокочастотное СВЧ-поле с частотой f и амплитудой h , ортогональное полю \mathbf{H} , в ферромагнетике реализуется резонансное поглощение СВЧ-энергии. Для случая сферических наночастиц мнимая составляющая магнитной восприимчивости будет равна $\chi''_{res} \approx \frac{1}{2} \frac{\gamma' M_s}{\alpha f}$, где $\gamma' = \gamma/2\pi \approx 2.8$ МГц/Э. Такая наночастица с объемом V в единицу времени будет поглощать энергию, определяемую формулой $P = 2\pi f \frac{V}{2} \chi'' h^2$. В случае идеальной системы, когда вся поглощенная энергия идет на нагрев, можно оценить скорость нагрева как $dT/dt = h^2 \gamma' M_s / 4C\rho\alpha$, где ρ — плотность, C — удельная теплоемкость.

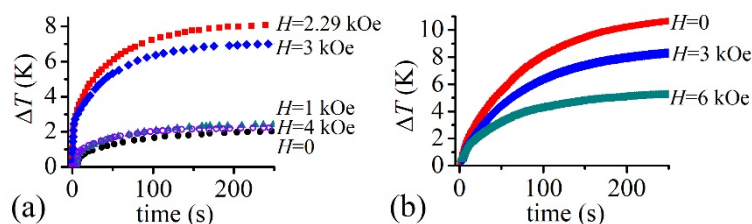


Рис. 15. Зависимость приращения температуры порошков никелевого (а) и кобальтового (б) ферритов от времени при различных значениях напряженностях магнитного поля H ($f=8.9$ ГГц).

Исследования кинетических кривых скорости нагрева от времени для кобальтового и никелевого ферритов, ферригидрита, гематита и маггемита в условиях ФМР позволяют оценить величину эффективного нагрева. Оценка эффективности ФМР гипертермии с МНЧ магнетита функционализированных аптамерами, проведенная с анализом жизнеспособности клеток асцитной карциномы Эрлиха (АКЭ) *in vitro*, свидетельствуют о снижении жизнеспособности клеток АКЭ в суспензии и возрастании числа клеток в состоянии апоптоза и некроза после 10 минут воздействия.

Литература:

- [1] J.-H. Lee, Y. Kim, S.-K. Kim, *Sci Rep.* **12**, 5232 (2022)
- [2] I. Khmelinskii, V.I. Makarov // *Journal of Thermal Biology* 77 55–61 (2018)
- [3] С.В. Столяр // *Физика металлов и металловедение* 124 №2 1-8 (2023)

Биосинтез и свойства трехкомпонентных полигидроксиалканоатов, полученных в культуре бактерий *Cupriavidus necator* B-10646

Сапожникова Кристина Юрьевна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

К необычным и малоисследованным типам ПГА относятся сополимеры, содержащие в качестве мономеров, помимо 3-гидроксибутирата (ЗГБ) и 3-гидроксивалерата (ЗГВ), также мономер 4-гидроксивалерата (4ГВ) [1-2]. Такие сополимеры демонстрируют более низкие показатели температуры плавления и степени кристалличности, поэтому повышение содержания мономеров ЗГБ и 4ГВ в их составе является важной задачей, решение которой расширит область применения ПГА [2-3].

Разработаны и реализованы режимы культивирования бактерий *C. necator* B-10646 на фруктозе и масляной кислоте с дробной подачей γ -валеролактона в качестве прекурсорного соединения для синтеза мономеров ЗГВ и 4ГВ. Варьируя концентрацию и количество доз предшественника, а также основного углеродного субстрата, удалось найти условия, обеспечивающие образование мономеров 3- и 4-гидроксивалерата и их включение в С-цепь поли(3-гидроксибутирата) при одновременном сохранении высоких выходов бактериальной биомассы (свыше 7.0 г/л) и содержания полимера в клетках (свыше 80 %) (рис. 1).

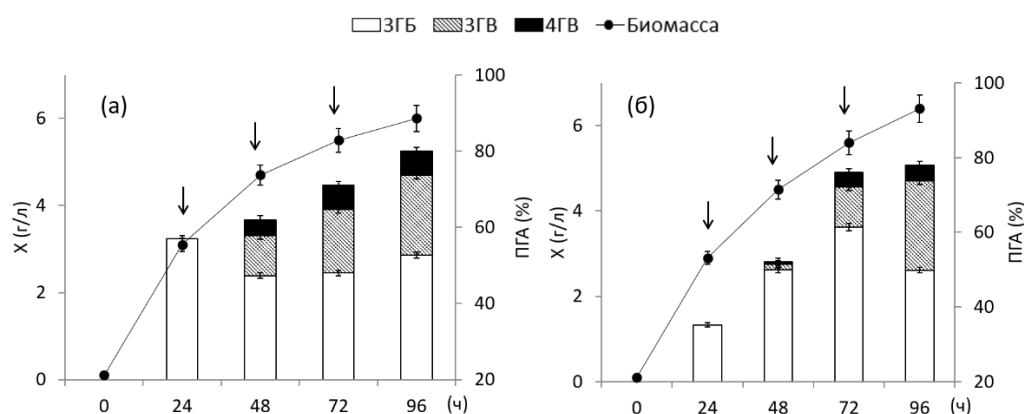


Рис. 1 – Концентрация биомассы бактерий *C. necator* B-10646, содержание и состав ПГА при использовании фруктозы (а) и масляной кислоты (б) в качестве основного С-субстрата с дробным внесением в культуру трех добавок γ -валеролактона в концентрации 1.5+1.5+2.0 г/л (стрелками указано время подачи γ -валеролактона в культуру бактерий).

Синтезировано семейство сополимеров П(ЗГБ-со-ЗГВ-со-4ГВ) с различным содержанием мономеров ЗГВ (до 30.7 мол.%) и 4ГВ (до 5.4 мол.%) и изучены их свойства. Отмечено значительное снижение степени кристалличности синтезированных сополимеров (до 38-49 %), что оказывает положительное влияние на их свойства и кинетику кристаллизации, и облегчает переработку в специализированные продукты, улучшая технологические свойства.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 0287-2021-0025. Автор выражает благодарность научному руководителю Жила Н.О. и коллективу Лаборатории хемоавтотрофного биосинтеза ИБФ СО РАН.

Литература:

- [1] Obruca S. [et al.], *Biotechnology Letters*, V.32, PP. 1925-1932 (2010).
- [2] Koller M. [et al.], *Biocatalysis and Biotransformation*, V.32, PP. 161-167 (2014).
- [3] Lee W.H. [et al.], *Bioresource Technology*, V. 99, PP. 6844-6851 (2008).

*Исследование люциферазы *Metridia* как комплементационного репортера для мониторинга белок-белковых взаимодействий в клетках*

Селиверстова Анастасия Геннадьевна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Исследование белок-белковых взаимодействий в живой клетке является одним из основных направлений современной протеомики. Понять, как осуществляется поддержание жизни клетки, невозможно без идентификации всех взаимодействующих друг с другом белков, кодируемых геномом.

Одним из способов исследования белок-белковых взаимодействий является метод комплементации белковых фрагментов. Принцип метода основан на свойстве белка-репортера восстанавливать свою активность при сборке из двух независимых фрагментов во время стерического сближения. По активности репортера можно судить о взаимодействии двух целевых белков, каждый из которых слит с отдельным таким фрагментом.

В качестве таких репортеров представляется перспективным использование биолюминесцентных белков. Целентеразин-зависимая секретируемая люцифераза из копепод *Metridia longa*, является одним из перспективнейших биолюминесцентных репортеров.

Цель данной работы: в рамках исследования возможностей создания комплементационного анализа белок-белковые взаимодействия на основе люциферазы *Metridia* оценить функциональную активность отдельных фрагментов молекулы, потенциально способных к комплементации и проверить уровень восстановления активности при их реассоциации.

Для использования MLuc люциферазы как репортера белок-белковых взаимодействий методом комплементации белковых фрагментов необходимо определить возможные комплементирующие фрагменты люциферазы и их репортерный потенциал. Для работы выбрана высокоактивная изоформа MLuc7 люциферазы *M. longa*, успешно используемая как репортер в эукариотических клетках [1]. Комплементирующие фрагменты энзимов определяют эмпирически – экспериментальным путем проверяя различные фрагменты потенциального репортера на восстановление исходной активности при стерическом сближении.

В данной работе проверяли на комплементацию фрагменты, полученные разделением молекулы люциферазы MLuc приблизительно пополам в районе стыковки tandemных неидентичных повторов, идентифицируемых в последовательности.

В качестве модельного объекта белок-белкового взаимодействия для обеспечения стерического сближения фрагментов люциферазы ML1 и ML2 выбрана последовательность дрожжевого лейцинового zipper. Последовательности Zip-фрагментов были слиты в единой рамке считывания с последовательность люциферазных фрагментов в той же самой конструкции через гибкий мостик.

Смешивание и совместная инкубация двух фрагментов люциферазы, содержащих димеризующие Zip-фрагменты, привели к восстановлению активности люциферазы, но функциональное восстановление не превышало приблизительно 5% в финальной точке. В развитие работы готовятся другие варианты разделения молекулы люциферазы на потенциально комплементирующие фрагменты на основе предсказанной пространственной структуры MLuc7.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-74-00027, <https://rscf.ru/project/21-74-00027/>.

Литература:

[1] S.V. Markova et al., J Biol Chem., 279(5),3212-7 (2004).

Станолы в донных отложениях озера Шира как палео-индикатор фекальных загрязнений и антропогенной нагрузки

Синнер Елизавета Константиновна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Донные отложения озёр содержат биохимические маркёры антропогенного воздействия. К этим веществам относятся, в том числе, станолы – восстановленные кишечной микрофлорой формы стеролов, являющиеся индикаторами фекальных поступлений в водоём [1]. Среди всеядных человек вносит наибольший вклад в содержание копростанола в донных отложениях [2], поэтому по его количеству в них может быть реконструирована динамика населения берегов водоёмов [3]. Для определения вклада растительоядных животных в общий пул станолов исследуется распределение стигмастанола.

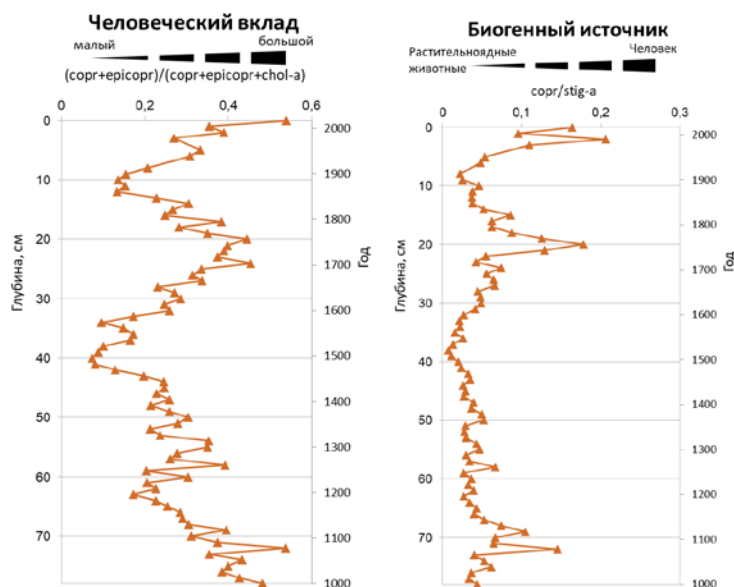


Рис. 1. Распределение станолов в керне донных отложений озера Шира: *copr* – копростанол, *epicopr* – эпикопростанол, *chol-a* – холестеранол, *stig-a* – стигмастанол.

Методом газовой хроматографии нами было оценено содержание копростанола, эпикопростанола, холестеранола и стигмастанола в датированных слоях керна донных отложений озера Шира (Хакасия). Увеличение соотношения $\frac{copr+epicopr}{copr+epicopr+chol-a}$ свидетельствует об усилении человеческого вклада в профиль распределения станолов; $\frac{copr}{stig-a}$ показывает доминирование источника станолов: человек или растительноядные животные [4]. Анализ полученных данных (рис. 1.) показывает увеличение человеческого присутствия в окрестностях озера в периоды: современность (популярный курорт), присоединение к России (XVII-XVIII вв.), государство Енисейских кыргызов (VI-XIII вв.).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда № 22-17-00185, <https://rscf.ru/project/22-17-00185/>. Автор благодарен Рогозину Д.Ю. за научное руководство, а также Бояндину А.Н. и Бульхину А.О. за помощь в аналитической работе.

Литература:

- [1] White, A.J. et al. Proc Natl Acad Sci U S A, V. 116, PP. 5461–5466 (2019).
- [2] Leeming R. et al. Water Research., 12(30). C2893–2900 (1996).
- [3] D’Anjou R.M. et al. Proc Natl Acad Sci U S A, 109, 20332–20337 (2012).
- [4] Schroeter N. et al. Front. Earth Sci., 8:20 (2020).

Исследование продуктивности пройденных огнем лесных территорий СФО по материалам спутниковой съемки

Стальмак Анастасия Витальевна¹, Голуков Алексей Сергеевич²

¹ *Сибирский федеральный университет*

² *Институт леса им В.Н. Сукачева СО РАН*

Ежегодно на территории Сибирского федерального округа (СФО) от пожаров страдают миллионы гектар лесных массивов, в связи с чем нарушаются продуктивность древесной растительности. В настоящее время существуют данные дистанционного зондирования, позволяющие отслеживать этот процесс и анализ которых позволит понять влияние пожаров на него [1].

Цель работы - оценка продуктивности пройденных огнем лесных территорий Сибирском федеральном округе по материалам спутниковой съемки.

В работе использовались данные продуктов MODIS о аномальных температурах (хотспоты) и пройденных огнем территориях (гарях) и – FIRMS и MCD64 соответственно, покрывающие территории СФО (угловые координаты сцены: 80° N, 71° E; 49° N, 122° E) за 2001-2020 гг. Для определения принадлежности гари к лесной территории использовались карты лесных территорий VEGA-PRO за 2006 и 2016 года. Валовая первичная продуктивность представлена 8-дневными данными GPP (продукт MOD17A2) за период 2003–2016 гг.

Далее было сделано перепроецирование данных в местную систему координат (EPGS 32646) и выполнен расчет площадей получившихся гарей в гектарах. Определение гарей, затронувших лесные территории выполнялось с помощью пространственного пересечения данных VEGA-PRO за 2006 с гарями за период 2001–2010 год и VEGA-PRO за 2016 с гарями за 2011–2020 год. Для получения площадей лесных территорий, пройденных огнем, преобразованные данные о гарях FIRMS и MCD64 были обрезаны по границам лесной территории по VEGA-PRO за указанные выше периоды.

Скачанные сцены GPP были объединены пространственно. Далее лесные территории, пройденные огнем, были превращены в центроиды, характеризующие центры гарей и гари, в которые были извлечены значения GPP. После данные были извлечены в Excel для анализа. Статистический анализ был выполнен в ПО STATISTICA. Обработка пространственных данных производилась в ПО QGIS и ArcGIS.

За период 2001-2020 гг. выявлено возрастание средних площадей гарей как севернее ($R^2=0.23$ при $p<0.05$), так и южнее ($R^2=0.27$ при $p<0.05$) полярного круга (66.5° N).

Было выявлено что древесной растительности в Арктической зоне необходимо примерно 11–13 лет, чтобы восстановить свою продуктивность (GPP) до уровня, предшествующего пожару. Древесной растительности, произрастающей южнее полярного круга необходимо примерно 5–7 лет, чтобы восстановить свою продуктивность на уровень до пожара.

Литература:

[1] Лупян Е.А., Стыценко Ф.В., Сенько К.С., Балашов И.В., Мазуров А.А., Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса, 18(4), 178-192 (2021).

Влияние фуллеренолов на бактериальную биолюминесценцию

Сушко Екатерина Сергеевна

Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Фуллеренолы – наноразмерные водорастворимые полигидроксилированные производные фуллеренов (аллотропная форма углерода, сферически-замкнутые молекулы). Эти соединения перспективны в медицине, фармакологии и биотехнологии, поскольку обладают высокой биосовместимостью и широким спектром биологической активности (проявляют антиоксидантные, радиозащитные, антибактериальные, противовирусные, противогрибковые, противораковые свойства). Следует отметить, что биологическая активность фуллеренолов изучается в несопоставимых условиях, на разных объектах и остается малоизученной.

В работе анализировалось влияние фуллеренолов различной структуры ($C_{60,70}O_y(OH)_x$, где $x + y = 10-12$; $Gd@C_{82}O_y(OH)_x$, где $x + y = 20-24$; $C_{60}O_y(OH)_x$, $C_{60,70}O_y(OH)_x$, где $x + y = 24-28$; $C_{60,70}O_y(OH)_x$, $Fe_{0,5}C_{60}O_y(OH)_x$, $Gd@C_{82}O_y(OH)_x$, где $x + y = 40-42$) на бактериальную биолюминесценцию в сопоставимых условиях. Для мониторинга воздействия фуллеренолов использовали люминесцентные клеточные и ферментативные биотесты (соответственно морские светящиеся бактерии *Photobacterium phosphoreum* и их ферментативные реакции), где главный тестируемый параметр – интенсивность биолюминесценции. Для характеристики ингибирующей способности фуллеренолов определяли их концентрации, подавляющие биолюминесценцию тестовых систем на 50%. Содержание активных форм кислорода (АФК) в экспериментальных растворах оценивали хемилюминесцентным люминольным методом, определяли корреляции с интенсивностью биолюминесценции.

Все исследуемые фуллеренолы продемонстрировали ингибирующую способность при высоких концентрациях ($>10^{-3}$ г/л) [1]. Методом корреляционного анализа показано, что ингибирующая способность фуллеренолов связана с уменьшением содержания АФК в исследуемых растворах. Меньшей ингибирующей способностью обладают фуллеренолы в структуре которых количество кислородосодержащих групп равно $\frac{1}{2}$ количества атомов углерода в каркасе, что связано с соотношением размера фрагментов гидрофобной π -системы и количеством полярных (гидрофильных) кислородосодержащих групп. Фуллеренолы интенсивнее ингибируют биолюминесценцию бактериального биотеста, чем ферментативного, что вероятно определяется наличием дополнительных путей воздействия – на гидрофобные фрагменты бактериальной клеточной мембраны. При этом, для бактериальной тестовой системы наименьшей ингибирующей токсичностью обладают Gd-содержащие фуллеренолы $Gd@C_{82}O_y(OH)_x$ ($x+y=20-24$; $x+y=40-42$), что вероятно связано с большим размером их углеродного каркаса и склонностью к агрегации. Фуллеренолы ускоряют автоокисление НАДН – эндогенного восстановителя (в ферментативном и неферментативном процессах), а также окисление НАДН эндогенным окислителем – ФМН (в ферментативном процессе), что вносит вклад соответственно в уменьшение и увеличение скорости биолюминесцентной реакции [2].

Автор выражает благодарность соавторам работы: Степину Е. А., Кичеевой А. Г., Сачковой А.С., Внуковой Н. Г., Чурилову Г. Н., Кудряшевой Н. С.

Литература:

- [1] Kovel E.S., Sachkova A.S., Vnukova N.G., Churilov G.N., Knyazeva E.M., Kudryasheva N.S., International Journal of Molecular Sciences, V.20, PP. 2324 (2019).
- [2] Sachkova A.S., Kovel E.S., Churilov G.N., Guseynov O.A., Bondar A.A., Dubinina I.A., Kudryasheva N.S., Biochemistry and Biophysics Reports, V.9, PP. 1-8 (2016).

Инициация соматического эмбриогенеза у *Larix sibirica* Ledeb.

Титова Диана Андреевна¹, Пак Мария Эдуардовна²

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт леса им. В.Н Сукачева СО РАН*

Соматический эмбриогенез (СЭ) – это перепрограммирование развития вегетативных клеток в направлении пути эмбриогенеза, который является уникальным феноменом в развитии голосеменных растений. В основе методов лежит уникальная способность растительных клеток реализовывать при определенных условиях имеющуюся у них генетическую информацию и давать неограниченное количество высокопродуктивных, устойчивых к патогенам клонированных сеянцев.

В качестве объектов *Larix sibirica* Ledeb., были взяты 2 дерева, произрастающие в Дендрарии Института Леса СО РАН. Инициация соматического эмбриогенеза производилась из зиготических зародышей *Larix sibirica* собранных в середине июля. Экспланты после стерилизации вводились на среду АИ. Соматический эмбриогенез начинается с удлинения, поляризации и неравномерного деления соматических клеток, а также локализация ИУК на одном конце удлиненной клетки. Через 1-1,5 месяца формируется хорошо развитая эмбриогенная ткань, представленная ЭСМ, в которой идет активное образование глобулярных соматических зародышей. Получено 45 клеточных линий, из которых 7 с эмбрионально суспензорной массой.

Между клеточными линиями наблюдалась значительная изменчивость по числу и размеру глобулярных зародышей в пролиферирующих эмбриогенных культурах. У пролиферирующих эмбриогенных культур число глобулярных соматических зародышей составляло 2650 на 1 г сырого веса ЭСМ.

Приготовление лабораторного образца клонированных сеянцев лиственницы сибирской из ЭСМ, готовых для высадки в теплицу занимает 4–6 мес.: 1 этап – инициация эмбриогенных каллусов продолжается 30–45 суток (среда АИ с 2.4-Д и 6-БАП); 2 – этап пролиферации идет от 1–2 мес. до 13 лет и более при постоянных пересадках (среда АИ с 2.4-Д и 6-БАП); 3 этап – созревание соматических зародышей в течение 20–60 дней (среда АИ с АБК), 4 этап – прорастание соматических зародышей занимает 5–8 недель (среда АИ без гормонов), 5 этап – адаптация проростков в стерильной почве в условиях ростовой камеры в течение 3 мес.

Таким образом через технологию соматического эмбриогенеза мы получили 7 клеточных линий лиственницы сибирской, которые развиваются по пути соматического эмбриогенеза. Опыты на дифференциацию соматического эмбриогенеза на среду АИ для вызревания продолжаются.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда № 22-14-20008 и Красноярского краевого фонда науки. Авторы работы выражает искреннюю благодарность д.б.н., профессору Третьяковой И. Н. за неоценимую помощь в исследовании.

Горимость арктической зоны Сибири в условиях климатических изменений XX – начала XXI вв.

Третьяков Павел Дмитриевич

Сибирский федеральный университет

На данный момент актуальны исследования закономерностей климатических изменений. Современная оценка воздействий изменения климата (Arctic Climate Impact Assessment) показывает тенденцию роста температуры в Арктике, достигающую $\sim 3^{\circ}\text{C}$ за 30-летний период (1971–2000 гг.) в отдельных районах (Аляска, Северная Канада, Сибирь) [1]. Так глобальное потепление может провоцировать рост вероятности возникновения пожаров, их частоты и интенсивности, оказывающее существенное воздействие на лесные экосистемы и экосистемы притундровых регионов [2]. В связи с чем актуальны исследования закономерностей климатических изменений, необходимых для минимизации возможных последствий от лесных пожаров и послепожарных процессов.

Цель работы: многофакторный анализ изменения метеорологических параметров в связи с характеристиками горимости арктической зоны Сибири. Район исследования включал в себя Арктическую зону Сибири в координатах $64\text{--}74^{\circ}$ с.ш. $60\text{--}150^{\circ}$ в.д. с выделением 4 зон: I зона $60\text{--}80^{\circ}$ в.д., II зона и $80\text{--}110^{\circ}$ в.д., III зона $110\text{--}130^{\circ}$ в.д. и IV зона $130\text{--}150^{\circ}$ в.д.

С начала XXI века в арктической зоне Сибири значительно возросли факторы, которые могут повлиять на возникновение пожаров (рисунок 1). Температура воздуха, продолжительность вегетационного периода и грозовая активность постоянно повышаются. В настоящее время в западной и центральной части (I и II зона) арктической зоны Сибири увеличение температуры вегетационного периода имеет наиболее высокие темпы роста $\sim 37\text{--}42\%$ за 60 лет, а также незначительное снижение осадков на $8\text{--}15\%$ по сравнению с периодом 1960-х гг., что не сильно оказывает влияние на пожарные режимы этой территории. Подтверждением этого является незначительное изменение тепло-влагообеспеченности ($0,7\text{--}10\%$ от оптимума) и уменьшение горимости. Значительная разница, отмеченная для восточной части (зоны III и IV) между снижением осадков ($34\text{--}37\%$) и ростом температуры ($23\text{--}25\%$), показывает увеличение засушливости климата и, как следствие, увеличении горимости – $\gamma=4,861\%$ (при среднемноголетней норме $\langle\gamma\rangle=0,619\%$) в Восточной части Арктической зоны Сибири. Также установлено увеличение длительности вегетационного периода с 54 ± 9 дней в 1961–1970 гг. до $71\pm 14,8$ дней в 2011–2020 гг., т.е. за 50 лет эта характеристика выросла на 30%.

Таким образом, увеличение горимости арктической зоны Сибири является закономерным результатом изменения метеопараметров, в первую очередь температуры вегетационного периода и осадков. Изменение режима тепло- и влагообеспеченности позволяет прогнозировать ужесточение пожарных режимов Арктики в ближайшей перспективе и рост вероятности возникновения массовых пожаров в тундре.

Литература:

- [1] Ciavarella A., Cotterill D., Sott P., Prolonged Siberian heat of 2020 almost impossible without human influence, *Climatic Change*, № 166, (2021).
- [2] Kharuk V.I., Ponomarev E.I., Ivanova G.A., Dvinskaya M.L., Coogan S.C.P., Flannigan M.D., Wildfires in the Siberian taiga, *Ambio*, Vol. 50(11), PP.1953–1974 (2021).

Особенности развития пыльцы лиственницы сибирской (Larix sibirica Ledeb.) и лиственницы Гмелина (Larix gmelinii Rupr.)

Шемберг Антон Михайлович

Институт леса им. В. Н. Сукачева СО РАН

Несмотря на принадлежность к ветроопыляемым растениям, пыльцевые зёрна лиственниц не содержат воздушных мешков [1]. Эта уникальная особенность может применяться в работах по созданию чистых линий.

Цель настоящего исследования – сравнение особенностей развития генеративных органов лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина в условиях Красноярской лесостепи. В качестве объектов исследования служили деревья лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина, произрастающие на территории дендрария Института леса им. В. Н. Сукачева СО РАН г. Красноярска.

Сбор генеративных органов лиственниц проводился с конца октября 2021 года по конец апреля 2022 года. Мужские генеративные почки помещали в раствор Карнуа. Перед окраской микростробилы помещали в раствор железоаммонийных квасцов на 10—20 минут. Для окрашивания материала использовали 1%-й раствор ацетогематоксилина (1 г гематоксилина на 100 мл 45%-й уксусной кислоты). Окрашенный материал помещали на предметное стекло в каплю насыщенного раствора хлоралгидрата и накрывали покровным стеклом. Определение жизнеспособности пыльцы проводилось окрашиванием её реактивом Люголя. Содержание крахмала в пыльце оценивали по двухбалльной системе: положительное окрашивание, отсутствие окрашивания. Полученные препараты просматривали под микроскопом ЛОМО МИКМЕД.

Результаты исследования показали, что осенью (начало октября) в генеративных почках у лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина формируются микроспорангии, в которых начинают развиваться клетки археспория. В середине октября клетки археспория обособляются, в конце октября микроспороциты вступают в профазу мейоза. В ноябре мейоциты находятся на стадии пахитены-лептонены и в этом состоянии они зимуют. Мейотические деления у лиственницы Гмелина возобновляются в конце февраля при отрицательных температурах, а заканчиваются 11 марта. У лиственницы сибирской мейотические деления идут в начале марта. Прохождение фаз мейоза продолжается в течение всего марта при отрицательных температурах и только 2 апреля обнаруживаются тетрады микроспор. Определение жизнеспособности пыльцы, показало высокое содержание крахмала в пыльцевых зернах лиственниц, что свидетельствует о высоком качестве пыльцы и возможности её применения в проведении гибридизационных работ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научного проекта № 22-14-20008. Автор работы выражает искреннюю благодарность д.б.н., профессору Третьяковой И. Н. за неоценимую помощь в исследовании.

Литература:

[1] Кулаков Е.Е., Сиволапов А.И., Лесной вестник, 25(3), 42-48. (2021).

Секция «Математическое моделирование»

Конференция молодых учёных 2023 по математическому моделированию и информационным технологиям проводится при поддержке Красноярского математического центра, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912).

Математическая модель «среднего поля» для описания поведения производителей товаров в рамках олигополической рыночной структуры

Барабаш Владислав Владимирович

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

В данной работе предлагается математическая модель для описания поведения производителей товаров в рамках олигополической рыночной структуры. Рассматривается временная эволюция большого числа агентов-производителей, каждый из которых характеризуется своими производственными мощностями.

Модель основана на идеях олигопольных моделей рынка, предложенных Курно и Берtrandом [1,2]. В этих моделях каждый производитель принимает цену и объем производства конкурентов неизменными в каждый фиксированный момент времени и принимает решение на основе имеющихся данных о конкурентах.

Изначально модель Курно-Бертрана была в рамках дуополии. В настоящей же работе предлагается подход «Игры среднего поля», который был предложен в трудах [3,4] для описания взаимодействия большого числа игроков в рамках стратегических ситуаций. Этот подход подразумевает, что каждый отдельно взятый игрок не влияет на общее развитие ситуации, а значение имеет только поведение общей массы игроков, обобщая модель Курно-Бертрана для описания поведения множества производителей.

В работе предложен конечно-разностный метод решения поставленной задачи и результат вычислительного эксперимента. Результаты вычислительного эксперимента для модельной задачи представлены на рис. 1.

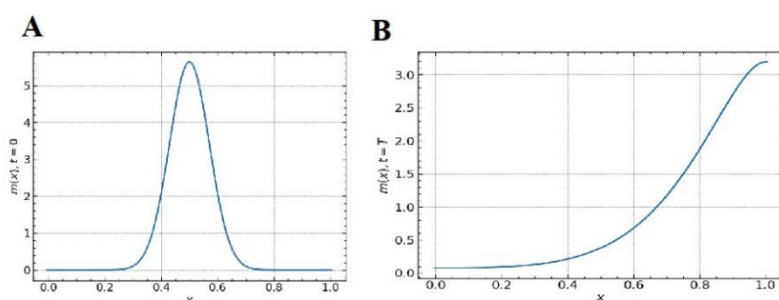


Рис. 1. А – Начальное распределение производителей по их производственным мощностям; В – распределение производителей на горизонте времени

Таким образом, предлагаемая модель и метод решения могут быть полезными инструментами для исследования рыночных структур и поведения производителей.

Литература:

- [1] Bertrand J. Théorie mathématique de la richesse sociale. Journal des Savants, V.67, P. 499–508 (1883).
- [2] Cournot A. Recherches sur les Principes Mathématiques de la Théorie des Richesses. Paris: Hachette, 1838.
- [3] Huang M., Malhamé R.P., Caines P.E., Communication Information Systems, V.6, P. 221–252 (2006).
- [4] Lasry J.M., Lions P.L. Mean field games. Japanese Journal of Mathematics, V.2, P. 229–260 (2007).

Разработка гибридного метода распознавания незаконных построек в водоохранных зонах на основе метода исключения областей и метода Жука
Гилин Степан Валентинович
Сибирский федеральный университет

В данной работе решается задача распознавания незаконных строений в водоохранных зонах на спутниковых снимках. Данная задача является актуальной и практически значимой. Перечислим основные этапы решения задачи:

1. обнаружение и классификация построек,
2. обнаружение водных ресурсов и их классификация,
3. определение водоохранных зон,
4. определение законности обнаруженных построек.

Задачи обнаружения построек и водных ресурсов на снимках относятся к категории задач распознавания объектов на изображениях. Для решения задачи будут использоваться изображения, в которых пикселю изображения соответствует область на местности размером 3×3 метра. Наиболее трудоёмкой является первая подзадача – обнаружение искусственного сооружения на изображении. Детектируется объект на изображении, выделяются его признаки (цвет пикселей, текстура, углы объекта, форма контура). Используется общее свойство искусственных объектов: они имеют либо малую постоянную кривизну (объекты круглой формы), либо несколько точек высокой кривизны (объекты прямоугольной формы).

В работе используется гибридный метод распознавания на основе метода исключения областей и метода Жука. Метод основан на векторной модели и включает в себя поиск замкнутых контуров на изображении с выделением контуров зданий. Метод исключения областей заключается в последовательном исключении областей различных объектов, которые не подходят к классу распознаваемого объекта с помощью выключения заранее заданных масок и дальнейшей проверки соотношения оставшихся на изображении областей на выпуклость. Метод Жука выполняет последовательное вычерчивание границы между объектом и фоном. После использования этих методов получаем границы объектов – изображение с выделенными областями построек. Затем выполняется проверка вышеприведенных характеристик искусственного сооружения.

В работе были проведены вычислительные эксперименты по сравнению предложенного гибридного метода с оригинальным методом исключения областей, методом активных контуров и нейросетевым методом. Предложенный метод продемонстрировал наилучшую точность распознавания объектов и одну из самых высоких скоростей распознавания, близкую к скорости нейронной сети.

Литература:

- [1] Лепский, А.Е. Математические методы распознавания образов – Таганрог: ЮФУ, 2009.
[2] Местецкий, Л.М. Математические методы распознавания образов – М.: МГУ, 2004.

Полулагранжевы методы решения уравнения переноса

Голубев Роман Андреевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Рассмотрим гиперболическое уравнение первого порядка с начальными и краевыми условиями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} &= f(t, x), \quad \forall (t, x) \in [0, T] \times [0, 1], \\ u(0, x) &= u_0(x), \quad u(t, 0) = \varphi_1(t), \quad u(t, 1) = \varphi_2(t). \end{aligned}$$

Для аппроксимации задачи (1)-(2) сначала рассмотрим эйлерово-лагранжев подход, реализуемый на фиксированной пространственно-временной сетке с привлечением участков характеристик между временными слоями. Введем равномерные разностные сетки по времени $\omega_t = \{t_k = k\tau, j = 0, \dots, M\}$ и пространству $\bar{\omega}_x = \{x_i = ih, i = 0, \dots, N\}$. Тогда решение задачи (1)-(2) с ненулевой правой частью $f(t, x)$ вдоль характеристик в узлах сеток ω_t и $\bar{\omega}_x$ может быть найдено из уравнения:

$$u^h(t_k, x_i) = u^h(t_{k-1}, x_i^*) + \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(r, \bar{x}_{k,i}(r)) dr.$$

Здесь x_i^* – точка пересечения характеристики и прямой $t = t_{k-1}$. Заменяем в (3) интеграл квадратурной формулой. Вместо точки x_i^* возьмем ее приближенное значение в виде результата одного шага явного метода Эйлера. Приближенное решение в промежуточной точке заменим линейной комбинацией значений в соседних узлах. Добавляя начальное и краевые условия, получим сеточную задачу, которая аппроксимирует задачу (1)-(2) с первым порядком точности:

$$\begin{aligned} u_{k,i}^h - \alpha_{k-1,i} u_{k-1,i-1}^h - \beta_{k-1,i} u_{k-1,i}^h - \gamma_{k-1,i} u_{k-1,i+1}^h &= \tau f_{k,i} + O(\tau + h), \\ u_{0,i}^h &= u_0(x_i), \quad u_{k,0}^h = \varphi_1(t_k), \quad u_{k,N}^h = \varphi_2(t_k), \end{aligned}$$

где $\alpha_{k-1,i} = \max\{0, \tau a_{k,i}/h\} \geq 0$, $\gamma_{k-1,i} = \max\{0, -\tau a_{k,i}/h\} \geq 0$, $\beta_{k-1,i} = 1 - \alpha_{k-1,i} - \gamma_{k-1,i} \geq 0$.

Теперь рассмотрим лагранжево-эйлеров подход. Он реализуется на неравномерных разностных сетках $\bar{\omega}_x^k = \{\bar{x}_{k,i}, i = 0, \dots, N\}$, полученных пересечением характеристических кривых, выпущенных из равномерно расположенных узлов в начальный момент времени. Проводя рассуждения, аналогичные эйлерово-лагранжеву подходу, получим сеточную задачу, которая аппроксимирует задачу (1)-(2) со вторым порядком точности:

$$\begin{aligned} u_{k,i}^\tau &= u_{k-1,i}^\tau + \tau \left(f(t_k, \bar{x}_{k,i}^\tau) + f(t_{k-1}, \bar{x}_{k-1,i}^\tau) \right) / 2, \\ u_{0,i}^\tau &= u_0(x_i), \quad u_{k,0}^\tau = \varphi_1(t_k), \quad u_{k,N}^\tau = \varphi_2(t_k). \end{aligned}$$

Здесь $\bar{x}_{k,i}^\tau$ – узлы приближенной неравномерной сетки, вычисленные методом Рунге-Кутты второго порядка точности.

В работе также были получены аналогичные методы для двумерного уравнения переноса.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912).

Применение компактной разностной схемы в гидродинамической модели истечения атмосферы планеты TOI-421b

Горбунова Ксения Дмитриевна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Математическое моделирование процесса убегания частиц атмосферы под интенсивным воздействием внешнего ультрафиолетового излучения от звезды в сочетании с наблюдениями может дать важную информацию о физических условиях на планетах. В гидродинамике часто используется классическая схема Маккормака 2-го порядка [1], например в [2]. Однако, при использовании компактной схемы 4-го порядка с 4-этапным методом Рунге-Кутты [3] можно существенно повысить точность результатов и снизить вычислительные затраты [4,5].

Для моделирования применяем одномерные гидродинамические уравнения сохранения массы, импульса и энергии в сферической системе координат с учетом гравитационного потенциала, учитывающего три фактора: притяжение планеты, приливное притяжение звезды и вклад центробежных сил, связанных с вращением бинарной системы вокруг их центра масс. Для определения скорости нагрева жестким УФ используем двумерную функцию, усредненную по сферическому и азимутальному углам. Поглощение такого излучения помимо нагрева верхней части атмосферы приводит к диссоциации и ионизации атмосферных частиц. Решая систему, получаем стационарное установившееся решение при постоянных внешних условиях. В качестве объекта моделирования рассматривается близко-расположенный к звезде мини-Нептун TOI-421b [6] с интенсивностью нагрева $F_{EUV} = 7452$ эрг/см², температурой атмосферы на нижней границе $T_0 = 981.4$ К, и давлением $p_0 = 5$ дин/см². При расчетах используется неравномерная сетка, сгущающаяся у нижней границы, позволяющая более точно моделировать область перехода от гидростатического режима к гидродинамическому, в которой возникает большие градиенты функций.

В отличие от классической схемы Маккормака, используемая компактная схема допускает предельное значение числа Куранта $K = 1$, обеспечивает быстрое установление стационарного решения с хорошей точностью результатов при небольшом числе узлов сетки.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912). Численные расчеты проводились на кластере МВС-1000 М Института вычислительного моделирования СО РАН. Автор выражает благодарность соавтору работы: Еркаев Н. В.

Литература:

- [1] MacCormack R. W., AIAA Paper P. 69-354, (1969).
- [2] Erkaev N. V., Lammer H., Odert P., Kulikov Y. N., Kislyakova K. G., Khodachenko M. L., Gudel M., Hanslmeier A., Biernat H., *Astrobiology*, 13(11), 1011-1029 (2013).
- [3] Nixson R., Turkel E., *Journal of Computational Physics*, V. 158, P. 51-70 (2000).
- [4] Gorbunova K. D., Erkaev N. V., *J. of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, V. 15, № 4, P. 500-509 (2022).
- [5] Еркаев Н. В., Горбунова К. Д., *Вычислительные технологии*. В печати.
- [6] Carleo I., Gandolfi D., Barragan O., Livingston J.H., Persson C.M., Lam K.W., et al. *The Astronomical Journal*, V. 160, № 3, P. 114 (2020).

Моделирование сейсмических волн в средах с различной реологией

Ефимов Евгений Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Геологические среды, такие как грунты и горные породы являются существенно неоднородными. При решении прямых задач сейсмологии необходимо учитывать крупномасштабные неоднородности, обусловленные особенностями строения массивов пород. Иначе могут быть упущены тонкие эффекты, значительно влияющие на картину волновых полей. Например, в средах с блочно-слоистой структурой возможно распространение маятниковых волн, которые не могут наблюдаться в рамках однородных осреднённых моделей [1]. Если неоднородности имеют малый размер и в отдельности слабо влияют на характер распространения волн, то можно воспользоваться осреднёнными однородными моделями.

На мелкомасштабном уровне породы можно представить как пористый упругий материал, насыщенный влагой или газом. Одна из наиболее употребительных однородных моделей пороупругости была разработана Био [2]. Она описывает продольные и поперечные «быстрые» волны в твёрдой фазе среды, а также «медленную» продольную волну в поровой жидкости. Движение вязкой жидкости вызывает диссипативные процессы, с которыми связаны эффекты затухания волн в горных породах. Для описания затухания волн можно воспользоваться более простыми и удобными с точки зрения численной реализации моделями вязкоупругого тела. Наиболее адекватной является обобщённая модель стандартного линейного тела, поскольку хорошо воспроизводит результаты экспериментов, показывающих, что добротность остаётся постоянной в сейсмическом диапазоне частот (1-200 Гц) [2].

Недостаток применения теории вязкоупругости заключается в том, что при распространении ударной волны диссипация энергии будет происходить за фронтом на вязких элементах по мере их релаксации. Поэтому диссипация на фронте волны может быть учтена в рамках теории пластичности. Пластическая волна, на которой происходит диссипация энергии, возникает, когда напряжения достигают предела текучести.

Для двумерных задач динамики вязкоупругих и упругопластических сред дифференциальный оператор записывается в симметрической t -гиперболической форме. Численное решение задачи вязкоупругости строится на основе метода расщепления по пространственным переменным и физическим процессам. На отдельных этапах расщепления решаются одномерные системы уравнений теории упругости и уравнения, описывающие вязкие процессы. Упругопластическая задача формулируется в виде вариационного неравенства [4], при численном решении которого используется процедура корректировки Уилкинса.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912).

Литература:

- [1] Опарин В.Н., Балмашнова Е.Г., Востриков В.И. Физ.-техн. пробл. разраб. полез. ископаемых. № 5, С. 12-18 (2001).
- [2] Biot M.A., Journal of Applied Physics, V.33, P. 1482-1498 (1962).
- [3] McDonald F. J., Geophysics., V.23, P. 421-439 (1958).
- [4] Садовский В. М. Разрывные решения в задачах динамики упругопластических сред. Москва: Наука, 1997.

Автоматизация определения температуры поверхности земли на территории центральной Сибири по данным Landsat 8-9

Зайцев Николай Евгеньевич

Институт космических и информационных технологий

На территории Сибири Landsat [1] использует спутниковые данные *ASTER GED* [2] для последующей обработки с целью формирования данных по температуре поверхности Земли (*LST*). Данные *ASTER* плохо откалиброваны для использования на этой территории, что вынуждает исследователей искать более качественные данные. Спутники *Landsat* производят съемку в инфракрасном диапазоне, и качество снимков более удовлетворительное для территории Сибири, чем у *ASTER*, следовательно эти снимки так же могут быть использованы для получения карт температуры поверхности Земли [3].

Чтобы использовать данные без артефактов необходимо загрузить необработанные снимки и применить штатный алгоритм расчета температуры поверхности *Landsat*, что представляет собой достаточно трудоемкий процесс. В качестве автоматизации обработки данных разработано приложение, которое загружает в автоматизированном режиме снимки *Landsat*, необходимые для последующей обработки, выполняет необходимые матричные операции над снимками и возвращает готовые каталогизированные данные, включающие карты *LST* в растровом формате разрешением 100 метров. Каждая ячейка (при условии отсутствия облаков) содержит числовое значение температуры в градусах по Цельсию.

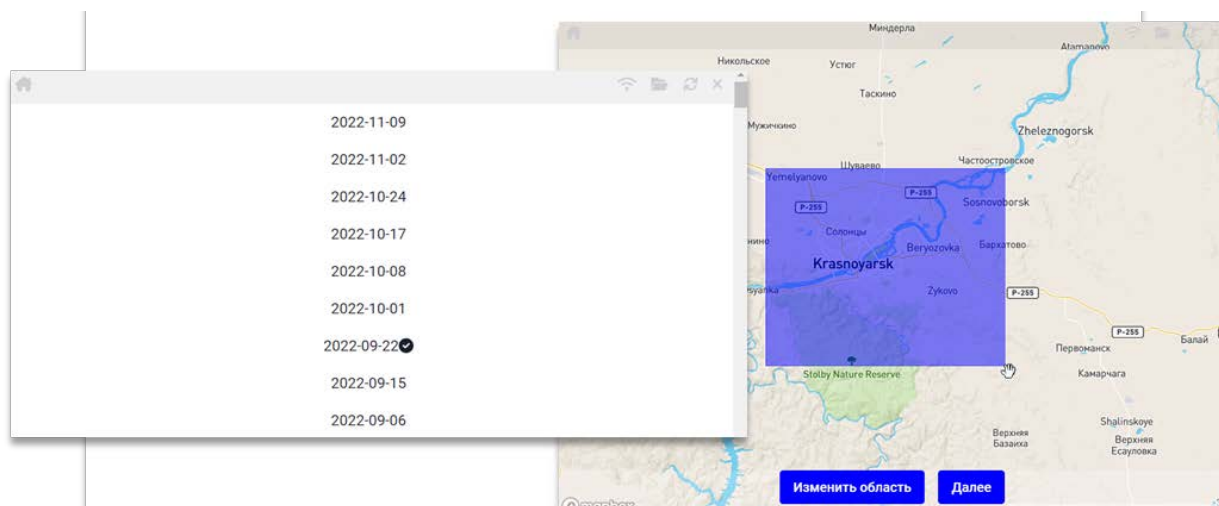


Рис. 15. Графический интерфейс приложения для получения слоя температуры поверхности Земли.

Полученные данные могут быть использованы для исследований тепловых аномалий.

Литература:

[1] Landsat-8 [Электронный ресурс] // Википедия: [сайт]. – URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Landsat-8> (дата обращения: 20.03.2023).

[2] ASTER-GED – Emissivity [Электронный ресурс] // Nasa: [сайт]. – URL: <https://emissivity.jpl.nasa.gov/aster-ged> (дата обращения: 20.03.2023).

[3] Гостева А. А., Матушко А. К., Якубайлик О. Э. Выявление изменений городской среды на основе спутниковых данных инфракрасного диапазона (на примере Красноярска). Материалы Международной конференции «ИнтерКарто. ИнтерГИС», Т. 26, № 2, С. 90–100 (2019).

Снятие современного экологического состояния окружающей среды с применением ГИС-технологий

Зубрицкий Павел Анатольевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Одной из первых задач по ведению мониторинга техногенных объектов, в частности по добыче полезных ископаемых, является снятие современного экологического состояния окружающей среды (ССЭС ОС) на лицензионном участке (ЛУ). Задачей ССЭС ОС является определение значения содержания элементов на территории ЛУ до начала работ, чтобы в дальнейшем можно было оценить воздействие на окружающую среду в процессе освоения месторождения (от поисков до эксплуатации).

Процесс ССЭС ОС состоит из нескольких этапов: 1) разработка и утверждение программы ССЭС ОС; 2) подготовка к полевым работам; 3) полевые работы; 4) камеральная обработка и аналитика; 5) составление окончательного отчета по результатам ССЭС ОС и его согласование. По результатам работ с применением ГИС-технологий, в общем случае получаем 4 карты: карта фактического материала, карта ЭГП (экзогенных геологических процессов), карта нарушенности земель (схема дешифрирования) и карта результатов опробования.

На первом этапе утверждения программы ССЭС ОС происходит сбор различной тематической информации. Программа разрабатывается на основе требований к производству и результатам многоцелевого геохимического картирования масштаба 1:200 000 [1]. Определяется количество, местоположения и виды опробования (вода, донные отложения, почва, растительность, радиометрия, снег). По снеговому опробованию определяется качество атмосферного воздуха.

На втором этапе производится подготовка картографической продукции (карта-схема опробования, схема предварительного дешифрирования) для полевого отряда и подготовка оборудования. Данные с карты-схемы заносятся в GPS-навигатор и передаются полевому отряду. Схема предварительного дешифрирования создается на основе различных спутниковых снимков и онлайн картографических сервисов.

После проведения полевых работ наступает этап камеральных работ, аналитики, а также начинается написание итогового отчета по ССЭС ОС. На данном этапе создаются итоговые карты, при составлении которых применяются технологии и инструменты ГИС. На карту фактического материала выносятся вся фактура по работам. Оформляется окончательный вариант схемы дешифрирования, по результатам полевых работ. На карту ЭГП данные по процессам из фондовых материалов и проведенных полевых работ. На карте результатов опробования показываются результаты обработки анализов. Данные выносятся в виде псевдоформул рядом с точкой опробования, в которой были выявлены превышения ПДК.

Результаты проведенных работ являются отправной точкой для дальнейшей оценки антропогенного воздействия на окружающую среду на территории лицензионного участка.

Литература:

[1] Требования к производству и результатам многоцелевого геохимического картирования масштаба 1:200 000 (2002).

Математическое моделирование нанофильтрации водных растворов с помощью управляемых электрическим полем мембран

Капитонов Алексей Антонович

Институт космических и информационных технологий СФУ

В мембранах с электропроводящей поверхностью транспорт ионов можно регулировать путём изменения поверхностного потенциала. Такая мембрана проявляет селективность, механизм которой основан на перекрытии нанопоры двойным электрическим слоем (ДЭС), что препятствует прохождению ионов раствора через мембрану. Толщина ДЭС определяется длиной Дебая. Если она больше радиуса нанопор, то селективность мембраны падает.

Для описания переноса ионов в проводящих мембранах используются уравнения Навье – Стокса, Нерста – Планка и Пуассона. Если длина Дебая сравнима с радиусом нанопор или меньше его, то используется модель однородного потенциала, при которой распределения потенциала, концентрации ионов и давления внутри нанопоры зависят только от расстояния вдоль поры [1]. Граничные условия для уравнений задаются скачками потенциала Доннана и вызванными им скачками концентрации и осмотического давления. Мерами качества фильтрации являются коэффициенты задержания ионов, определяемые как доли отфильтрованных ионов (1 – идеальная селективность, 0 – селективности нет).

Целью данной работы является математическое моделирование нанофильтрации водных растворов солей на основе модели однородного потенциала, сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными и параметрическое исследование модели.

На рис. 1 показано сравнение результатов эксперимента [2] и расчёта. На графике изображена зависимость задержания катионов от приложенного потенциала для растворов NaCl и Na₂SO₄. Видно, что расчёт хорошо согласуется с экспериментом. Рост приложенного потенциала приводит к росту задержания из-за увеличения заряда. Задержание при отсутствии потенциала объясняется химическим зарядом и стерическим эффектом. Несимметричность графика вызвана разницей коэффициентов диффузии ионов и разницей зарядов ионов при диссоциации (Na₂SO₄).

В результате установлено хорошее согласие расчётных данных на основе модели с результатами эксперимента, что подтверждает предсказательную силу модели и позволяет использовать её для практических целей.

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

Литература:

- [1] Рыжков И. И., Вяткин А. С., Михлина Е. В., Мембраны и мембранные технологии, Т. 10, № 1, С. 13-23 (2020).
- [2] Zhang H. [et al.], Environmental Science and Technology, V. 53, P. 868-877 (2019).

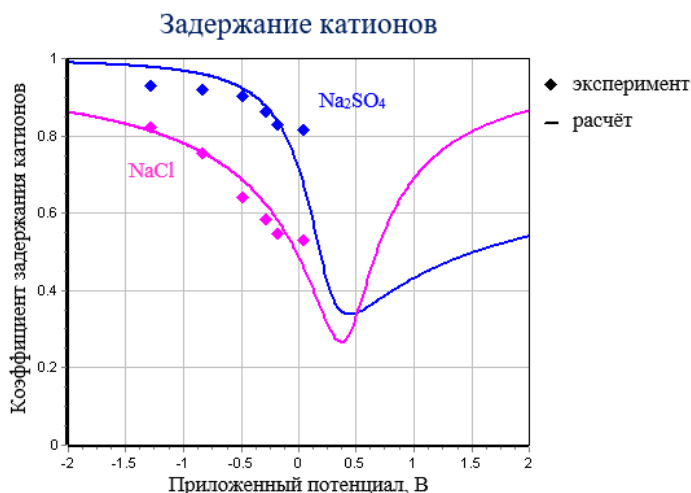


Рис. 1. Зависимость коэффициента задержания катионов от приложенного потенциала для растворов NaCl и Na₂SO₄.

Исследование «цветения» реки Енисей на территории Красноярска по данным ДЗЗ

Краснощеков Константин Вячеславович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В работе осуществляется поиск зон наибольшего цветения реки Енисей вдоль территории Красноярска с использованием совместной обработки спутниковой информации, полученной по данным Sentinel 2, и данным с беспилотного летательного аппарата (БПЛА) с установленной мультиспектральной камерой MicaSense RedEdge-MX.

Для оценки наличия вегетации на водной территории использовался нормализованный разностный индекс хлорофилла NDCI при расчёте которого используются значения яркости на красном и ближнем инфракрасном диапазоне. Длина волны данных каналов позволяет проникать на небольшую глубину водоёмов, на дне которых можно обнаружить подводную растительность [1].

С использованием спутниковой информации в работе рассматривались три летних периода с 2020 по 2022 года. Особенностью каждого года является разный уровень реки Енисей. В 2020 году уровень реки характеризуется как средний многолетний, в 2021 году был аномально высокий уровень воды, в то время как в 2022 году уровень реки был аномально низким.

Исследования при помощи БПЛА проводились только в летний период 2022 года. В виду ограничения времени полёта аппарата были выбраны три зоны исследования. Области с протоками и заводьями (о. Пионерский и протока Татышева) и участок реки Енисей в районе Успенского монастыря, который характеризуется как участок с равномерным течением. На рисунке 1 показана область «цветения» реки Енисей в местах с низкой проточностью воды на примере острова Пионерский. Чем выше значение параметра NDCI, тем более высокая фотосинтезирующая способность поверхности.



Рис. 1. Значения NDCI вокруг о. Пионерский за 9 августа 2022 года по данным мультиспектральной камеры MicaSense RedEdge-MX.

В результате совместной обработки данных спутникового зондирования и данных с БПЛА удалось выявить области цветения реки Енисей на территории Красноярска. Интенсивное цветение воды наблюдается в р. Енисей в черте г. Красноярска, где русло имеет сложную гидроморфологию, изобилует островами, протоками и заводьями. Наиболее высокие значения NDCI имели области вокруг острова Пионерский, вдоль Абаканской протоки и вдоль протоки Татышева.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантового конкурса экологических проектов Эн+.

Литература:

[1] Cillero Castro C. et al, An UAV and satellite multispectral data aProach to monitor water quality in small reservoirs. Remote Sensing, V. 12, № 9, P. 1514 (2020).

Однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ зависимости загрязнения атмосферного воздуха от метеоусловий

Лапо Татьяна Вячеславовна

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

По данным Минприроды России Красноярск является одним из нескольких городов России с самым грязным воздухом, концентрация вредных веществ в атмосфере города часто превышает допустимые нормы [1]. Для определения статистического значимого влияния метеоусловий на накопление в воздухе твердых взвешенных частиц PM 2.5 был проведен однофакторный и двухфакторный дисперсионный анализ. Данные для исследования за 2019–2022 гг. были получены с наземных станций мониторинга [2] и модели реанализа National Centers for Environmental Prediction Global Forecast System (NCEP GFS) [3].

Однофакторный дисперсионный анализ (one-way ANOVA) данных позволил установить статистически значимую взаимосвязь между концентрацией твердых взвешенных частиц PM 2.5 и следующими метеорологическими условиями: наличие и отсутствии инверсии – концентрация PM 2.5 при наличии инверсии температуры была значительно выше, чем при отсутствии инверсии и составляла в среднем 66 мкг/м³ и 21 мкг/м³ соответственно; сезоны года – концентрация PM 2.5 в зимний период принимала более высокие значения, чем в остальные сезоны года и составляла в среднем 57 мкг/м³; наличие или отсутствие штилевых ветровых условий – концентрация PM 2.5 при штилевых ветровых условиях была значительно выше, чем в отсутствие штиля и составляла в 54 мкг/м³ и 27 мкг/м³ соответственно; мощность инверсий – наиболее высокие концентрации твердых взвешенных частиц PM 2.5 наблюдаются во время мощных температурных инверсий и составляют 83 мкг/м³ и 86 мкг/м³ соответственно.

Множественные сравнения с использованием критерия Тьюкки позволили определить между какими группами имеются существенные отличия: в зимний сезон средние концентрации PM 2.5 значительно выше, чем в другие сезоны года. Также анализ показал существенные различия между группами с приземными и приподнятыми инверсии по сравнению с мощными инверсиями (наличие инверсии на нескольких слоях).

Двухфакторный дисперсионный анализ (two-way ANOVA) показал статистическую значимость влияния обоих факторов для случаев: температурная инверсия и сезонность – самые высокие показатели средней концентрации твердых взвешенных частиц PM 2.5 наблюдаются в зимний период при наличии температурной инверсии и составляют в среднем 83 мкг/м³, в то время как в зимний период при отсутствии инверсии – 42 мкг/м³; температурная инверсия и штилевые ветровые условия – самые высокие показатели средней концентрации твердых взвешенных частиц PM 2.5 наблюдаются при штилевых ветровых условиях и при наличии температурной инверсии и составляют в среднем 99 мкг/м³, в то время как в отсутствие штиля и при отсутствии инверсии – 41 мкг/м³.

Множественные сравнения с использованием критерия Тьюкки показали, что наиболее существенные отличия между группами наблюдаются, когда сочетаются два фактора: зимний сезон и наличие инверсии температуры.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент, Володько О.С.

Литература:

[1] Smith K. Principles of Applied climatology. London: The University of Strathclyde, 364 p. (1978).

[2] Геопортал – данные оперативного мониторинга: <http://sensor.krasn.ru/sc/>

[3] Модель реанализа – The Global Forecast System (GFS):

https://www.emc.ncep.noaa.gov/emc/pages/numericalforecast_systems/gfs.ph

Методы прогнозирования временных рядов в задаче анализа уровня концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе

г. Красноярск

Лев Никита Андреевич

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Красноярск является одним из нескольких городов России с самым грязным воздухом, концентрация вредных веществ в котором часто превышает допустимые нормы [1]. Возникает необходимость не только в мониторинге, но и в прогнозировании периодов повышенной концентрации вредных веществ в атмосфере города. Одним из способов прогнозирования является моделирование временных рядов.

Для прогнозирования были взяты данные наземных станций оперативного мониторинга [2] концентрации твёрдых взвешенных частиц PM 2.5 в атмосферном воздухе г. Красноярск за 2019-2022 гг.

В качестве модели прогнозирования временных рядов использовалась модель *ARIMA* [3]:

$$y_t = \beta + \sum_{i=1}^p a_i y_{t-i} + \sum_{j=1}^q \theta_j \varepsilon_{t-j} + \varepsilon_t,$$

где y_t — значение временного ряда в момент времени t ; ε_t — шумовая компонента в момент времени t ; p — количество предыдущих значений временного ряда, используемых в модели; q — количество запаздывающих ошибок прогноза; a_i , θ_j , β — параметры модели, которые необходимо оценить. Параметр d определяет порядок дифференцирования ряда (последовательное взятие d раз разностей первого порядка).

На основе выборки данных за зимний период 2019-2020 гг. была построена модель *ARIMA* с оптимальными гиперпараметрами $p=4$, $d=0$, $q=1$, подобранными при помощи поиска по сетке. Для определения качества модели на обучающих данных были построены сравнительные графики истинных и прогнозируемых значений среднесуточных концентраций PM 2.5 (Рис. 1), а также вычислены параметры качества модели: $MAE = 15,4$ и $R^2 = 0,82$. Полученные значения, говорят о хорошем качестве модели.

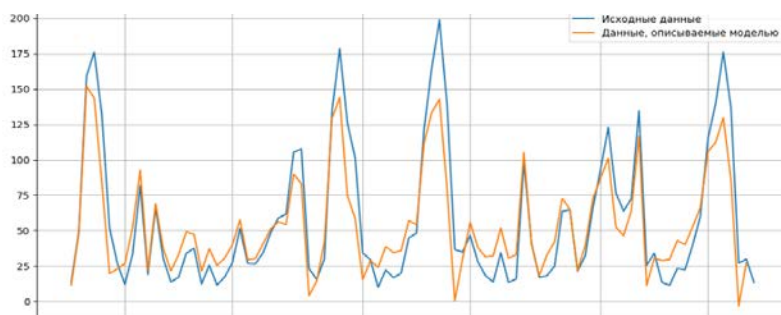


Рис. 16. Сравнение истинных и прогнозируемых значений среднесуточных концентраций PM 2.5 на обучающих данных. Голубой цвет соответствует исходным данным; оранжевый — данным, описываемыми моделью.

Используя данную модель, был построен прогноз на семь дней с 21.02.2020-27.02.2020. Значения $MAE = 7,13$, $R^2 = 0,83$, что говорит о целесообразности использования модели.

Литература:

- [1] Eremkin A. I., Kvashin I. M., Unkerov U. I., 2001 Regulation of emissions, pollutants into the atmosphere (Moscow: Assoc. of Constr. Univers.), 176 p.
- [2] Геопортал – данные оперативного мониторинга: <http://sensor.krasn.ru/sc/>
- [3] Towards Data Science – ARIMA: <https://towardsdatascience.com/time-series-forecasting-with-arima-sarima-and-sarimax-ee61099e78f6>

Система поиска сотрудников на основе геопространственной базы данных ELSAN

Малимонов Максим Игоревич
ФИЦ КНЦ СО РАН

Большие организации имеют сложную внутреннюю структуру подразделений и работающих сотрудников. Существуют различные системы для введения штатного расписания, но такие системы имеют данные, к которым не должно быть доступа. Также такие системы не предоставляют информации о местонахождении рабочих мест сотрудников. Бывают ситуации, что необходимо узнать номер сотрудника и его местонахождение, но в ряде случаев, это невозможно.

В ФИЦ КНЦ СО РАН работает примерно две тысячи пятьсот сотрудников по основному месту работы и нахождение необходимого Вам сотрудника превращается в проблему. В связи с этим появилась необходимость разработать систему, которая бы позволяла находить сотрудников, имея удобную фильтрацию и поиск по дереву подразделений, отображая контактные данные и местоположение. Для отображения местоположения сотрудников была выбрана геопространственная база ELSAN на основе геопортала ИВМ СО РАН [1, 2]. На рисунке 1 представлена схема взаимодействия систем друг с другом.



Рисунок 1 – Взаимодействие систем для обмена и обновления информации.

Система разрабатывается с использованием следующих инструментов: vue, node.js, element-plus, express.

Литература:

- [1] Матвеев А. Г., Якубайлик О.Э. Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнёва. 2 (42).48-54 (2012).
- [2] Якубайлик О.Э, Кадочников А.А., Матвеев А.Г., Пятаев А.С. Токарев А.В. Информационные системы для научных исследований (ims-2012). С. 143-148 (2012).

Математическое моделирование деформации блочной среды при импульсном нагружении

Мальшиева Жанна Олеговна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Многие природные материалы, в частности горные породы, имеют ярко выраженное структурно-неоднородное блочно-иерархическое строение [1]. Блочная структура проявляется на разных масштабных уровнях, от размеров кристаллических гранул до вложенных друг в друга блоков горного массива. Блоки объединены друг с другом прослойками породы с существенно более слабыми механическими свойствами. Одной из важнейших проблем угледобычи является прогноз внезапного обрушения кровли угольных шахт. Данному процессу предшествует снижение механического контакта между блоками: порода приобретает ослабленную микроструктуру. Такое состояние среды можно обнаружить, возбуждая в ней упругие волны малой амплитуды и регистрируя отклик на эти возмущения.

Существование маятниковых волн предсказывалось в [2] и экспериментально исследовалось в [3]. Для выяснения зависимости частоты возникающих колебаний маятниковой волны на основе численного моделирования в докладе используется метод Прони, который определяет линейную комбинацию экспоненциальных функций в исследуемом сигнале. С помощью метода Прони восстанавливается зависимость частоты маятниковых волн от характеристик среды по ее значениям в узлах равномерной сетки.

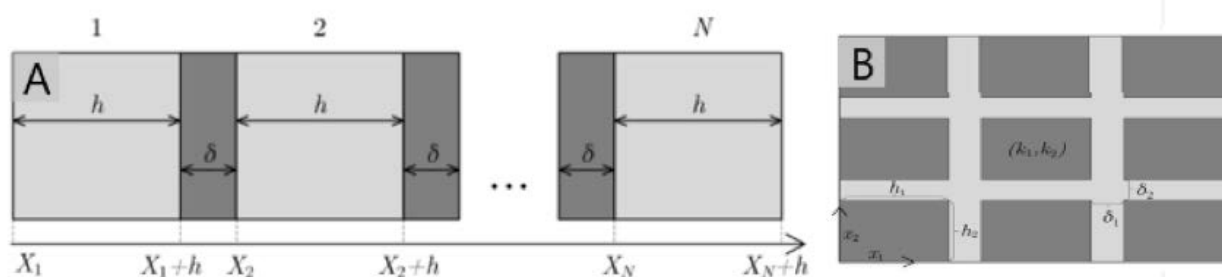


Рис. 1. А – Схема одномерной модели; В – Двумерная модель блочной среды.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912).

Литература:

- [1] Садовский М. А. Естественная кусковатость горной породы. ДАН СССР, Т. 247, №4, С. 829-831 (1979).
- [2] Курленя М. В., Опарин В. Н., Востриков В. И., ДАН СССР, 333(4) С. 3-13 (1993).
- [3] Александрова Н. И., Черников А. Г., Шер Е. Н., Физ.-техн. проблемы разработки полезных ископаемых, 3, 46-55 (2005).

Возможности применения тепловых космических снимков LANDSAT 8-9 COLLECTION 2 LEVEL 2 при анализе городской территории

Матушко Александра Константиновна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Результативность применения данных дистанционного зондирования часто напрямую зависит от количества доступных снимков. Практика применения космических снимков Landsat 8 показывает, что в бесснежный период на одну территорию приходится в течении одного календарного года 3-5 снимков с низким процентом облачности. Такие невысокие значения обусловлены частотой съемки один раз в шестнадцать суток. Запуск нового аппарата Landsat 9 позволит увеличить количество снимков в два раза, что действительно важно при анализе городской территории. Идентичность технических характеристик Landsat 8 и Landsat 9 позволяет применять ранее описанные методы в исследовании территории города Красноярск.

С марта 2021 года стали доступны новые наборы научных продуктов от производителей данных Landsat с названием COLLECTION 2 LEVEL 2. При создании новой коллекции данных были использованы вспомогательные сторонние источники, такие как цифровая модель рельефа, температура воздуха в момент съемки, атмосферные профили, влажность, мировые значения коэффициента излучения ASTER GED (Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer Global Emissivity Dataset). Применяя программный комплекс MODTRAN, данные Landsat Level 1 и описанные выше вспомогательные данные производителями были получены следующие слои: значения температуры поверхности, параметры атмосферы (спектральный коэффициент пропускания атмосферы, восходящее излучение и нисходящее излучение), слой описания качества данных [1].

В ходе исследования территории города Красноярск по новым наборам LANDSAT 8-9 COLLECTION 2 LEVEL 2 выявилось отсутствие данных. Производители обуславливают потери неполным мировым покрытием данными ASTER GED. Дополнительно изучив другие города Российской Федерации, похожая ситуация наблюдалась и на территории городов Москвы, Улан-Удэ, Иркутска. Автором работы было принято решение о необходимости восстановить значения температуры поверхности, повторив используемый алгоритм производителей Landsat 8-9, учитывая все вспомогательные сторонние источники и результаты работы MODTRAN.

Основной задачей было произвести расчет коэффициента излучения на исследуемую территорию. Учитывая опыт предыдущих работ, резко континентальный климат, смену трех сезонов в бесснежный период, было принято решение рассчитывать коэффициент излучения для каждой сцены отдельно, а не использовать эти значения единообразно, как это сделано в случае с ASTER GED. Для расчета коэффициента излучения был применен способ на основе вычисления нормализованного относительного индекса растительности [2].

Таким образом, произведя расчёт коэффициента излучения и повторив последовательность вычисления, были восстановлены потери данных для 40 сцен с 2013 до 2022 года. Следовательно тепловые космические снимки LANDSAT 8-9 COLLECTION 2 LEVEL 2 можно применять при анализе территории города Красноярск.

Литература:

- [1] Geological Survey U. S., Landsat 8-9 Calibration and Validation Algorithm Description Document Available online: <https://www.usgs.gov/media/files/landsat-8-9-calibration-validation-algorithm-description-document> (accessed on 1 April 2023)
- [2] Sobrino J. A., Jiménez-Muñoz J. C., Leonardo P., Remote Sensing of Environment, V.90, № 4, P. 434-440 (2004).

Анализ микробиоты больных рассеянным склерозом при помощи метода Шайдурова

Молявко Анна Андреевна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Микробиота — это совокупность микроорганизмов, обитающих непосредственно на человеке, тесно связанная с его здоровьем. Связь состава микробиоты и развития болезней широко изучалась ранее [1]. Одним из эффективных инструментов анализа здесь является секвенирование 16S рНК бактерий с последующей идентификацией их таксономического положения. Нашей целью было определить состав микробиоты трёх доноров биологического материала, имеющих подтверждённый диагноз «рассеянный склероз».

Генетический материал для данного исследования брался из открытого источника — базы RDP (*The Ribosomal Database Project*). Из базы было извлечено 21 195 генов 16S рНК бактерий с известной таксономией, которые затем использовались для идентификации участков V региона 16S рНК бактерий, полученных от доноров. Всего в нашем распоряжении было 512 таких участков, называемых OTU (*operational taxonomic unit*). Характерная длина OTU составляет ≈ 400 нуклеотидов, длина гена из базы ≈ 1500 нуклеотидов.

Таблица 1. Количество идентифицированных OTU.

Род бактерий	Kineothrix	Blautia, Bacteroides	Alistipes	Bifidobacterium, Mediterraneibacter, Roseburia, Faecalibacterium,	Coprococcus, Prevotella	Streptococcus, Murimonas, Intestinimonas, Hespellia и др.
Количество совпадений среди OTU	13	9	8	6	5	4

Каждый ген из базы сравнивался с каждым из 512 OTU с помощью метода Шайдурова [2]. По результатам поиска для 241 из 512 OTU было определено таксономическое положение с точностью свыше 95%. Результаты поиска представлены в таблице 1. Среди образцов были обнаружены в основном непатогенные микроорганизмы (среди прочих, представленные в таблице), и лишь небольшая часть патогенных, к примеру, из рода *Streptococcus* и некоторые виды *Clostridium*.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2023-912). Автор выражает благодарность соавторам работы: Кареповой Е. Д. и Садовскому М. Г.

Литература:

[1] B. Wang, M. Yao, L. Lv et al., *Engineering*, 3(1) P. 71-82 (2017).

[2] A. Molyavko, O. Mutovina, E. Karepova et al., *CEUR Workshop Proceedings*, P. 93-97 (2021).

Анализ метеорологических условий с использованием метода главных компонент

Полянчикова Дарья Витальевна

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Уровень загрязнения атмосферного воздуха в городе обусловлен многочисленными факторами – пространственной структурой и временной динамикой загрязняющих выбросов, особенностями метеорологических условий, которые на территории г. Красноярска также обладают значительной временной и пространственной изменчивостью. Для того чтобы выделить метеорологические факторы, которые являются наиболее существенными при формировании определенных метеоусловий был применён метод главных компонент (Principal Component Analysis, PCA) [1].

Данные метеоусловий были получены из модели реанализа National Centers for Environmental Prediction Global Forecast System (NCEP GFS) [2] за период с 2019 по 2022 год с промежутком в 6 часов. В составе этих данных – несколько десятков слоев с характеристиками атмосферы на различных вертикальных уровнях, которые вычисляются на регулярной сетке с пространственным разрешением 0.25° (~25 км) с периодичностью 4 раза в сутки.

Метод главных компонент нацелен на обнаружение направлений максимальной дисперсии в данных высокой размерности и проецирование их в новое подпространство с меньшим числом измерений. Для начала была выполнена стандартизация данных [3], так как исходные данные имеют разные масштабы. Затем была рассчитана ковариационная матрица, собственные векторы которой представляют собой главные компоненты (направления максимальной дисперсии), а соответствующие собственные значения определяют их величину. Собственные вектора располагаются в порядке убывания собственных значений и таким образом определяются первые главные компоненты, характеризующие направления максимальной дисперсии. Выяснилось, что первые 11 главных компонент объясняют 81% дисперсии, поэтому было решено выбрать это число в качестве размерности нового пространства признаков.

Так как, главная компонента представляет собой линейную комбинацию исходных признаков, взятых с определёнными весами, то расположив веса в порядке убывания, удалось определить метеорологические факторы, которые вносят наибольший вклад в главные компоненты. Для первой главной компоненты, содержащей 29 % общей дисперсии, параметрами, входящими с наибольшими весами, являются значения температуры на различных вертикальных уровнях. Для второй главной компоненты, содержащей 17 % общей дисперсии – восточные компоненты скорости ветра на различных вертикальных уровнях. Для третьей главной компоненты, содержащей 10 % общей дисперсии – западные компоненты скорости ветра на различных вертикальных уровнях.

Кроме того, полученные главные компоненты могут быть использованы для построения регрессии главных компонент с целью предсказания периодов, способствующих накоплению загрязняющих веществ в приземном слое атмосферного воздуха.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент, Володько О.С.

Литература:

[1] Jolliffe I. T. Principal Component Analysis, Series: Springer Series in Statistics. New York: Springer, 2002.

[2] Модель реанализа – The Global Forecast System (GFS): https://www.emc.ncep.noaa.gov/emc/pages/numerical_forecast_systems/gfs.php

[3] Рашка С., Python и машинное обучение: машинное и глубокое обучение с использованием Python scikit-learn и TensorFlow 2, 3-е изд. СПб.: ООО «Диалектика», 2020.

Методы проектирования сети беспроводных точек доступа для технологии интернета вещей

Сиротинин Анатолий Андреевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В настоящее время существует проблема оптимизации расположения точек доступа для выхода в интернет в целом, и для интернета вещей в частности [1]. Хаотичное расположение источников сигнала, отсутствие учёта материалов из которых построено сооружение, материалы внутренней отделки и особенности помещений способно существенно снизить мощность и качество передачи данных, что в свою очередь приводит к потере части данных, к серьезным задержкам при передаче определенных данных или вовсе к потере связи с конечными устройствами. В таком случае, становится невозможным стабильное отслеживание важных параметров от устройств интернета вещей, таких как датчики температуры, датчики задымленности, влажности, что в свою очередь не позволяет оперативно предпринимать действия по устранению нештатного изменения параметров.

В работе представлены основные проблемы при организации сети стандарта IEEE 802.11, в том числе, для технологии интернета вещей. Построение оптимальной модели сети рассматривается на примере здания научного института. Проведена оценка распространения радиосигнала с построением тепловой карты института и последующим анализом проблемных зон. Предлагается использовать модели для оптимизации расположения беспроводных точек доступа с учётом особенностей коэффициентов затухания материалов, количества точек доступа или ретрансляторов и мест их расположения [2, 3]. Уровень сигнала в задачах оптимизации будет рассчитываться по дополненной модели Мотли-Кинана, которая учитывает затухание сигнала в стенах и перекрытиях этажей [4]:

$$RSS(d) = RSS(d_0) + 10a \log \log \left(\frac{d}{d_0} \right) + \sum_{r=1}^L l_r \omega_r + FAF,$$

где $RSS(d)$ – мощность сигнала (RSS – Received Signal Strength) (дБм), определяемая устройством на расстоянии d от точки доступа, $RSS(d_0)$ – мощность сигнала (дБм), измеренная на расстоянии d_0 от точки доступа равная 1 м, a – коэффициент, учитывающий потери сигнала в окружающей среде, L – количество стен, l_r – количество стен с коэффициентом затухания ω_r , FAF – затухания в перекрытиях этажей.

Научный руководитель – к.т.н., доцент, Исаев С.В.

Литература:

- [1] Арефьев А. В., Афанасьева О. В., Вешев Н. А. и др., Известия Тульского государственного университета. Технические науки, Т. 10, С. 261-267 (2022).
- [2] Wang W., Capitaneanu S.L., Marinca D., Lohan E.S. C, IEEE Access, V.7, P. 91627-91640 (2019).
- [3] Ку Д. Т., Фам М. Т., Во Т. Х. Екб: НИЦ «Л-Журнал», С. 78-83 (2020).
- [4] Zhang Y., Wang F., Shen Y., Huo W. Communications in Computer and Information Science, V. 243, Part I, P. 458-465 (2011).

Поведение ошибки нахождения максимального собственного значения симметричной неотрицательно определенной матрицы в зависимости от параметра в стационарном ортогонально-степенном методе
 Стрекаловский Илья Алексеевич
 Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

В работе рассматривается задача нахождения максимального собственного значения симметричной неотрицательно определенной матрицы. В [1] построено однопараметрическое семейство одношаговых нелинейных итерационных процессов, включающее в себя степенной метод, и предложена двухшаговая процедура ускорения сходимости итераций этих процессов, в основе которой лежит ортогонализация степенных последовательностей. Ортогонально-степенной метод [1] имеет следующий вид:

1. Пусть $a^{(0)}$ – начальное приближение: $\|a^{(0)}\| = 1, \langle a^{(0)}, a_m \rangle \neq 0$. Здесь a_m – собственный вектор, соответствующий максимальному собственному значению, m – размерность матрицы, через $\|\cdot\|$ обозначена евклидова норма вектора.
2. $\lambda_m^{(0)} = \mu_n \frac{\langle Aa^{(0)}, Aa^{(0)} \rangle}{\langle Aa^{(0)}, a^{(0)} \rangle} + (1 - \mu_n) \langle Aa^{(0)}, a^{(0)} \rangle, b^{(0)} = \lambda_m^{(0)} a^{(0)} - Aa^{(0)}, c^{(1)} = b^{(0)}$
3. Итерационный процесс для $n = 1, \dots$:
 - 3.1. $v^{(n)} = \frac{\langle c^{(n)}, a^{(n-1)} \rangle}{\|c^{(n)}\|^2}; a^{(n)} = \frac{a^{(n-1)} - v^{(n)} c^{(n)}}{\|a^{(n-1)} - v^{(n)} c^{(n)}\|};$
 - 3.2. $\lambda_m^{(n)} = \mu_n \frac{\langle Aa^{(n)}, Aa^{(n)} \rangle}{\langle Aa^{(n)}, a^{(n)} \rangle} + (1 - \mu_n) \langle Aa^{(n)}, a^{(n)} \rangle;$
 - 3.3. $b^{(n)} = \lambda_m^{(n)} a^{(n)} - Aa^{(n)}; c^{(n+1)} = b^{(n)} - \frac{\langle b^{(n)}, c^{(n)} \rangle}{\|c^{(n)}\|^2} c^{(n)}.$

Итерационный процесс можно остановить либо по достижению заранее заданного числа итераций, либо по достижению заданной точности нормы вектора $\|b^{(n)}\|$. В [1] доказано, что итерационный процесс сходится для $\mu_n \in \left(0, \frac{2\lambda_m}{\lambda_m - \lambda_1}\right)$.

В настоящей работе проведено исследование влияния априорно задаваемого параметра $\mu_n \equiv \mu$ итерационного процесса на ошибку нахождения максимального собственного значения. На рис. 1 представлены результаты расчетов для матрицы, возникающей при разностной аппроксимации на равномерной сетке размерности $m = 1000$ задачи Дирехле для одномерного уравнения реакции-диффузии с постоянным коэффициентом k при реакции. Результаты расчетов показывают, что итерационный процесс при $\mu > 1$ более устойчив к ошибкам округления, и минимум ошибки достигается при $\mu = 2$.

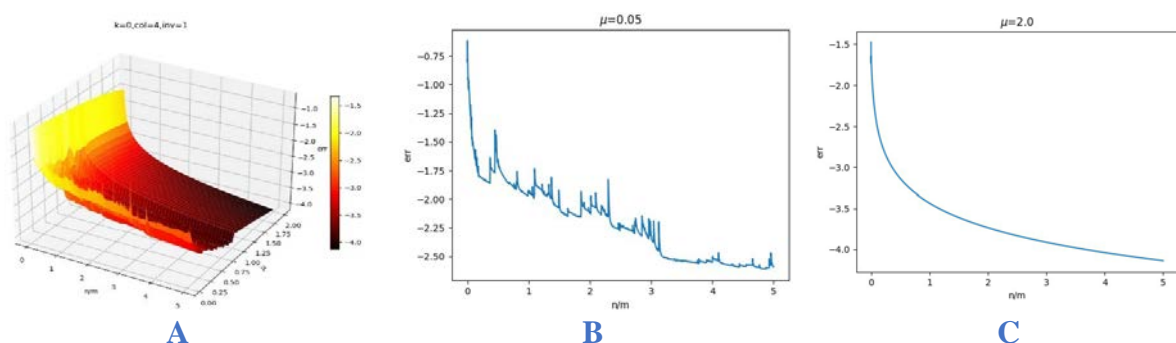


Рис. 17. Зависимость ошибки метода от μ – параметра μ и отношения n/m ; В – отношения n/m при $\mu = 0, 05$; С – В – отношения n/m при $\mu = 2$. Здесь n – номер итерации, $m=1000$.

Литература:

- [1] Киреев И. В., Выч. мет. программирование, 17(1), 44–54 (2016).

Вычислительная методика обработки и анализа изображений медицинского эксперимента с использованием шиарлет-преобразования

Хомколов Игорь Владимирович

Институт космических и информационных технологий СФУ

Постановка задачи возникла из запроса на создание программно-алгоритмического комплекса, способного визуализировать биологические структуры на снимках во время проведения хирургической операции, поскольку в случае массивного кровотечения они могут быть не видны хирургу, что повышает риски для дальнейшего операционного вмешательства. В рамках разрабатываемой Системы предлагаемая вычислительная методика обработки изображений проводилась в несколько этапов: предварительная обработка, выделение областей интереса, цветовое кодирование. Для предварительной обработки в рамках методики использовались следующие алгоритмы контрастирования: гамма-коррекция, алгоритм *Balance Contrast Enhancement Technique (BCET)*, алгоритм *Histogram Equalization (hist_EQ)*, различные варианты алгоритма *Retinex*. В качестве базового алгоритма для обработки исходного изображения предлагается алгоритм, основанный на шиарлет-преобразовании – *Fast finite shearlet transform (FFST)*. Его эффективность для решения задач выделения объектов интересов на медицинских изображениях подтверждена исследованиями в [1]. Для анализа сегментированного изображения использованы алгоритмы цветового кодирования, которые визуализируют объекты медицинского интереса. Тестирование методики проходило в несколько этапов (экспериментов) с использованием пакета *MATLAB* и языка программирования *Python*.

В рамках медицинских экспериментов методика была протестирована с использованием классических алгоритмов сегментации. На данном этапе выбран алгоритм бинаризации по порогу (метод Оцу) и далее использован оператор Кэнни. Затем методика была опробована с использованием алгоритма *FFST* для решения диагностической задачи по выделению глубоких тканей. В итоге решена задача по адаптации алгоритма и методики для определения конкретной глубины, на которую погружены ткани. Результаты расчетов на основе экспериментальных данных приведены на рисунке 1.

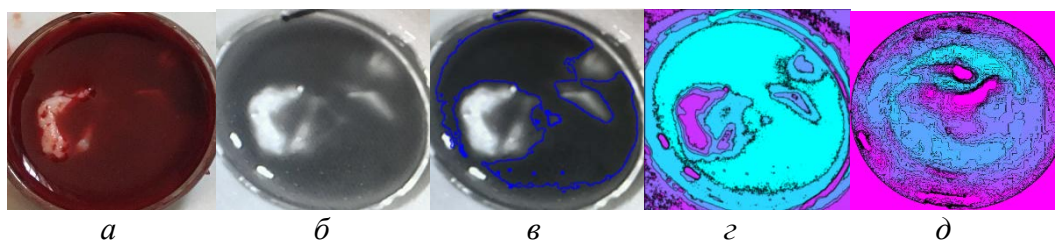


Рис. 1. а – исходное изображение, полученное в ходе медицинского эксперимента; б – результаты предварительной обработки исходного изображения; в – результаты, полученные при помощи классических алгоритмов сегментации и построения контура; г, д – результаты выделения искомым объектов интереса, полученные при помощи алгоритма *FFST*.

Работа выполнена по договору № 18259 ГУ/2022 в рамках Программы УМНИК-2023. Автор выражает благодарность соавторам работы и участникам исследований: Медиевскому А.В., КрасГМУ; Круглякову А.С., ИВМ СО РАН; Чижовой И.Г., СФУ.

Литература:

[1] Zotin A., Simonov K., Kapsargin F., Cherepanova T., Kruglyakov A. Ser.: Intelligent Systems Reference Library. V. 175, chapt. 9, P. 265-294. Cham. Springer (2021).

Секция «Школы РАН»

Восстановительное каталитическое фракционирование отходов агропромышленности

Бери Д.А., Продайвода М.В.

МАОУ “Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева” при ФИЦ КНЦ СО РАН

В наши дни остро стоит проблема истощения не возобновляемых ресурсов планеты, в связи с чем повышается важность поиска альтернативного сырья. Таковым может стать лигниноцеллюлозная биомасса, компоненты которой могут заменить многие ресурсы [1]. В работе рассматриваются биомасса шелухи гречихи и лузги подсолнечника. Оба эти продукта получили широкое применение в пищевой и хозяйственной промышленности, являются одними из самых востребованных культур [2].

Был проведен процесс восстановительного каталитического фракционирования (ВКФ) в присутствии катализатора $10\text{Ni}_3\text{RuS}_{450}$ для двух биомасс. С целью установления количественного состава проводился кислотный гидролиз. Отмечается, что при добавлении катализатора в процессе ВКФ повышается выход целлюлозного продукта, а также степень делигнификации. (рис.1).

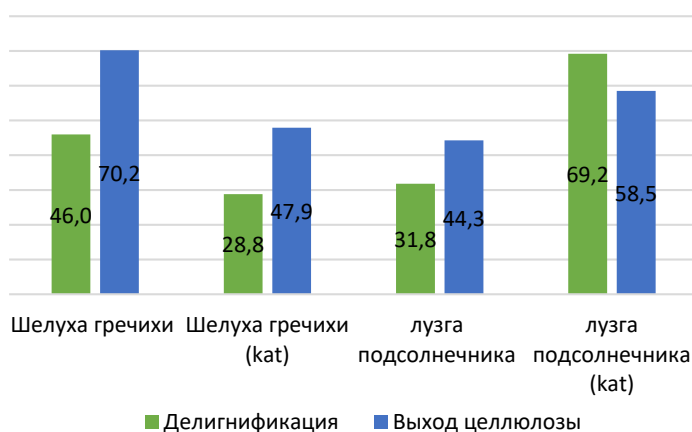


Рис.1 Степень делигнификации и выход целлюлозы после процесса ВКФ, %мас.

При анализе методом ГХ-МС жидкого продукта лузги гречихи преобладающими мономерами являются пропанолзамещенные метоксифенолы с суммарным выходом до 5.4 мас%. В лузге подсолнечника основными являются пропилзамещенные метоксифенолы с суммарным выходом до 2.7 мас.%. Эти вещества могут использоваться в качестве компонентов моторных топлив, лекарственных препаратов.

Авторы выражают благодарность руководителю Мирошниковой А.В. и сотрудникам института химии и химической технологии СО РАН за предоставленные материалы и помощь в проведении анализа.

Литература:

- [1] Pardeep Kumar Sadh, Surekha Duhan, Joginder Singh Duhan, *Bioresources and Bioprocessing*, 5, 1 (2018).
[2] Odeta Pocienė, Rasa Šlinkšienė, *Agriculture*, 12(2), 193 (2022).

Комплексная оценка загрязнения снегового покрова урбанизированной территории г.Красноярска

Богряцова З.Э.¹, Качанова И.В.¹, Лоренц А.Е.¹, Мельникова А.А.²

¹МАОУ Гимназия № 13, ²Сибирский федеральный университет.

Постоянное возрастание антропогенной нагрузки на окружающую среду, в том числе в виде увеличивающихся объемов и номенклатуры загрязняющих веществ, обуславливает повышение требований, предъявляемых к методам и средствам контроля качества природной среды. Биотесты могут быть рекомендованы для непрерывного экспресс-контроля состояния окружающей среды промышленных районов и природно-хозяйственных комплексов. Снеготалая вода может содержать большое количество загрязняющих веществ, попавших в снег вследствие атмосферных осадков. Таким образом, при таянии загрязненного снежного покрова почва и водоёмы подвергаются риску попадания в них токсичных веществ. Поэтому **целью работы** являлось проведение комплексной оценки загрязнения снегового покрова урбанизированной территории г.Красноярска.

Материалы и методы исследования. Передвижной лабораторией были проведены отборы проб снеготалой воды в 5 районах города Красноярска: в мкрн. Ветлужанка, Солнечный, Черёмушки, Покровка и р-н Свердловский. Пробы были отобраны в момент введения в городе режима “Черного неба”, а также через 7 дней после. Проведены биологические анализы проб снеготалой воды: классическая биоиндикация с использованием семян кресс-салата и гороха, биолюминесцентное тестирование проб с использованием иммобилизованного реагента “Энзимолум”. Организацией КГБУ “ЦРМПиООС” были предоставлены химические анализы проб: рН, массовые концентрации Хлорид-ионов, Нитрит-ионов, Сульфат-ионов, Нитрат-ионов, Фторид-ионов, Фосфат-ионов, массовая концентрация нефтепродуктов, массовая концентрация фенолов (общих и летучих), общая жесткость, концентрация металлов (валовая и подвижная формы).

Результаты. В результате проведения классических биоиндикационных методов была рассчитана всхожесть прорастания семян кресс-салата и гороха. По результатам анализа всхожести можно сделать вывод о том, что пробы снеготалой воды во всех районах города Красноярска как во время введения режима “Черного неба”, так и через 7 дней, показали среднюю загрязненность проб. Самыми загрязненными районами оказались районы Черемушки и Свердловский. Самый чистый район - Ветлужанка. Данные результаты относительно одинаковы как для биоиндикации с использованием кресс-салата, так и гороха.

Биолюминесцентный анализ проб проводился с измерением остаточной интенсивности свечения. Результаты анализа показали динамику изменения экологического состояния снегового покрова во время режима “чёрного неба” и после, так как загрязняющие вещества накапливались в снеговом покрове и делали пробы гораздо загрязненными. Аналогично с классическими биологическими анализами, наиболее загрязненными районами оказались Свердловский и Черемушки. Самый чистый район - Покровка.

Сравнение биологических анализов с химическими показало аналогичные биолюминесцентному анализу результаты. Большинство химических веществ (например, металлы, нефтепродукты, фосфаты, жесткость) накапливались с длительностью режима “Черного неба”

Заключение. Результаты, полученные в данной работе, свидетельствуют о том, что необходим постоянный качественный мониторинг атмосферного воздуха города Красноярска, а также устранение или ограничение опасных источников выбросов.

Выражаем благодарность нашему куратору Мельниковой Анастасии Андреевне, инженеру кафедры биофизики ИФБиТ СФУ и научному руководителю, к.б.н., в.н.с. НИИ МПС Смольниковой Марине Викторовне.

Изменение углеводного состава меда в процессе термообработки

Бударина Татьяна, Михасова Кира

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Основной составляющей меда являются углеводы. Два моносахарида: глюкоза (27–36%) и фруктоза (33–42%) – содержатся в меде в наибольшем количестве. Из сложных сахаров в меде больше всего содержится сахарозы, причем ее концентрация постепенно снижается в продукте. Сахароза в процессе гидролиза превращается в моносахариды: глюкозу и фруктозу из которых образуется 5-гидроксиметилфурфурол (5-ГМФ). Согласно литературным данным при нагревании до 40 градусов в течение 12 часов уже образуется 5-ГМФ, а при нагревании выше 60, его количество стремительно растёт [1].

Целью данной работы являлось проследить динамику изменения углеводного состава меда при различных температурах. Трансформация углеводов в меде происходит за счет кислот, которые присутствуют в нем, поэтому вначале была определена общая кислотность меда. В результате установлено, что общая кислотность цветочного меда составляет 3,6 см³, что не превышает норму по ГОСТ Р19792-2001 (табл.1). Для гречишного меда показатель завышен, что может свидетельствовать, о том, что либо в меде происходили процессы брожения, либо были применены кислоты для лечения пчел.

Таблица 1. Общая кислотность образцов меда, полученная методом титрования.

Сорт	Общая кислотность см ³	Норма ГОСТ Р19792-2001, см ³
Цветочный	3,6	Не более 4,0 см ³
Гречишный мед	4,8	

Углеводный состав меда, определенный методом ВЭЖХ, показал, что мед по содержанию углеводов соответствует нормам ГОСТ Р 54644-2011. Установлено, что при температуре 4⁰С (такая температура была выбрана, так как она соответствует температуре бытового холодильника, при которой происходит хранение меда) оба сорта меда сохраняют свой состав за 9 недель эксперимента. При комнатной температуре наблюдается уменьшение сахарозы с 0,6 до 0,1 % масс. за 9 недель эксперимента. Видимо это связано с тем, что за счет того что в меде присутствуют кислоты произошел гидролиз или расщепление сахарозы произошло за счет фермента инвертазы. Общее содержание сахаридов в цветочном меде уменьшилось на 3 % за 9 недель, а в гречишном почти на 6% масс. Возможно это связано с тем, что моносахариды трансформируются в 5-ГМФ. Нагревание меда до 60⁰С приводит к тому, что в цветочном меде через 40 мин эксперимента сахароза не обнаружено. Видимо это связано с тем, что произошел гидролиз сахарозы. Суммарное уменьшение сахаров в цветочном меде составило 3 % масс, а в гречишном - 5,5 % масс. за 60 минут эксперимента (рис.1).

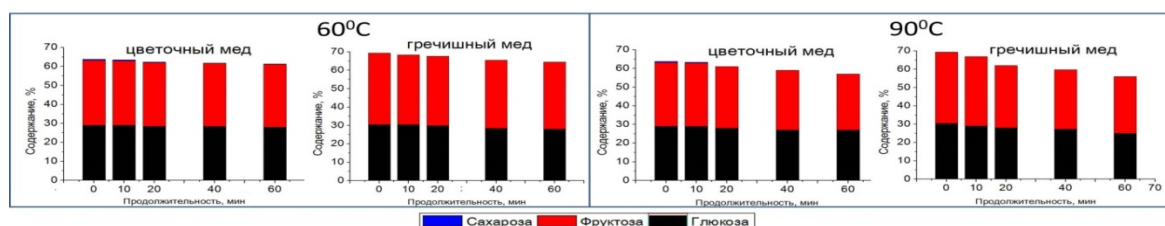


Рис. 1. Динамика изменения углеводного состава меда при нагревании.

Повышение температуры до 90⁰С приводит к более интенсивному процессу трансформации сахаров. В цветочном суммарное количество уменьшилось на 7% масс, а в гречишном – 13% масс (рис.1). В результате стоит отметить, что процессы трансформации углеводов в гречишном меде протекают быстрее. Возможно, это связано с тем, что общая кислотность данного меда выше.

Литература:

[1] Поляков В.Ю. Вестник Приамурского государственного университета им. Шолом-Алейхема. №3 (16) (2014).

Разработка микрофлюидного пассивного перемешивателя для систем «орган-на-чипе»

Бухаров А.А.¹, Глазырин В.Ю.¹, Гусева У.В.¹, Ключанцев А.О.¹,
Лукьяненко К.А.^{2,3}

¹МАОУ Гимназия № 13, ²Сибирский федеральный университет,
³ФИЦ КНЦ СО РАН

При разработке микрофлюидных устройств типа «орган-на-чипе», которые способны *in vitro* моделировать функции органов человека и патофизиологии заболеваний, а также более точно предсказывать безопасность и эффективность исследуемых препаратов у людей, актуальной является проблема предварительного перемешивания веществ, поступающих в камеру с адгезионными клетками или тканями. **Целью работы** являлась разработка микрофлюидного пассивного перемешивателя для систем «орган-на-чипе».

Материалы и методы исследования. Дизайн каналов чипа был спроектирован в программе Компас-3D. Чипы были изготовлены из полиметилметакрилата Novattro методом фрезерования на фрезерном станке Modela MDX-50. Герметизацию чипов проводили с помощью склеивания растворителем 1,2-Дихлорэтаном. В качестве контрастной жидкости для визуализации потока использовали краситель метилвиолет. Фотографии каналов делали с помощью цифровой камеры микроскопа Axio Scope A1. Жидкость в каналы поступала с помощью шприцевых насосов SPLab01.

Результаты. Был разработан и изготовлен микрофлюидный чип с дизайном каналов в виде змеевидного перемешивателя с прямоугольным поворотом каналов. Было изготовлено 2 типа каналов с различным аспектным отношением (а.о.): 1:1 и 1:5. И показано что при квадратном сечении канала (а.о. 1:1) эффективность перемешивания была выше, чем при прямоугольном сечении канала (а.о. 1:5). На чипе с квадратным сечением каналов было проведено исследование различных скоростей потоков (рис. 1). В результате было показано, что эффективное перемешивание достигается при скоростях потока более 1 мл/мин.

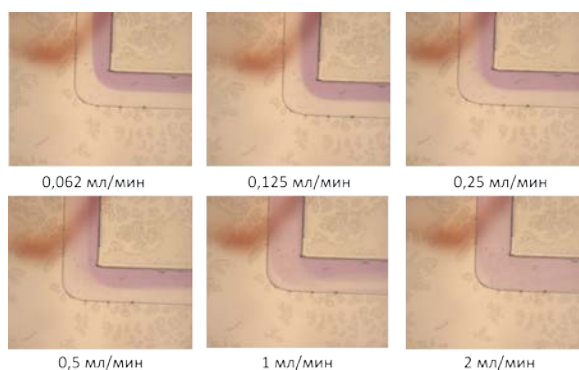


Рисунок 1 – Пассивное перемешивание на последнем повороте змеевидного смесителя при различных скоростях потока в микрофлюидном чипе перемешивателе с квадратным сечением канала размером 0,5 мм.

Заключение. При разработке пассивных перемешивателей предпочтительно использование квадратного сечения каналов. Кроме того, применение пассивного перемешивания, основанного на вихрях Дина, в змеевидном канале не является эффективным при работе с клетками в камере чипа, поскольку для него требуются скорость потока свыше 1 мл/мин. А также тратится избыточное количество реактивов.

Выражаем благодарность нашему куратору н.с. ФИЦ КНЦ СО РАН Лукьяненко Кириллу Андреевичу и научному руководителю, к.б.н., в.н.с. НИИ МПС Смольниковой Марине Викторовне.

Разработка твердых катализаторов на основе цитрусовых отходов для процессов переработки компонентов растительной биомассы в ценные химические продукты; этерификация левулиновой кислоты

***Баркентин Алёна Владимировна, Утимишева Екатерина Сергеевна
МАОУ Лицей № 7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева***

Применение гетерогенных каталитических систем в процессах переработки компонентов растительной биомассы, ввиду их высокой экологичности, привлекает всё больше внимания [1]. Сырьем для получения твердых катализаторов могут послужить отходы деревообрабатывающей и пищевой промышленности. Кожура апельсина является примером пищевого отхода, который образуется в объеме 32 млн. тонн. в год [2].

Этиллевулинат – этиловый эфир левулиновой кислоты, является ценным химическим соединением, платформенной молекулой, топливной присадкой, а также находит своё применение в парфюмерной промышленности [3].

Цель данной работы заключается в создании нового твердого кислотного катализатора на основе цитрусовых отходов для получения ценных химических продуктов, топливных присадок таких как этиллевулинат.

В качестве сырья для производства катализатора была освоена кожура апельсина. Приготовление катализатора включало в себя следующие этапы: измельчение и сушка, карбонизация при 800°C 2 часа и окисление мокрым воздухом при 400 °C.

Получение этиллевулината из левулиновой кислоты проводили в автоклаве Autoclave Engineers, в среде этанола, при 150 °C в течении 120 мин. Анализ продуктов осуществлялся при помощи высокоэффективной жидкостной хроматографии на приборе Милихром А-02.

В результате каталитических испытаний получен выход этиллевулината 25 мол. %.

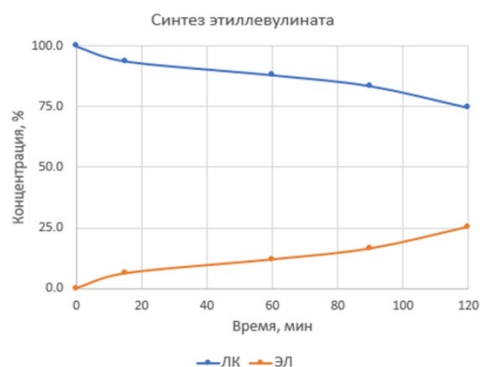


Рис. 18. Кинетика образования этиллевулината из левулиновой кислоты.

Из полученных экспериментальных данных видно, что увеличение времени реакции способно увеличить выход целевого продукта.

Авторы выражают благодарность научному наставнику - м.н.с. Лаборатории каталитических превращений возобновляемых ресурсов ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Venderbosch, R.H., A Critical View n Catalytic Pyrolysis of Biomass. ChemSusChem,. V.8. № 8, PP. 1306-1316 (2018).
- [2] Michael-Igolima, U., et al., Materials, V. 16, № 3, PP. 1092 (2023).
- [3] Alonso, D.M., S.G. Wettstein, and J.A. Dumesic, Green Chemistry,. V. 15, № 3, PP. 584-595 (2013).

Инверсионно-вольтамперометрическое определение металлов в винах

Головков Е.Р., Смирнов Д.В.

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева
ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

На данный момент производится огромное количество вин. Не всегда выпускаемая продукция является качественной. Поэтому ее контроль является актуальным. Одним из показателей, который отвечает за качество вина, является содержание тяжелых металлов [1]. Метод инверсионной вольтамперометрии довольно часто используется для определения тяжелых металлов в алкогольной продукции [2], поскольку он экспрессный и не требует дорогостоящего оборудования.

Цель работы: разработать методику инверсионно-вольтамперометрического определения железа, марганца и меди в винах.

В работе использовали способность металлов накапливаться на поверхности графитового электрода в виде малорастворимых соединений (рис. 1). Оптимизированные условия проведения эксперимента: $E_3 = -1.2$ В, $t_{\text{нак}} = 120$ сек, $pH = 4.5$, фоновый электролит 0.1 М $(NH_4)_2SO_4$ в H_2SO_4 . На основе модельных 10% водно-спиртовых растворов построили градуировочные графики и определили содержание железа, марганца и меди в 4 образцах вин (таблица 1).

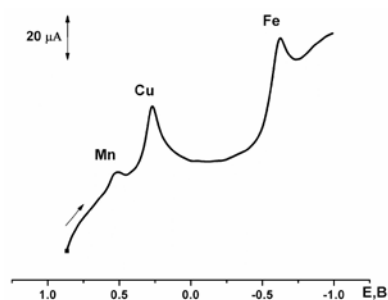


Рис. 1. Вольтамперограмма модельного водно-спиртового раствора (Γ , $E_3 = -1.2$ В, $t_{\text{нак}} = 120$ сек, $pH = 4.5$, 0.1 М $(NH_4)_2SO_4$ в H_2SO_4 , отн. Pt)

Таблица 1. Содержание железа, марганца и меди в 4 образцах вин (Γ , $E_3 = -1.2$ В, $t_{\text{нак}} = 120$ сек, $pH = 4.5$, 0.1 М $(NH_4)_2SO_4$ в H_2SO_4)

№	Образец	Содержание металлов мг/л		
		Mn	Cu	Fe
1	Монтепулчано Дабруццо	0,4	0,9	3,5
2	Терра петра	0,3	3,5	0,3
3	Глинтвайн	0	5,2	0
4	Погреб винодела	0,4	2,5	0,5

Показано, что в пробах 2 и 3 концентрация меди превышает значения, допустимые в ГОСТ. Содержание железа во всех пробах удовлетворяет требованиям ГОСТ, однако в пробе 3 его не обнаружено, а в пробах 2 и 4 содержится очень малое количество, что может свидетельствовать о том, что продукция некачественная. Количество марганца во всех пробах не превышает гостированные значения.

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

Литература:

- [1] ГОСТ Р 51823 – 2001. М.: Госстандарт России, 11 с (2001).
[2] Morais V. S., Silva L. R. G., Boasquevisque L. M., et al., Ionics. V. 28, PP. 5547–5559 (2022).

Комплексная переработка цитрусовых отходов с получением ценных химических продуктов

Гриценко Варвара Анатольевна, Добров Александр Филиппович

МАОУ Лицей № 7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

В основе актуальности данной работы лежит проблема использования в качестве основного ресурса для производства ценных химических соединений ископаемого сырья, что негативно сказывается на экологии и приводит к его постепенному истощению [1]. Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ) является возобновляемым сырьем. – это растительное сухое вещество, самый доступный ресурс на Земле для производства биотоплива, в основном этанола. Она состоит из целлюлозы, гемицеллюлозы и лигнина. Примером лигноцеллюлозного сырья является кожура апельсина, которая образуется ежегодно в объеме 32 млн. тонн. [2].

Примером комплексного метода переработки лигноцеллюлозной биомассы является восстановительное каталитическое фракционирование (ВКФ). Процессы ВКФ ориентированы на каталитическую деполимеризацию нативного лигнина ЛЦБ в водно-органическом растворителе, при одновременном сохранении основной части целлюлозы и гемицеллюлоз [3].

Целью данной работы являлась разработка твердого катализатора восстановительного фракционирования кожуры апельсина. В качестве сырья для производства одного из основных компонентов катализатора – носителя, была выбрана кожура апельсина. Кожуру апельсина измельчили, высушили, карбонизовали, а полученный уголь окислили и затем нанесли на него никель, используя хлорид никеля в качестве прекурсора.

Полученный катализатор был испытан в процессе восстановительного фракционирования кожуры апельсина в среде этанола, при 250 °С, в течении 3 ч.

Установлено, что конверсия кожуры - переход твердого исходного вещества в жидкость и газы составила 87 %, что говорит о высокой эффективности катализатора.

Жидкие продукты были качественно идентифицированы методом газовой хроматографии. В результате процесса было получено множество продуктов, среди которых Лимонен 12.3 %, этиловые эфиры карбоновых кислот 30 %, а также различные производные фуранова и другие продукты 31 %.

Авторы выражают благодарность научному наставнику - м.н.с. Лаборатории каталитических превращений возобновляемых ресурсов ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Demirbas, A., B., Energy conversion and management, V. 50 № 9, PP. 2239-2249 (2009).
- [2] Michael-Igolima, U., et al., Modified Orange Peel Waste as a Sustainable Material for Adsorption of Contaminants. Materials, V. 16 № 3, PP. 1092 (2023).
- [3] Renders, T., et al., Green Chemistry, V. 20 № 20, PP. 4607-4619 (2018).

Твердые Ni-катализаторы на основе цитрусовых отходов; получение γ -валеролактона из леулиновой кислоты

Дружинина Виктория Васильевна

МАОУ Лицей № 7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

γ -Валеролактон (ГВЛ) – перспективный субстрат для производства различных химических продуктов с высокой добавленной стоимостью, биополимеров, биотоплива и «зеленого» растворителя. ГВЛ также находит свое применение в пищевой и фармацевтической промышленности и может использоваться в качестве топливной добавки. Как целлюлоза, так и гемицеллюлозы могут использоваться в качестве сырья для производства ГВЛ, что делает экономическую составляющую процесса более привлекательной. [1].

Сырьем для получения твердых катализаторов могут послужить отходы деревообрабатывающей и пищевой промышленностей. Кожура апельсина является примером пищевого отхода, который образуется в объеме 32 млн. тонн. в год [2].

Целью данной работы являлась разработка твердого катализатора гидрирования леулиновой кислоты до γ -валеролактона. В качестве сырья для производства катализатора была использована кожура апельсина. Субстрат измельчили, высушили, карбонизовали, а полученный уголь окислили и затем нанесли на него никель, используя хлорид никеля в качестве прекурсора. Анализ продуктов осуществлялся при помощи высокоэффективной жидкостной хроматографии на приборе Милихром А-02.

В результате каталитических испытаний удалось получить выход γ -валеролактона 41 мол. %.

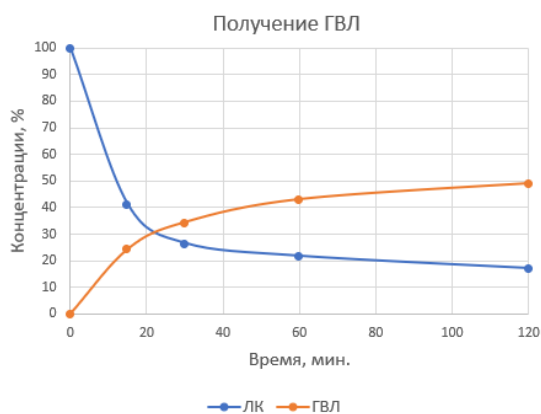


Рис. 19. Кинетика образования γ -Валеролактона из леулиновой кислоты.

Из полученных данных видно, что увеличение времени реакции способно увеличить выход целевого продукта.

Автор выражает благодарность научному наставнику - м.н.с. Лаборатории каталитических превращений возобновляемых ресурсов ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Alonso, D.M., S.G. Wettstein, and J.A. Dumesic,. Green Chemistry,. V. 15, № 3, PP. 584-595 (2013).
- [2] Michael-Igolima, U., et al., Materials, V. 16, № 3, PP. 1092 (2023).

Нахождение распределения наночастиц золота по размеру

Жвания Арсений Имедавич

МБОУ СОШ № 10 с углубленным изучением отдельных предметов им. академика Ю. А. Овчинникова

Наночастицы металлов, в том числе золота, считаются учёными уникальными, что связано с их перспективами применения в медицине и биологии для лечения и диагностики опухолей и других заболеваний, направленной доставки лекарств, для создания сенсоров. Явлением, благодаря которому наночастицы металлов используются для создания оптических сенсоров, является поверхностный (локализованный) плазмонный резонанс [1].

Целью работы было нахождение распределения частиц золота по размеру. Для исследования были использованы ПЭМ-изображения наночастиц золота, полученных цитратным методом (метод Туркевича) [2] и модифицированным связывающим агентом ВРЕ (1,2-Bis(4-pyridil)ethilene) [3], всего было проанализировано около 200 наночастиц золота. Наибольшее количество из проанализированных наночастиц золота имеют площадь проекции в полуинтервале (196;291], а наименьшее – в (671;766] nm^2 . Вторую и третью позицию занимают частицы площадью, до $\sim 100 \text{ nm}^2$ больше нижней границы первого полуинтервала и на $\sim 100 \text{ nm}^2$ меньше, соответственно. Количество наночастиц по радиусу, высчитанному по формуле радиуса круга, составляют наибольшее количество в полуинтервале (8;9], наименьшее – (14;16] нм. Примерно равное количество наночастиц находится в полуинтервале (10;11] нм (по радиусу). Средний радиус наночастиц составляет $10,07 \pm 1,76$ нм, что видно на рисунке 1.

Была замечена тенденция, что наночастицы распределились по размерам больше меньшего, но меньше большего (то есть средний) по своему количеству в приведённых ранее интервалов, это на практике подтверждает закон нормального распределения.

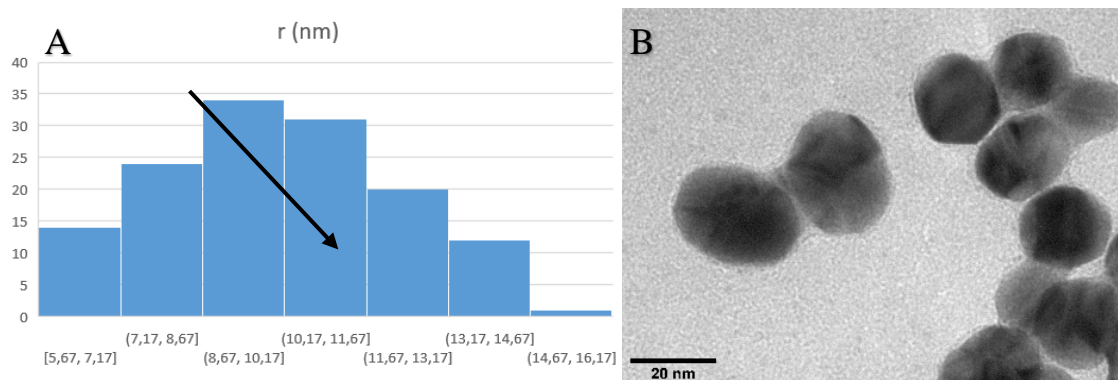


Рис. 1. А – Гистограмма распределения Au-наночастиц по радиусу; В – типичное ПЭМ-изображение наночастиц золота.

Литература:

- [1] Сотников Д. В., Жердев А. В., Дзантиев Б. Б. Детекция межмолекулярных взаимодействий, основанная на регистрации поверхностного плазмонного резонанса //Успехи биологической химии. – 2015. – Т. 55. – С. 391-420.
- [2] Щербаков А. Б., Иванов В. К. Практикум по наноматериалам и нанотехнологиям //М.: Издательство Московского Университета. – 2019.
- [3] Jin Q. et al. In situ construction of polymer-encapsulated Au nanoparticle dimers based on a C–C coupling reaction //RSC advances. – 2017. – Т. 7. – №. 42. – С. 26153-26160.

Комплексная экстракционная переработка коры пихты, поврежденной стволовыми патогенами, в вещества с добавленной стоимостью

Захарченко Анна Васильевна

МАОУ Лицей № 7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

В последнее время происходит акклиматизация полиграфа уссурийского (*Poligraphus Proximus Blandford*), распространение которого на территории Сибири отмечено в период 2014-2015 гг [1,2]. Основной пищей в ходе жизнедеятельности полиграфа уссурийского является кора хвойных растений, в частности широко распространенной пихты Сибирской (*Abies Sibirica*), которая является лесобразующей породой на территории Красноярского края. Поврежденные деревья не используются на производствах лесозаготовительного и лесоперерабатывающего комплексов, хотя они нуждаются в должной утилизации, поскольку представляют пожарную опасность. Одним из наиболее выгодных способов утилизации является химическая переработка, поскольку кора - это многокомпонентное сырье, содержащее в себе много полезных, химически ценных веществ.

Целью исследования является разработка методов экстракционной переработки коры пихты, поврежденной стволовыми патогенами, в вещества с добавленной стоимостью; получение наибольшего выхода экстрактивных веществ, а также сорбентов.

Методикой выделения экстрактивных веществ из коры пихты была ступенчатая экстракция, которая состояла из трех этапов: удаление смолистых веществ, выделение дубильных веществ и выделение пектинов.

Выходы веществ составили: смолистые вещества – 9,9 мас.%, дубильные вещества - 16,8 мас.%. Состав смолистых веществ в основном представлен α - и β -пиненом, борнилацетатом и бета-ситостерином. Исследование ИК-спектров дубильных веществ показало наличие полос поглощения, относящихся к нескольким группам полифенольных веществ. Оптимизированный максимальный выход пектинов при экстракции из исходной коры достигается при pH 1,5 и продолжительности 60 минут и достигает 8,13%, а при экстракции из пораженной коры при pH 1,8 и продолжительности 30 минут - 8,44%.

После проведения экстракции пектинов твердый остаток подвергли механической активации в стационарной установке взрывного автогидролиза и использовали в качестве сырья для получения сорбента. Полученные данные показали, что максимальная эффективность сорбции, близкая к 100%, достигается при поглощении навеской коры пихты от 0,1 г раствора метиленового синего объемом 25 мл с концентрацией 0,00625 г/л. При увеличении объема раствора до 50 мл эффективность сорбции незначительно снижается до 99,5 %, что соответствует характеристикам коммерческих сорбентов.

Исследование поддержано Красноярским краевым фондом науки, проект «Комплексная экстракционная переработка коры пихты, поврежденной стволовыми патогенами, в вещества с добавленной стоимостью» № 2022112209126.

Автор выражает благодарность научному руководителю - с.н.с., к.х.н. Маляру Ю.Н., а также м.н.с. Ионину Владиславу Александровичу.

Литература:

- [1] Керчев, И.А., Российский журнал биологических инвазий, 7(2), 80–95 (2014).
- [2] Кривец, С.А., и др., Российский журнал биологических инвазий, 8(1), 41–63 (2015).

Влияние способа приготовления моркови на содержание каротина

Капкан Софья, Муравьева Анастасия

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Провитамином витамина А является β -каротин, который проявляет выраженные антиоксидантные свойства. β – каротин способствует укреплению сетчатки глаза, укрепляет иммунитет, повышает способность организма противостоять инфекционным заболеваниям [1].

Морковь является классическим источником каротина во многих странах. α - и β -каротин являются главными изомерами морковных каротиноидов.

Морковь употребляется в пищу как в сыром виде, так и в вареном, тушеном, жареном. При этом происходит изменение в составе каротиноидов.

Целью данной работы является изучение содержания каротина в морковных продуктах в зависимости от разных условий температурной обработки.

Определение содержания каротина в моркови проводили спектрофотометрически по методике [2]. В результате установлено, что содержание каротина в сырой моркови составляет от 127 до 142 мг/кг, при этом во флоэме каротина в среднем содержится больше (154 мг/кг), чем в ксилеме (86 мг/кг).

Далее были смоделированы температурные условия, которые наиболее часто используются в процессе приготовления пищи. Эксперименты проводились в сушильном шкафу. Температура 100⁰С – соответствовала температуре, при которой варят морковь, температура 200⁰С – имитировала условия запекания.

В результате установлено, что при температуре 100⁰С происходит уменьшение содержания каротина за 20 минут до 94 % масс, а через час остается 54 % масс от исходного содержания (рис. 1 А). Повышение температуры до 200⁰С приводит к тому, что содержание каротина снижается до 7% масс за 20 минут эксперимента (рис 1 Б). Отсюда следует, что температурная обработка моркови пагубно влияет на содержание каротина.

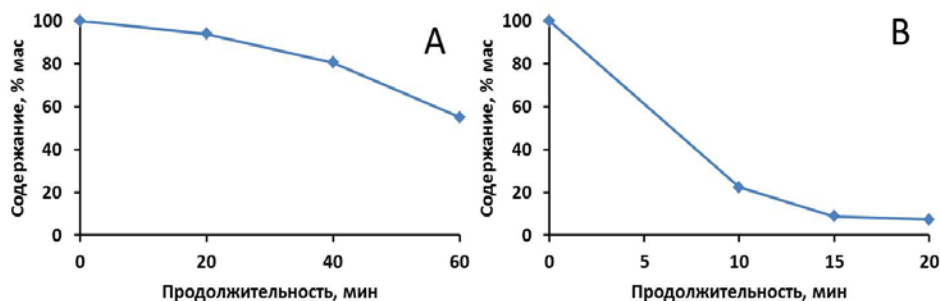


Рис. 20. Изменение содержания каротина в моркови в зависимости от температурной обработки: А – 100⁰С; В – 200⁰С.

Известно, что хранение оказывает влияние на содержание основных компонентов. Установлено, что хранение моркови в морозильной камере при температуре -18⁰С не приводит к изменению содержания каротина в течении 3 недель.

Далее механическим способом был получен морковный сок. В результате установлено, что в жидкую часть перешло до 18 % каротина (38 мг/л). В твердой части осталось 82 % каротина от исходного содержания каротина в моркови. Для сравнения был проанализирован коммерческий образец морковно-содержащего сока. Установлено, что содержание каротина не превышает 4 мг/л.

Литература

[1] Мокеева Е. Г., Нотов О. С., Скальный А. В., Вестник Российской военномедицинской академии, 4, 117-119 (2008).

[2] ГОСТ 8756.22-80 Продукты переработки плодов и овощей. Метод определения каротина. Москва. Стандартинформ. 2010.

Азопроизводные этаноллигнина сосны в качестве потенциальных добавок в солнцезащитные средства для кожи

Карамалла Ной Мохамедович

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Растительная биомасса является многообещающим возобновляемым сырьём. Однако один из её компонентов, а именно лигнин, в настоящее время используется недостаточно и часто является отходом. Согласно концепции «*Lignin first*», переработку растительной биомассы необходимо начинать с превращения лигнина в востребованные продукты [1]. Лигнин обладает антиоксидантной, противоопухолевой и противомикробной активностью, что открывает перспективы для биомедицинских применений. В том числе, лигнин рассматривается как перспективный компонент солнцезащитных средств, однако его азопроизводные к сегодняшнему дню не были изучены в данном аспекте.

Нами получены новые азопроизводные этаноллигнина сосны. Для модификации применялись диазониевые соли п-нитроанилина ($\text{ЭЛ}^{\text{COC}}+\text{NO}_2$) и сульфанильной кислоты ($\text{ЭЛ}^{\text{COC}}+\text{SO}_3\text{H}$). Синтез проводили по методике [2] с модификациями. Исходный этаноллигнин не растворим в воде, но растворим в органических растворителях. $\text{ЭЛ}^{\text{COC}}+\text{NO}_2$ хотя и имеет гидрофильные нитрогруппы, но в воде не растворим. Присоединение азобензола с сульфокислотной группой ($\text{ЭЛ}^{\text{COC}}+\text{SO}_3\text{H}$) улучшает растворимость в водной среде, которая составляет ~ 1 г/л. Полученные материалы были изучены методом электронной спектроскопии диффузного отражения (Рис. 1). Меньшее снижение отражения во всей видимой области и более высокое отражение в ультрафиолетовой области имеет $\text{ЭЛ}^{\text{COC}}+\text{SO}_3\text{H}$. Этот образец является наиболее привлекательной модификацией для применения в качестве компонентов солнцезащитных средств. Разработка новых солнцезащитных средств на основе азопроизводных этаноллигнина и оценка их эффективности является перспективным направлением.

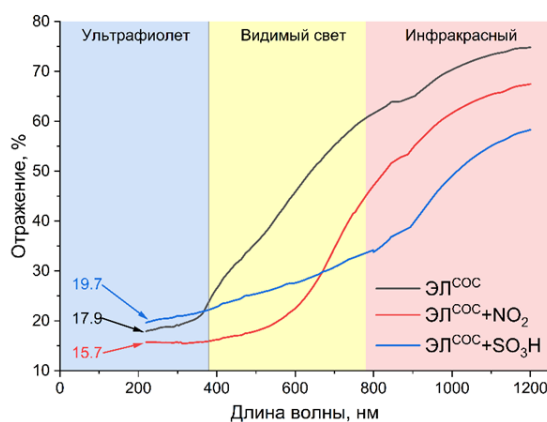


Рис. 1. Электронные спектры диффузного отражения исходного этаноллигнина сосны и модифицированных азосочетанием образцов.

Автор выражает благодарность руководителю работы: Голубкову В.А.

Литература:

[1] Tarabanko, V.E. Catalysts. V.11(10). PP. 1254 (2021).

[2] Borovkova V.S., Malyar Yu.N., Vasilieva N.Yu., Skripnikov A.M., Ionin V.A., Sychev V.V., Golubkov V.A., Taran O.P. Materials. V.16(4). PP. 1525 (2023).

Взаимосвязь личностных особенностей подростков с использованием электронных устройств для курения

Клейн М.А.¹, Давыдова Н.Д.¹, Ермакова Л.С.¹, Шашкина Е.В.¹, Носков Е.А.¹, Копылова К.В.²

¹Гимназия №13 «Академ», ²НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН

Электронные сигареты (ЭС) - устройства, нагревательный элемент которых превращает в аэрозоль жидкость, содержащую никотин и ароматические добавки. В выделяемых парах часто присутствуют токсичные соединения. Научные исследования позволяют говорить об ассоциации свойств личности с фактом употребления психоактивных веществ. Установлено, что курящие юноши более агрессивны, чем некурящие респонденты. А курящие девушки имеют низкую самооценку [Кобзев Е. А., Кузьминов Н. Н., 2018]. В связи с этим, целью данной работы было изучение личностных особенностей подростков в зависимости от использования ЭС. Общее количество опрошенных юношей и девушек, обучающихся в школах всех районов г. Красноярск, составило 112 человек в возрасте 11–19 лет, из них 53,6% некурящих, 46,4% курящих. Среди опрошенных 69,1% подростков хотя бы раз пробовали курить, 47,3% пользуются ЭС на постоянной основе. Для оценки личностных особенностей использовался опросник ТИPI (Ten-Item Personality Inventory), характеризующий выраженность черт модели личности «Большая пятерка» (экстраверсия, дружелюбие, добросовестность, эмоциональная стабильность, открытость опыту).

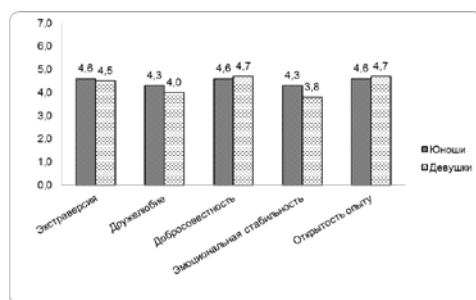


Рисунок – Выраженность черт личности «Большой пятерки» у курящих девушек и юношей г. Красноярск.

По результатам работы выявлено наличие взаимосвязи между постоянным курением ЭС и преобладанием определенных личностных черт: по сравнению с некурящими у курящих юношей наблюдается большая выраженность черты личности “открытость опыту” по сравнению с некурящими, а курящие девушки имеют менее выраженные черты личности “Большой пятерки”. По сравнению с курящими девушками юноши более эмоционально стабильны и дружелюбны (рисунок). Однако статистически достоверных значений при данном сравнении получено не было.

Для профилактики развития зависимого поведения, к которому относится табакокурение, в том числе с использованием ЭС, необходимо тщательно изучать психологические особенности детей и подростков, которые могут косвенно способствовать развитию аддикций. Кроме этого, совершенствование законодательства в вопросе оборота ЭС позволит ограничить воздействие токсичных веществ устройств на окружающих, снизит риск отравлений и пагубных последствий для здоровья в первую очередь для несовершеннолетнего населения.

Выражаем благодарность нашему куратору – м.н.с. группы молекулярно-генетических исследований НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Копыловой Ксении Васильевне и научному руководителю – к.б.н., в.н.с. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Смольниковой Марине Викторовне.

Зависимость набора мышечной массы от питания и физической нагрузки у подростков 14-15 лет

Коваленок М.¹, Дик Д.¹, Абдрахимова Р.¹, Булдакова Л.¹, Стативо Б.¹, Римацкая Н.В.²

¹МАОУ Гимназия № 13, ²ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет»

По мнению социологов, среди россиян последние годы идет трансформация общественных ценностей, во многом за счет смены поколений. Исследование показало, что для современной российской молодежи здоровый образ жизни и спорт очень важны. По данным всероссийского центра исследований общественного мнения (ВЦИОМ) за два года показатель тех, кто занимается спортом, вырос с 61процента до 76 процентов. Для подростков важно понимать, что для безопасного и здорового развития организма, необходимо сбалансировать систему питания и тренировки. В возрасте 14-15 лет не устойчивая гормональная система у подростков, и возможно неправильно выбран вид тренировки или нагрузка, не правильное питание, стрессовые ситуации, что, в свою очередь может негативно повлиять на набор мышечной массы. Поэтому **целью работы** разработать рекомендации для увеличения мышечной массы подростков женского и мужского пола 14-16 лет.

Материалы и методы исследования. В эксперименте участвовало 29 человек в возрасте 14-16 лет. Группа девушек 15 человек, из которых 60% занимаются волейболом 4 раза в неделю, и 40% не занимаются спортом. Группа мальчиков 14 человек, из которых 70% занимаются плаванием 5 раз в неделю, а 30 % не занимаются спортом. Провели измерения следующих показателей у каждого из экспериментальной группы: вес, мышечная, костная и жировая масса, замеры – руки, грудь, талия, бедро, пульсометр, давление, рост, возраст, пол. Измерения всех показателей проводили каждую неделю в течение 4 недели. Рассчитали суточную норму КБЖУ (количество ккал, белков. Жиров, углеводов) для каждого участника экспериментальных групп, разработали рекомендации. Провели статистический анализ. Разработали рекомендации для подростков 14-15 лет.

Результаты. Были сформированы группы девочек занимающихся волейболом, и мальчиков занимающихся плаванием, также сформирована контрольная группа. В течение 4-х недель анализировали (1 раз в неделю) указанные показатели. Сформирована база данных. Для всех участников были сформулированы рекомендации по питанию для наращивания мышечной массы для каждого участника. Рассчитаны суточные КБЖУ. В результате соблюдения питания и регулярных тренировок волейболом в группе девочек набор мышечной массы в 8 раз больше, чем у контрольной группы. Также проводили замеры объемов мышц и по итогам 4 недель исследования было рассчитано, что в группе девочек пловцов в 1,5 раза прирост в объеме мышц, чем в контрольной. В группе мальчиков пловцов набор мышечной массы в 5 раз больше, и в 11 раз прирост в объеме мышц, чем у контрольной группы.

В результате исследования были разработаны рекомендации – алгоритм для наращивания мышечной массы у подростков:

1. Необходимо рассчитывать КБЖУ и соблюдать питание, фиксируя всю еду в программе (например, Fat Secret);
2. Еженедельно поводить измерения показателей: вес, мышечная, костная и жировая масса, замеры – руки, грудь, талия, бедро, пульсометр, давление, ИМТ, рост;
3. Регулярно минимум 3 раза в неделю заниматься спортом;
4. Ходить 10000 шагов в день

Заключение. Результаты, полученные в данной работе, свидетельствуют о том, что для гармоничного развития и поддержания здоровья молодого организма необходимо уделить большее внимания питанию, регулярным занятиям спортом.

Выражаем благодарность нашему куратору н.с. лаборатории биоломинесцентных биотехнологий СФУ Римацкой Надежда Валерьевне и научному руководителю, к.б.н., в.н.с. НИИ МПС Смольниковой Марине Викторовне.

Изучение влияния механической обработки древесины на её химические свойства методом ИК-спектроскопии

Куц Сергей Алексеевич, Новоселов Степан Максимович

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Основная проблема большинства видов древесин – это маленькая степень сопротивляемости негативным средам: от влажности и воды они разбухают и гниют, от солнца и жары выцветают, высыхают и трескаются. А вот композитные материалы на основе древесины тем и отличается, что оно значительно более стойкое к таким воздействиям. Среди композиционных материалов из древесины в настоящее время важнейшее место занимает производство фанеры, древесностружечных, древесно-слоистых и древесноволокнистых плит. В последние годы разработаны технологии производства огнестойких фанеры и древесностружечных плит, при производстве которых используются различные типы антипиренов. Освоено производство древесноволокнистых плит средней плотности (западноевропейский аналог MDF), характеристики которых близки к характеристикам цельной древесины.

Целью исследования является установить влияние механической и химической обработки на строение древесины методами ИК-спектроскопии

Регистрация ИК-спектров всех образцов производилась на ИК-Фурье спектрометре Simex FT-801 в области от 4000 – 600 см⁻¹ при 26 сканах. Была использована приставка НВПО/ЗДО с разрешением 2 см⁻¹ с кристаллом ZnSe (угол падения 45°).

Функциональная группа	Длина волны, см ⁻¹
3460–3300	Сильная водородная связь (О-Н)
3400-2800	Симметрические и ассиметричные колебания С-Н в СН группе лигнина
1055–1045	С-О связи в целлюлозе и гемицеллюлозе
1035–1028	С-Н связи в целлюлозе и колебания НОН

Как видно из представленных спектров не удалось зафиксировать различий функциональных групп в спектрах механо-химически обработанной древесины в сравнении с исходным шпоном из чего можно сделать вывод, что примененные манипуляции никак не повлияли на структуру древесины.

Литература:

- [1] Pandey K. K., Pitman A. J., International Biodeterioration & Biodegradation, 52, 151–160 (2003).
- [2] Чавчавадзе Е. С. Древесина хвойных. Л. : Наука, 1979. 190 с.

Получение наночастиц из органосольVENTных лигнинов.

Изучение их свойств

Лебедева Софья Денисовна

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Направление по утилизации и переработке отходов лигноцеллюлозной биомассы в востребованные ресурсы, с каждым годом, все больше набирают обороты. Одним из таких отходов является лигнин. Лигнин — это биополимер, ароматическая макромолекула строение которой зависит от типа растения. Одним из способов утилизации лигнина является получение из него наночастиц. Наночастицы из-за ряда уникальных свойств можно использовать в разных областях промышленности.

Целью данной работы являлось показать возможность сокращения продолжительности процесса получения наночастиц лигнина. А также сравнение наночастиц, полученных из лигнинов хвойной и лиственной древесины.

Лигнин растворяли в этаноле в соотношении 1гр/1литр. Затем каждый раствор фильтровали через шприцевой фильтр и вводили в диализный мешок, который затем погружали в избыток дистиллированной воды процесс протекал при перемешивании 1000 об/мин с помощью магнитной мешалки. После чего растворитель удаляли с помощью роторного испарителя, чтобы избавиться от остатков этанола и затем снова добавляли воду в образцы [1].

По результатам динамического рассеяния света показано, что для этаноллигнина сосны наименьшим размером (190 нм) обладают частицы, полученные при продолжительности процесса 1 ч. Дзета-потенциал, имеет значение -30 (Рис. 1).

Результаты по размеру наночастиц сопоставимы с результатами, полученными ранее при диализе этаноллигнина кедра в течение 24 ч, где размер частиц составлял 185 нм. Однако при более продолжительном процессе значение зета-потенциала несколько выше (-42.8) (Рис. 2).

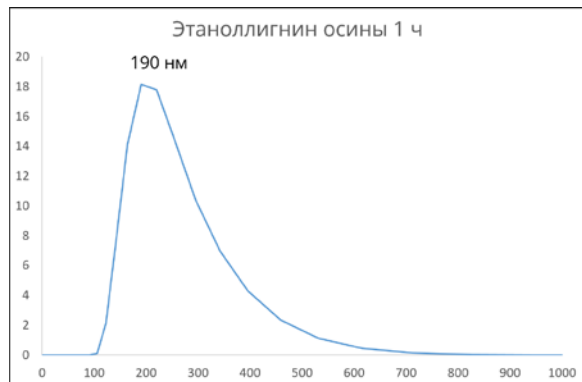


Рис. 1. Результаты по динамическому светорассеянию (наночастицы этаноллигнина осины).

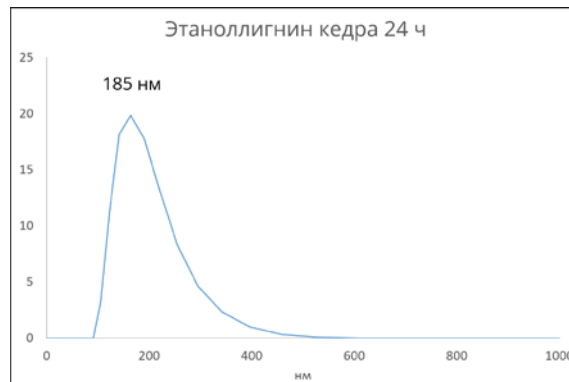


Рис. 2. Результаты по динамическому светорассеянию (наночастицы этаноллигнина кедра).

Выражаю свою благодарность за ценные рекомендации в ходе работы руководителю Мирошниковой А.В. Также сотрудникам института химии и химической технологии СО РАН за предоставленные материалы и помощь в проведении анализа.

Литература:

[1] Maldonado-Carmona N, Marchand G, Villandier N, Ouk T-S, Pereira MM, Calvete MJF, Calliste CA, Žak A, Piksa M, Pawlik KJ, Matczyszyn K and Leroy-Lhez S., Front. Microbiol. 11, 606185 (2020).

Исследование антиоксидантной активности гемицеллюлоз хвои, коры и древесины ели

*Лучковская Виктория Николаевна, Катцына Варвара Андреевна
МАОУ Лицей № 7 имени героя Советского союза Б.К. Чернышева*

Одним из перспективных направлений в мировой промышленности является расширение возможностей применения гетерополисахаридов клеточной стенки растений – гемицеллюлоз (ГЦ), которые являются остаточным продуктом во многих целлюлозно-бумажных производствах. ГЦ характеризуются комплексом ценных свойств, важнейшими из которых являются высокая биологическая активность, экологичность и нетоксичность, что делает ГЦ перспективным сырьем в фармацевтической области [1, 2].

В данной работе были исследованы антиоксидантные свойства ГЦ, выделенные из древесины, хвои и коры ели обыкновенной (*Picea abies*).

Результаты исследования антиоксидантной активности (АОА) показали, что способность нейтрализоватьДФПГ радикалы максимально достигает 60.74 % в случае использования в качестве антиоксиданта ГЦ коры ели при значении концентрации ГЦ - 5 мг/мл.

Методом гель-проникающей хроматографии установлена зависимость молекулярно-массовых характеристик от АОА: полисахариды с более низкими значениями молекулярных масс проявляют более высокие значения АОА (Рис 1). Образцы ГЦ из коры имеют наименьшую средневесовую молекулярную массу - 4225 г/моль, а ГЦ из хвои – 5700 г/моль и древесины – 10347 г/моль.

Метод газовой хроматографии установил, что доминирующими моносахаридами в ГЦ ели являются глюкоза и манноза (до 0.579 и 2.034 г/л, соответственно). Наибольшие эти значения наблюдались именно в ГЦ коры, исходя из чего можно сделать вывод, что данные моносахариды положительно влияют на АОА.

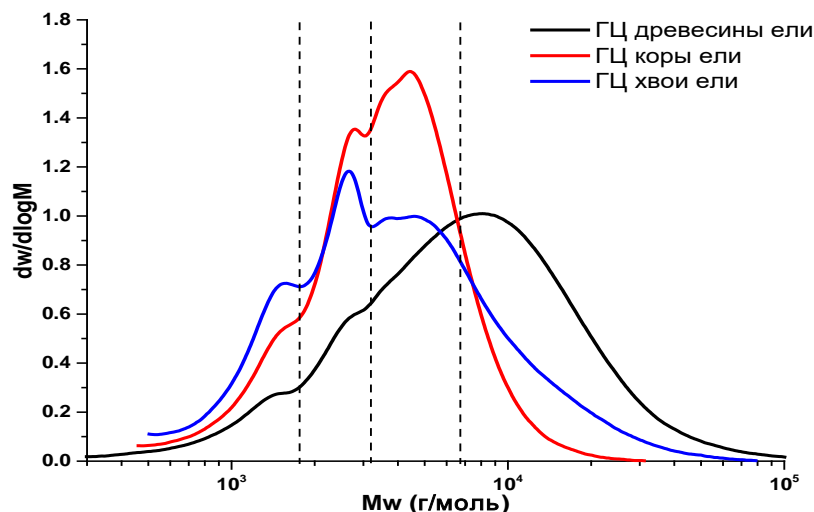


Рис. 1. кривые молекулярно-массового распределения ГЦ древесины, хвои и коры ели.

Авторы выражают благодарность научному руководителю Боровковой В.С., а также сотрудникам ИХХТ СО РАН.

Литература:

- [1] W. Xu, A. Pranovich, P. Uppstu, X. Wang, D. Kronlund, J. Hemming, H. Öblom, N. Moritz, M. Preis, N. Sandler, S. Willför, C. Xu. Carbohydr. Polym. (2018).
- [2] Chudina A.I., Malyar Y.N., Sudakova I.G. et al. Biomass Conv. Bioref. (2021).

Содержание тяжелых металлов в лакокрасочных покрытиях

Максимова Ольга Тимофеевна

МАОУ Лицей №7 им. героя Советского союза Б.К. Чернышева

Производители красок исторически используют тяжелые металлы (например, свинец), соли на их основе, в качестве технологических добавок для лакокрасочных покрытий (ЛКП) для повышения адгезии ЛКП к основаниям, поверхностям, улучшения защитных свойств, что способствует долговечности ЛКП, а также влияет на визуальные характеристики. В то же время, тяжелые металлы в ЛКП представляют опасность для здоровья работников предприятий и пользователей данных покрытий, что вызывает озабоченность в области общественно здравоохранения [1].

Цель данной работы – оценка содержания тяжелых металлов в ряде ЛКП методом энергодисперсионного анализа.

В данной работе использовались лаки и краски, заявленные производителем, как безопасные для применения в детском творчестве. Исследуемый образец краски или лака наносили на предметное стекло, сушили при 105 °С в сушильном шкафу, соскребали с предметного стекла, спрессовали в таблетки и с помощью электронного микроскопа ТМ4000 (Hitachi, Япония, 2019) снимали микрофотографии (Рис. 1).

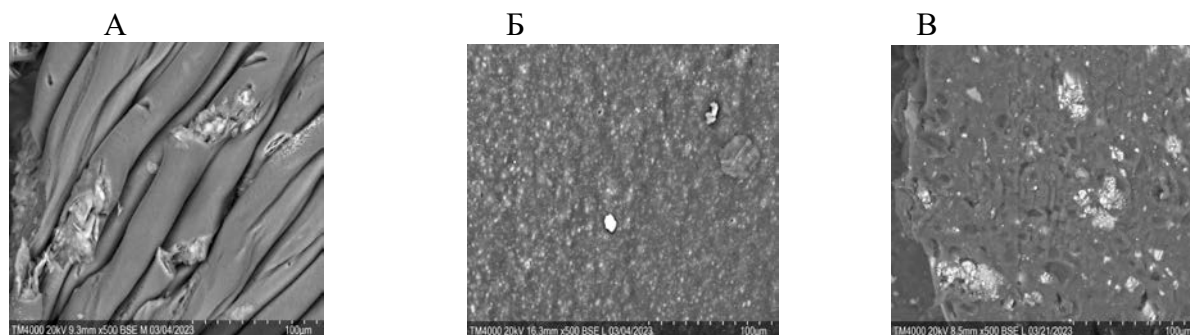


Рис. 21. Микрофотографии частиц А – акриловой краски; Б – лака; В – антиплесневого покрытия.

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

Элемент	Акриловая краска	Лак	Антиплесневое покрытие
Углерод	72,9	78,0	38,7
Кислород	17,9	16,6	16,7
Кальций	0,5	0,1	39,4
Хром	-	4,1	-
Железо		0,1	2,2
Хлор	7,2	0,1	1,0
Натрий	1,3	0,1	-

Методом энергодисперсионного анализа (результаты приведены в Табл.1) выявлено, что наибольшим содержанием катализаторов отверждения, представленных солями железа, кальция, магния и пр. характерно для образца лака, однако, в этом же образце наблюдается повышенное содержание хрома, который может быть представлен окисью хрома, вызывающей отравление при вдыхании во время работы.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Ионин В.А., Лаврова В.С.

Литература:

[1]. Millar I. B., Cooney P. A. // Atmospheric Environment (1967). 1982. Vol. 16. № 3. P. 615-620.

Выделение и исследование гемицеллюлоз листьев малины, полученных методом окислительной делигнификации

Пахомова Ксения Андреевна

МАОУ Лицей № 7 имени героя Советского союза Б.К. Чернышева

Гемицеллюлозы (ГЦ) - это полисахариды клеточной стенки растений, которые являются вторыми по распространенности возобновляемыми растительными полимерами после целлюлозы в лигноцеллюлозных материалах. На данный момент ГЦ являются не достаточно популярными в применении из-за сложности выделения в чистом виде. Однако благодаря таким свойствам, как высокая биологическая активность, нетоксичность, экологичность, ГЦ являются перспективным материалом для использования их в различных областях, например, фармакология и пищевая промышленность [1].

Целью данной работы является выделение и исследование ГЦ из листьев малины, полученных методом окислительной делигнификации. Выход ГЦ составляет 20%, при этом продукт достаточно чистый, что подтверждается комплексом физико-химических методов. Метод газовой хроматографии показал, что доминирующими моносахаридами являются глюкоза и галактоза (0.35 и 0.37 г/л, соответственно). Результат ИК-Фурье спектроскопии показал (Рис.1А), что на спектрах присутствуют все характерные полосы поглощения для полисахаридов, а именно: полоса поглощения 885 см^{-1} указывает на β -конфигурацию гликозидных связей, а полоса поглощения в области 1403 см^{-1} указывает на колебания урановых кислот. Исследование молекулярно-массовых характеристик методом гелепроникающей хроматографии показало, что полученные ГЦ состоят из нескольких фракций (Рис. 1В), что характерно для листовых и кустарниковых растений, также наблюдалась высокая разветвленность полисахаридов, на что указывает высокое значение полидисперсности (4.26).

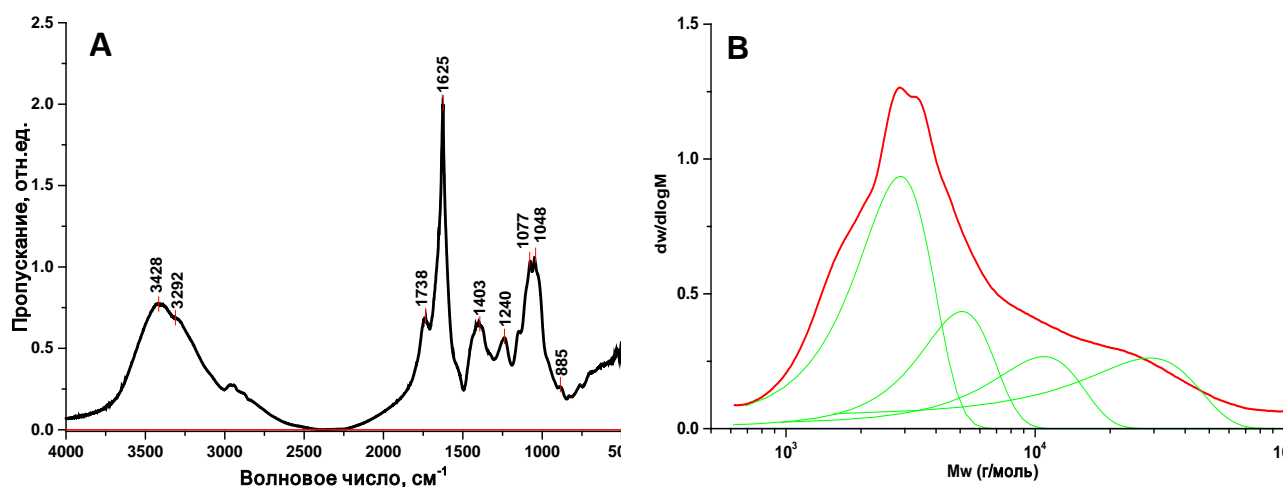


Рис. 1. А – ИК-Фурье-спектры гемицеллюлоз; В – кривые ГПХ гемицеллюлоз из листьев малины.

Автор выражает благодарность научному руководителю Боровковой В.С., а также сотрудникам ИХХТ СО РАН.

Литература:

[1] Кретникова Н.В, Пен Р.З, Пен В.Р, А.В.Оболенская. Научная статья по химическим наукам, автор научной работы.

Изучение состава пластика методом ИК-спектроскопии

Попова Елизавета Федоровна

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Экологическая безопасность полимерных композиционных материалов, содержащих различные низкомолекулярные целевые компоненты (ингредиенты), обеспечивающих заданные эксплуатационные свойства материала, согласно законам РФ, определяется качественным и количественным составом выделяющихся из них низкомолекулярных веществ и их токсичностью. В связи с этим установление состава композиционных полимерных материалов и контроль количества низкомолекулярных органических и неорганических ингредиентов в случае контакта полимерного материала с водой, пищевыми средами, воздухом (особенно при повышенной температуре) являются актуальными задачами. Важная роль в надежном определении качественного и количественного состава полимерных композиций и выделяющихся из них вредных низкомолекулярных веществ принадлежит методу ИК спектроскопии. В настоящее время метод ИК спектроскопии является одним из самых распространенных инструментальных методов для идентификации полимеров, полимерных композиционных материалов и их ингредиентов, определения химического строения и структуры макромолекулярных и низкомолекулярных объектов. Для образца полимера, не содержащего примесей, методом ИК спектроскопии с высокой степенью надежности можно установить не только структуру полимерной цепи, но и некоторые особенности состава и структуры полимера, обусловленные способом получения или переработки.

Таким образом целью нашего исследования является изучение состава пластиковой карты методом ИК-спектроскопии для понимания насколько легкоперерабатываемый и опасный для здоровья состав материала из которого она изготовлена.

Для регистрации спектров на НПВО приставке нет особой необходимости в подготовке, но для точности измерений необходимо снять верхнюю пленку и убрать клей. Для этого измельчаем карту и замачиваем её в ацетоне на несколько часов, затем стираем все салфеткой и сушим в сушильном шкафу. Регистрация ИК-спектров всех образцов производилась на ИК-Фурье спектрометре Simex FT-801 в области от 4000 – 600 см⁻¹ при 26 сканах. Была использована приставка НВПО/ЗДО с разрешением 2 см⁻¹ с кристаллом ZnSe (угол падения 45°).

Отнесение всех полос поглощения приведено в таблице 1.

Таблица 1 – Сводная таблица полос поглощения.

Функциональная группа	Длина волны, см⁻¹
Вторичные связанные и свободные ОН-групп, водородные связи валентными колебаниями С=О	2200-3100
концевыми двойными (сопряженными) связями С=С	1720
колебаний группы Р=О	1650
колебаниями группы Р-О-С	1290
	1190

Литература:

- [1] Пахомов П.М., Маланин М.Н., Хижняк С.Д., Высокомолек. соед. Б., 47(6), 1066 (2005).
- [2] Инфракрасная спектроскопия полимеров / Под ред. И. Деханта. М.: Химия, 1976.

Применение бентонитовых глин для нейтрализации отходов, хранящихся в картах-накопителях Байкальского ЦБК

Рыжова Арина Антоновна, Колыбзева Василиса Николаевна

Лицея №7, учащиеся 9 «г» класса, Институт химии и химической технологии СО РАН

Байкальский целлюлозно-бумажный комбинат — промышленное предприятие, расположенное в городе Байкальске, крупнейший источник загрязнения Байкала. В результате функционирования БЦБК накоплено большое количество отходов: в 14 бассейнах карт-шламонакопителях хранится более 6,2 млн м³ отходов IV класса опасности. В водах карт и в почве содержатся опасные экотоксиканты - тяжёлые металлы, фенол и хлорфенолы [1,2]. Из-за близкого расположения к оз. Байкал ущерб от загрязнения при аварийной ситуации будет невероятно высок. Разработка технологии утилизации данных отходов в настоящее время является актуальной задачей. Наиболее приемлемым вариантом является проведение инженерно-мелиоративных и агротехнических работ для создания оптимальных условий протекания естественных природных процессов нейтрализации опасных веществ. Мы предлагаем в качестве наполнителя бентонитовые глины. Они способны хорошо поглощать воду, иммобилизовать тяжёлые металлы, адсорбировать вещества фенольной природы, благодаря пластичным свойствам, укреплять стены карт-накопителей, останавливать и предотвращать их разрушение. Это делает бентонитовую глину перспективным объектом для нейтрализации отходов.

Активация карбонатом натрия увеличивает влагоёмкость глины почти в 2 раза (Табл. 1). Активация также ведёт к более быстрой иммобилизации экотоксикантов [3]. Наиболее целесообразно использовать активированную бентонитовую глину месторождения «Кайбальское-2».

Таблица 1. Влагоёмкость бентонитовых глин

Образец глины	Среднее значение влагоёмкости
Природная глина «10-й Хутор»	0,73±0,024
Природная глина «Кайбальское-2»	0,77±0,001
Активированная глина «10-й Хутор»	1,25±0,002
Активированная глина «Кайбальское-2»	1,39±0,003

Была оценена верхняя граница количества глины, необходимого для нейтрализации накопленных отходов. Так, например, для карты-накопителя №2 с влажностью 82% и фактическим объёмом наполнения 235 тыс. м³ необходимое количество наполнителя – активированной бентонитовой глины, составляет 138 тыс. тонн. Однако требуемый технологический эффект может быть достигнут и при меньшем расходе материала, на что будут направлены наши дальнейшие исследования.

Авторы выражают глубокую благодарность руководителю работы Голубкову Виктору Александровичу.

Литература:

- [1] Богданов А.В., Шатрова А.С., Качор О.Л. Геоэкология. Инженерная геология, гидрогеология, геокриология, Т.2, С. 47-53 (2017).
- [2] Fedyaeva O.N., Morozov S.V., Vostrikov A.A. Chemosphere. V 283, С. 131239 (2021).
- [3] Гуска Р. В., Голубков В. А., Ворожцов Е. П. Международный журнал гуманитарных и естественных наук. Т.1(1), С. 201-204 (2020).

Синтез левулиновой кислоты из цитрусовых отходов; катализ на твердых кислотах

Саркарова Динара Магамедовна, Ленкова Полина Сергеевна

МАОУ Лицей № 7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Одной из наиболее актуальных мировых проблем на данный момент является переход от ископаемого сырья к возобновляемому, поскольку извлечение и переработка ископаемых ресурсов наносит удар по экологии и приводит к постепенному истощению этого ресурса [1]. Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ), к которой относятся отходы деревопереработки и растениеводства, а также высокопродуктивные культуры (мискантус, просо, топинамбур и др.) может стать альтернативой углеродсодержащему сырью при производстве моторных топлив и других химических продуктов, производимых в настоящее время путем нефтехимического синтеза [2].

Кожура апельсина является примером ЛЦБ, которая образуется в объеме 32 млн. тонн в год [3]. Левулиновая кислота (ЛК) или 4-оксопентановая кислота — одноосновная карбоновая кислота, первый простейший представитель γ -кетокислот которая рассматривается как молекула-платформа и является продуктом кислотного гидролиза целлюлозы и гемицеллюлоз [4]. Каталитическая деполимеризация лигноцеллюлозы - необходимый этап переработки с целью получения ценных химических продуктов, таких как ЛК. Наиболее актуальным сейчас, ввиду высокой экологичности и удобства регенерации, является использование твердых катализаторов.

Целью нашей работы является разработка твердого кислотного катализатора получения левулиновой кислоты из ЛЦБ. В качестве сырья для получения ЛК, а также для приготовления катализатора в данной работе использована кожура апельсина.

Приготовление катализатора включало в себя следующие этапы: измельчение и сушка, карбонизация при 800 °С 2 часа и окисление мокрым воздухом при 400 °С.

Получение левулиновой кислоты проводили в автоклаве Autoclave Engineers, в водной среде, при 150 °С в течении 3 ч. Анализ продуктов осуществлялся при помощи высокоэффективной жидкостной хроматографии на приборах Милихром А-02 и Agilent 1260 Infinity II.

В результате каталитических испытаний установлено, что общий массовый выход продуктов составил 47.6% среди которых: левулиновая кислота мас.7.2%, муравьиная кислота 5.1 мас.%, уксусная кислота 1.8мас.%, фурфурол 4.6 мас.%, а также сахара (глюкоза, фруктоза, манноза и т.д) 28.9 мас.%. Последующая модификация катализатора позволит увеличить селективность процесса по отношению к левулиновой кислоте.

Авторы выражают благодарность нучному наставнику - м.н.с. Лаборатории каталитических превращений возобновляемых ресурсов ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Venderbosch, R.H., ChemSusChem., 8(8), 1306-1316 (2018).
- [2] Bajwa, D.S., et al., Industrial Crops and Products, 139,111526 (2019).
- [3] Michael-Igolima, U., et al., Materials, 16(3), 1092 (2023).
- [4] Alonso, D.M., S.G. Wettstein, and J.A. , Green Chemistry, 15(3), 584-595 (2013).

Сравнительная характеристика бентонитовых глин месторождений Республики Хакасия «10-й Хутор» и «Кайбальское-2»

Сиделева Анастасия Романовна, Смолянец Диана Дмитриевна

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Бентонит или бентонитовая глина – глинистые горные породы, их основным компонентом являются минерал монтмориллонит. Содержание монтмориллонита и его свойства зачастую являются определяющими факторами при выборе бентонитовых глин для промышленных нужд [1]. Из-за того, что бентонит и монтмориллонит разного происхождения могут значительно различаться по свойствам, необходимо учитывать их особенности при переработке и применении глин для рационального использования.

Нами изучались бентонитовые глины месторождений «10-й Хутор» и «Кайбальское-2». В ходе работы определен элементный состав (РФА), отличительными особенностями являются высокое содержание Fe в глине «Кайбальское-2». Количественное определение минералогического состава выполнялось методом порошковой рентгеновской дифракции с полнопрофильным анализом по методу Ритвельда (Рис. 1). Монтмориллонита в глине «10-й Хутор» содержится 69,8%, а в глине «Кайбальское-2» 52,3%. Содержащих много железа минералов не обнаружено

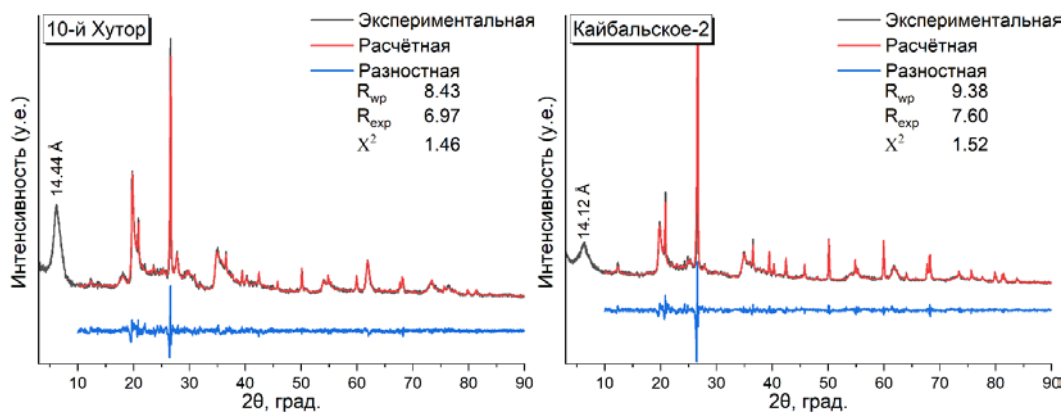


Рис. 1. Дифрактограммы бентонитовых глин.

Ёмкость катионного обмена – одно из основных свойств глин. Для глин «10-й Хутор» и «Кайбальское-2» оно составило 29,3 и 27 мг*экв/100 г. Однако доля монтмориллонита в них отличается, а значит ёмкость катионного обмена монтмориллонита в образце «10-й Хутор» меньше, чем в «Кайбальское-2»: 42 и 52 мг*экв/100 грамм монтмориллонита. Методом синхронного термического анализа показано, что стабильность глины «Кайбальское-2» ниже, что характерно для богатых железом монтмориллонитов. Изоморфное замещение железом приводит к увеличению заряда слоя монтмориллонита и повышению емкости катионного обмена.

Таким образом, глины промышленно значимых месторождений Хакасии имеют отличающийся состав минералов, разное содержание монтмориллонита, а монтмориллонит разных месторождений отличается по своим свойствам из-за изоморфного замещения железом.

Авторы благодарят ООО «Бентонит Хакасии»; Сотрудников ИХХТ СО РАН (Жижаев А.М., Кирик С.Д., Фетисова О.Ю.) и руководителя работы – Голубкова В.А.

Литература:

[1] Белоусов П.Е. и Крупская В.В. Георесурсы, Т. 21(3), С. 79-90. (2019).

Спектральное изучение селен-трифторацетона

Шишкина Елизавета, Харитонова Маргарита

МАОУ Лицей №7 им. героя Советского союза Б.К. Чернышева

Синтез новых органических хелатирующих реагентов для детектирования, разделения и концентрирования редкоземельных и благородных металлов является перспективной задачей синтетической химии. Одними из давно используемых для этих целей веществ являются 1,3-диетоны. Их перфторированные аналоги также очень эффективны для селективного разделения редкоземельных металлов. Однако, для новых веществ из этой группы, хоть и описываются методы получения, достаточно мало данных о их свойствах, особенно спектральных. В данной работе был изучен недавно синтезированный лиганд содержащий селен в тиофеновом кольце [1].

Цель данной работы – оценка спектральных свойств селен-трифторацетона в средах с различной полярностью и их интерпретация с помощью квантово-химического моделирования.

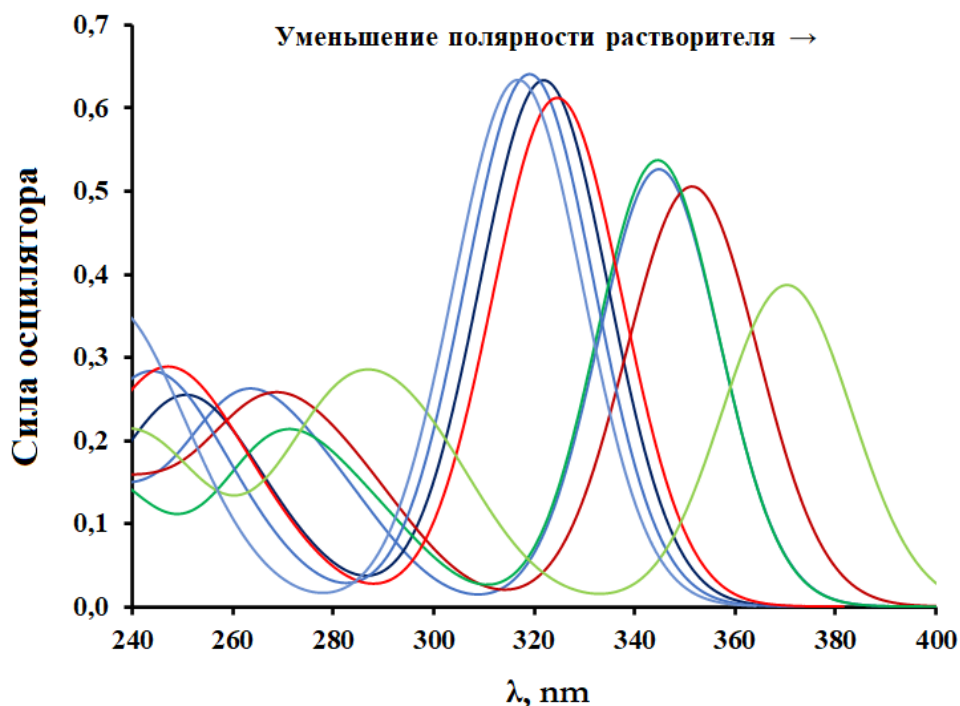


Рис. 1. Теоретические TD-DFT спектры изучаемого лиганда при различной диэлектрической проницаемости растворителя (cc-pVDZ/M06-2X).

Было установлено что при понижении полярности спектр изучаемого дикетона сдвигается в длинноволновую область, относительно исходного. С использованием гибридного функционала плотности M06-2X и сольватационной модели SMD было показано, что теоретические спектры также сдвигаются в длинноволновую область спектра. Тем самым была показано, что явные сольватационные эффекты играют решающую роль в поглощении света селен-трифторацетоном.

Автор выражает благодарность научному руководителю работы Лутошкину М.А.

Литература:

[1]. Maxim A. Lutoshkin and Ilya V. Taydakov, Polyhedron, 207, 115383 (2021).

Компьютерная симуляция взаимодействия фотона с электронной оболочкой атома

Юдасин Лев Александрович

МБОУ «СОШ №10 с углубленным изучением отдельных предметов имени академика Ю.А. Овчинникова»

Часто какой-либо эксперимент сложно провести в реальности. В таких случаях используется компьютерная симуляция этого эксперимента.

В данном проекте предлагается компьютерная симуляция, направленная на изучение взаимодействия фотона с электронной оболочкой атома.

Программа составлялась на движке *Unity3D* с использованием языка программирования *C#*. Она позволяет моделировать атомы с различными зарядами ядра и электронные оболочки разной формы (форма электронной оболочки зависит от квантовых чисел электрона и описывается волновой функцией [1, 2], с которой и работает моя программа). Однако взаимодействие с фотоном пока моделируется только для атома водорода.

После взаимодействия атома с фотоном состояние электрона меняется согласно правилам отбора, которые записаны в мою программу через условные операторы.

Также атом может излучить обратно поглощённый фотон. Излучение в программе реализовано как процесс, обратный поглощению (состояние электрона снова изменяется согласно правилам отбора).

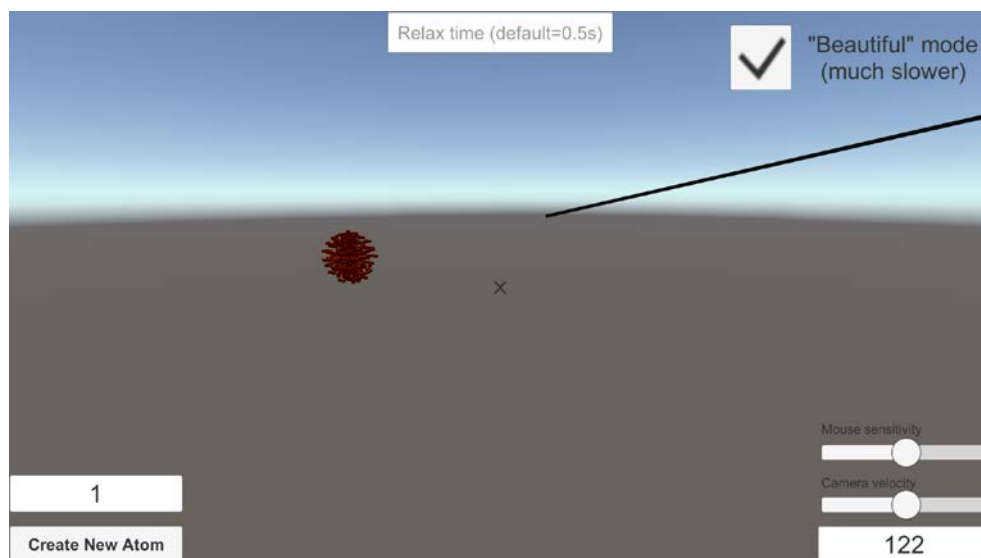


Рис. 1. Интерфейс программы, пример работы – атом водорода и фотон 122 нм (чёрный, т.к. не из видимого диапазона).

Проект выполнен при поддержке Краевого фонда науки. Автор выражает благодарность научному руководителю к.ф.-м.н. ФИЦ КНЦ СО РАН Морячкову Роману Владимировичу.

Литература:

[1] Дмитриев И. С. Электрон глазами химика: учебник. - Л.: Химия, 1986. - 228 с.

[2] Материалы МФТИ о центральном поле [Электронный ресурс].

URL: https://mipt.ru/education/chair/theoretical_physics/upload/1d5/centr-arpe0hsklk7.pdf.

Исследование динамики восприятия звуковых волн слуховым анализатором в зависимости от возраста человека

Ягодников С. Н.¹, Шестопалова А. Д.¹, Калицинская Б. С.¹, Колпакова Л. Н.¹, Чернов И. Д.¹, Губина З. С.¹, Сухоруков В.В.²

¹МАОУ Гимназия №13 «Академ», ²Сибирский Федеральный Университет

Слух и речь составляют важное средство коммуникации между людьми, служат основой существования людей в обществе [1-2]. Потеря слуха может привести к нарушениям в поведении человека [3]. Актуальность работы обусловлена тем, что в современном обществе принято считать, что восприимчивость звуковых волн слуховым анализатором ухудшается с увеличением возраста человека. Целью работы являлось подтверждение или опровержение данной гипотезы.

В результате выполнения научной работы, учениками было проведено исследование аудиометрии бинаурального слуха 30-ти испытуемых трех возрастных групп (14-16, 35-45 и 55-65 лет, соответственно). По 10 испытуемых в каждой возрастной группе (рис. 1. Б).

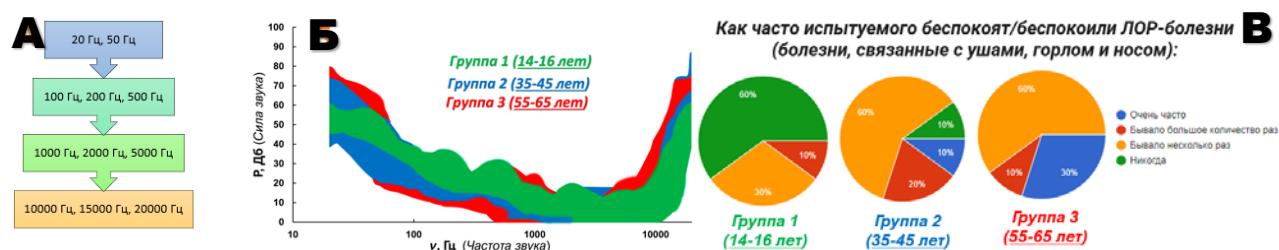


Рис. 1. А – Частоты, на которых проводилось исследование слуха испытуемых. Б – Секторы слышимости звуковых сигналов, основанные на возрастных группах испытуемых. В – Результаты анкетирования испытуемых.

Результаты анкетирования показали, что 60% испытуемых возрастом 14-16 лет не беспокоят ЛОР-болезни, напротив, 60% испытуемых 35-45 и 60% испытуемых 55-65 лет, соответственно, сталкивались с ними.

С помощью исследования аудиометрии было получено, что на частотах, соответствующих человеческой речи (300 – 4000 Гц), результаты испытуемых трех групп отличаются незначительно и находятся в вариационном диапазоне от 0,1 до 30,8 Дб (рис. 1. Б). На низких (20 – 50 Гц) и высоких (5, 10, 15 и 20 кГц) частотах, соответственно, сила звука, необходимая для фиксации сигнала слуховым анализатором человека, имеет прямо пропорциональную зависимость относительно увеличения возраста человека.

Гипотеза, поставленная в начале исследования подтвердилась. Действительно, с увеличением возраста, человеку становится труднее воспринимать сигналы на высоких и низких частотах, что касается частот, соответствующих человеческому голосу – ухудшений функций слухового анализатора у возрастных групп 2 и 3 не было зафиксировано. Исследователи 8-го класса РАН считают, что полученные результаты могут быть связаны с образом жизни большинства испытуемых и их профессиональной сферой деятельности (учитель).

Выражаем благодарность нашему куратору – магистранту ИФБиТ СФУ, Сухорукову Владиславу Витальевичу и научному руководителю – к.б.н., в.н.с. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Смольниковой Марине Викторовне.

Литература:

- [1] Никольский А. А. Звуковые сигналы млекопитающих в эволюционном процессе. - М.: Наука, 1984. - С. 7;
- [2] Карузина И. П. / Биология. - Изд. 5-е. - М.: Медицина, 1972. - 352 с;
- [3] Albera R. et al., European archives of oto-rhino-laryngology, 267, 665-671 (2010).

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVI)
г. Красноярск, 16 мая 2023 г.

ISBN 978-5-6045250-7-4



Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 16.05.2023 г.
Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Times New Roman».

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

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

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