Российская Академия Наук

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-XXVII)

КРАСНОЯРСК | 18 АПРЕЛЯ 2024 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-XXVII)

18 апреля 2024 года, г. Красноярск

Красноярск
2024

УДК 50(082)
ББК Б.я431
М43

М43 Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVII): тезисы докладов (Красноярск, 18 апреля 2024 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2024. – 114 с.

ISBN 978-5-6050878-5-4

© Авторы, содержание тезисов, 2024
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2024

ISBN 978-5-6050878-5-4

Сборник трудов междисциплинарной конференции молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН, 18 апреля 2024 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, науч. руководитель ФИЦ КНЦ СО РАН;
Александр Артурович Шпедт – член-корр. РАН, директор ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Николаевич Варнаков – д.ф.-м.н., зам. директора ФИЦ КНЦ СО РАН;
Светлана Николаевна Софронова – к.ф.-м.н., зам. директора ФИЦ КНЦ СО РАН;
Владимир Викторович Шайдуров – член-корр. РАН, директор ИВМ СО РАН;
Оксана Павловна Таран – проф. РАН, д.х.н., директор ИХХТ СО РАН;
Эдуард Вильямович Каспаров – д.м.н., директор НИИ МПС;
Александр Владимирович Пименов – д.б.н., зам. директора ИЛ СО РАН;
Денис Юрьевич Рогозин – д.б.н., зам. директора ИБФ СО РАН;
Алексей Эдуардович Соколов – к.ф-м.н., зам. директора ИФ СО РАН;
Алексей Геннадьевич Липшин – к.с.-х.н., директор КрасНИИСХ;
Анатолий Иосифович Рубайло – д.х.н., зав. отделом «КРЦКП» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Викторович Столяр – д.ф-м.н., зав. отделом «МНЦИЭСО» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Анна Сергеевна Кичкайло – д.б.н., зав. отделом «ЦУЛТ» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Иван Викторович Петерсон – к.х.н., председатель СНМ ФИЦ КНЦ СО РАН.

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. Перетятько, к.м.н., НИИ МПС;
С.В. Жила, к.б.н., ИЛ СО РАН;
С.В. Козлова, к.ф.-м.н., ИВМ СО РАН.

Содержание

Секция «Физика»..... 10

Бондарева С.В. Электрокалорический эффект в сегнетоэлектрике NH_4HSeO_4 11

Гамов А. Совместная реализация нетривиальной топологии и ферромагнетизма в слоях Te-Mn-Te изолятора $MnBi_2Te_4$..... 12

Енькова Е.О. К теории оптимальных размеров двумерных скирмионов различной морфологии 13

Ковалева Е.А. Квантово-химический расчет спектра поглощения фрагмента светособирающего комплекса Rdb. Acidophilus..... 14

Мартынов А.С. Квантовый SU(3) ферримагнетик на треугольной решётке с одноионной анизотропией 15

Самусь А.Д., Еремин Л.А. Кинетика реакции диспропорционирования в пленке GeO.. 16

Светлицкий Е.С. Сорбционная и каталитическая активность магнитных наночастиц Fe_3O_4@Ag..... 17

Скоробогатов С.А. Спин-ориентационный переход в редкоземельных ортоферритах: влияние внешних факторов и перспективы его использования 18

Смородина Е.Д. Суперпарамагнитная блокировка и магнитные взаимодействия в наноферригидрите адсорбированном на биоминерализованных нанокристаллитов Fe_3S_4 19

Тарасова А.С. Влияние катионного беспорядка на магнитные свойства Co_2AlBO_5..... 20

Титова В.Р. Связь магнитных и магнитоэлектрических свойств монокристаллов редкоземельных оксиборатов со структурой хантита с составами растворов-расплавов 21

Харченко И.А. Нанофильтрация органических красителей с помощью керамических мембран модифицированных углеродом 22

Шаломов С.Ю. Самопроизвольное вращение магнитов над высокотемпературным сверхпроводником 23

Секция «Химия и химические технологии»..... 24

Бережная Я.Д. Сульфатирование агарозы сульфаматом аммония 25

Боровкова В.С. Физико-химические основы получения и функционализации природных полисахаридов из древесины ели Picea abies..... 26

Волкова Д.С. Моноядерные ($POCOP^{Ph}$) пинцерные комплексы платины (II) с терминальными лигандами – потенциальные катализаторы электрохимического восстановления протонов до водорода..... 27

Голубков В.А. Гидрирование глюкозы на катализаторах Ru/C; влияние кислотности углеродного носителя 28

Зимонин Д.В. Новый подход к изучению механизмов электрохимической конверсии левулиновой кислоты на твердых электродах в неводных средах 29

Зосько Н.А. Фотоэлектрокаталитическая активность модифицированных Cu_2O нанотрубок TiO_2 в реакции разложения воды 30

Иваненко Т.Ю. Исследование фазового состава и динамических характеристик ионной жидкости [BMIM]BF_4 методами ЯМР спектроскопии и диффузометрии 31

Ионин В.А. Влияние пластификаторов на характеристики таннин-содержащих твердых пен 32

Капаева С.Н. Электрохимическое окисление растительных полисахаридов 33

Кормес Е.С. Исследование природы металл-лигандного взаимодействия в пинцерных комплексах на основе Ni(II) методами квантовой химии 34

Куулар А.А. Нанокомпозитные полиуретаны 35

Ли С. Восстановительное фракционирование древесины березы в присутствии Ni-содержащих катализаторов, нанесенных на HfO_2 36

Мирошникова А.В. Восстановительное каталитическое фракционирование костры льна в присутствии моно-и биметаллических Ru, Ni-содержащих катализаторов 37

Патрушева А.А. Кислотно-основные и спектральные свойства азотсодержащих перфторированных β-дикетонов 38

Пономарев И.С. Синтез азотсодержащих производных 2,1,3-бензохалькогендиазола . 39

Селезнева О.С. Восстановительное каталитическое фракционирование древесины березы в присутствии Pd-содержащих катализаторов 40

Синьшинов П.А. Исследование возможности образования хлорорганических соединений в результате применения химических реагентов, используемых при выполнении ГТМ на этапе добычи нефти 41

Сычев В.В. Твердые бифункциональные Ru/C катализаторы переработки компонентов растительной биомассы в ценные химические продукты 42

Троцкий Ю.А. Каталитическая деполимеризация арабиногалактана в присутствии твердого кислотного катализатора - ZrO_2-SBA-15 43

Флерко М.Ю. Получение и изучение сверхконцентрированных органозолей наночастиц серебра 44

Эпов О.А. Изучение разложения пирита, сидерита и некоторых других минеральных компонентов при прямом щелочном вскрытии томторских руд 45

Секция «Био- и медицинские технологии» 46

Андрущенко С.В. Полиненасыщенные жирные кислоты зообентоса реки Обь и ее притоков 47

Арясов В.Е. Особенности формирования фитомассы в разногустотных сосновых молодняках средней Сибири 48

Афоничева К.В. Этнические особенности предрасположенности к интернет-зависимости: роль полиморфизмов гена дофаминового рецептора 49

Баранов А.А., Зеленская Е.С. Пространственно-биотопическая приуроченность лесных видов Ястребиных Средней Сибири 50

Белоусова Д.А. VS-CAMBIUM DEVELOPER: новое веб-приложение для моделирования развития камбиальной зоны хвойных 51

Березовская А.В. Синтез политиоэфиров природным штаммом Cupriavidus necator B-10646..... 52

Гончарова Н.С. Дифференциальная диагностика хронического аллергического и хронического вазомоторного ринитов по показателям системы «перекисное окисление липидов – антиоксидантная защита 53

Демина И.А. Характеристика зообентоса и экспорта биомассы и полиненасыщенных жирных кислот при вылете хирономид (Diptera, Chironomidae) из трех соленых озер Южной Сибири 54

Дудаев А.Е. Изготовление и исследования in vitro и in vivo 3D-печатного пористого каркаса из поли(3-гидроксибутирата-со-3-гидроксивалерата) для регенерации костной ткани 55

Жукова Г.В. Новый подход в прогнозировании профессиональной пригодности работника железнодорожного транспорта 56

Злобин А.А. Производство топливных гранул (пеллет) как процесс адаптации лесопромышленного комплекса к новым условиям на примере Красноярского края ... 57

Ипатова Н.Д. Влияние фракционного состава частиц поли-3-гидроксибутирата и волокна древесины на физико-механические характеристики композитных материалов..... 58

Калябина В.П. Ингибиторный анализ для выявления скрытых эффектов формулянтов в составе пестицидов 59

Карпов В.А. Состав и содержание жирных кислот гольцов p.Salvelinus из оз. Собачье и аквакультуры..... 60

Коновалова О.В. Конструирование химерных Ca^{2+}-регулируемых фотопротеинов как подход к созданию маркерных молекул с новыми свойствами 61

Коротов И.А. Локализация каталитического домена люцифераз копепод: исследование укороченных вариантов люциферазы Metridia longa..... 62

Маркова Г.М. Динамика внутреннего состояния гетерогенных искусственных нейронных сетей, обученных задаче на рефлексию 63

Нур Ш.А. Получение и анализ свойств новых термостабильных форм рекомбинантной люциферазы мягкого коралла Renilla muelleri 64

Петрова В.В. Магнитные наночастицы для сепарации клеток рака мочевого пузыря.. 65

Полосухина Д.А., Прокушкин А.С. Сравнительная характеристика изотопного состава углерода в двух типах экосистем Центральной Сибири..... 66

Посохина Е.Д. Влияние кофейной кислоты и гиспидина на свечение базидиального гриба Neonothopanus nambi 67

Райков А.В. Изучение влияния трития на спектры биолюминесценции белка обелина 68

Рыльцева Г.А. Вызывают ли полигидроксиалканоаты негативные реакции in vitro при взаимодействии с клетками, участвующими в восстановлении повреждения тканей? 69

Сасова П.Ю. Разработка иммобилизованного ферментного препарата на основе трипсина для ингибиторного анализа 70

Севергина Д.А., Дымов А.А. Каталазная активность подзолистых почв хвойно-лиственного леса после сплошнолесосечной рубки 71

Синнер Е.К. Фекальные станолы в донных отложениях озёр Средней Сибири как индикатор антропогенной нагрузки 72

Сыроежко М.Ю. Оценка состояния трансформированных территорий севера Красноярского края по материалам дистанционного зондирования 73

Титова Д.А., Пак М.Э. Влияние регуляторов роста на развитие эмбриогенной ткани у лиственницы сибирской в культуре in vitro 74

Хорошко К.В. Влияние солёности на реактивацию покоящихся яиц, параметры жизненного цикла и популяционные характеристики Moina macrocopa 75

Шемберг А.М. Семенная продуктивность лиственницы Гмелина (Larix gmelinii Rupr.) в Сибири 76

Секция «Математическое моделирование» 77

Боков А.И. Применение клеточных автоматов для моделирования движения амёб 78

Гилин С.В. Гибридный алгоритм распознавания строений на изображениях 79

Горбунова К.Д. Двумерная задача моделирования гидродинамического истечения атмосфер экзопланет 80

Гусейнов В.М. Математическое моделирование системы термостабилизации бортовой аппаратуры космического аппарата 81

Жигарев В.А. Расчётное исследование применения вытесняющих агентов для повышения нефтеотдачи 82

Зайцев Н.Е. Исследование методов получения карты температуры поверхности Земли по спутниковым данным Landsat 8-9 83

Лев Н.А. Прогнозирование величины концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе г. Красноярска с помощью моделей случайного леса и градиентного бустинга 84

Максимова А.А. Моделирование концентрационной поляризации в установке тангенциальной фильтрации с радиальным течением раствора. 85

Полянчикова Д.В. Регрессионные модели для прогноза величины концентрации загрязняющих веществ в атмосфере г. Красноярска 86

Сиротинин А.А. Проектирование оптимальной беспроводной внутренней сети для использования технологии интернета вещей 87

Таныгин К.Е. Выделение локально-климатических зон города по спутниковым данным 88

Шадрина Г.В. Теория связанных мод для супер-связанных состояний в континууме, наблюдающихся в момент слияния резонансов 89

Шебелев А.В., Гаврилов А.А., Минаков А.В. Моделирование турбулентного течения неньютоновской жидкости с крупнодисперсными тяжёлыми частицами в круглой горизонтальной трубе 90

Шебелева А.А., Округина А.К. Численное исследование влияния вязкости жидкости на темп деформации в процессе разрушения капли в потоке за ударной волной 91

Шебелева А.А., Лобасов А.С. Расчетно-экспериментальное исследование снарядного режима течения нефть – суспензия SiO_2 в Y-образном микроканале 92

Шульженко П.Д., Дектерев А.А., Мешкова В.Д. Влияние расположения высотных зданий на аэрационный режим городского каньона 93

Секция «Школы РАН» 94

Авдей Я., Литвяк З. Получение нового ($POCOP^{Ph}$) пинцерного комплекса никеля с терминальным OH-содержащим лигандом 95

Афанасьева Е., Новоселов С. Синтез и изучение люминесцентных свойств комплексов меди(I) с куркумином 96

Ткавашвили А.И., Илларионова М.А., Деймунд Д.А., Михейлидзе З.Е., Катышев Д.Е., Зырянов В.О. Персонификация питания у школьников: биоимпедансный и антропометрический анализ 97

Варкентин А.В., Утимишева Е.С. Этерификация левулиновой кислоты на твердом катализаторе 98

Дружинина В.В., Добров А.Ф. Синтез аспирина на твердом кислотном катализаторе .. 99

Задолинная А., Авулова Д. Механоактивация кератиносодержащего сырья для щелочного гидролиза 100

Земцова А.В., Ладушкевич Д.В. Определение ионов свинца в снежных покровах Октябрьского района г. Красноярска спекрофотометрическим методом 101

Капкан С., Минина Т., Хозяинов В. Модификация природных полисахаридов с получением перспективных фармакологически активных водорастворимых полимеров 102

Колыбзева В. Количественный анализ минерального состава бентонитовых глин методом порошковой рентгеновской дифракции 103

Анушенков П., Бабичев М., Вершинин Н., Иванова А., Кузовков В. Сравнение протоколов криоконсервации клеток асцитной карциномы Эрлиха 104

Гельфанова А., Куц С. Разработка метода определения аспартама (пищевая добавка E951) в газированных напитках 105

Муравьева А. Получение полисахаридов из древесины тополя 106

Пахомова К.А. Получение и изучение новых функциональных материалов на основе галактоглюкоманнана ели Picea Abies 107

Пивоварова А., Лосев З., Иванова К. Влияние напряжения анодирования на морфологию и фотокаталитическую активность нанотрубок диоксида титана 108

Меньшикова Б.Д., Щирба Е.И., Перевалова Д.А., Садыков Р.Т. Влияние гуминовых удобрений на фотосинтетические характеристики растений подверженных стрессу ... 109

Казанцева С., Коршунова А., Кряжев К., Писарев Д., Полуян Р., Смолянинов И., Успешный Я., Сапожникова К.Ю. Взаимосвязь между уровнем физического состояния человека и неспецифической резистентности организма на примере лизоцима 110

Сиделева А. Разработка солнцезащитного крема с фотоактивным компонентом на основе лигнина 111

Черепанова С., Шульга Я. Продукты щелочного каталитического окисления древесины сосны 112

Елизавета Ш., Маргарита Х. Спектрофотометрическое исследования кето-енольных форм теллурофен-трифторацетона 113

Секция «Физика»

Электрокалорический эффект в сегнетоэлектрике NH_4HSeO_4

Бондарева Софья Витальевна
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Электрокалорический эффект (ЭКЭ) в диэлектрических материалах интенсивно исследуется в последние годы из – за возможности реализации твердотельных охлаждающих устройств с компактными размерами и высокой эффективностью в различных технических и технологических областях. ЭКЭ представляет собой изменение температуры или энтропии, связанное с изменением электрического поля в изотермических и адиабатических условиях, соответственно. Как было показано [1], изменение температуры твердотельного хладагента за счет ЭКЭ на 2–5 К является достаточным для создания более энергоэффективной и коммерчески доступной системы охлаждения, чем существующие парожидкостные холодильные установки. Остается найти подходящий материал с большой величиной ЭКЭ. Известно, что значительный ЭКЭ может быть получен в сегнетоэлектрических материалах вблизи сегнетоэлектрического фазового перехода.

В настоящей работе в качестве объекта исследований ЭКЭ был выбран монокристалл кислого селената аммония NH_4HSeO_4, который испытывает три последовательных фазовых перехода при 100 К, 250 К и 417 К и является сегнетоэлектриком в температурной области 100 ÷ 250 К. Вектор спонтанной поляризации ориентирован вдоль цепочек водородных связей. Обнаружено наличие в структуре двух подрешеток: с нескомпенсированной и скомпенсированной поляризациями [2]. Сведений о ЭКЭ в кислом селенате аммония до сих пор не сообщалось.

В работе представлен комплексный анализ теплофизических и электрофизических свойств, а также прямые и косвенные исследования ЭКЭ в кристалле NH_4HSeO_4. С этой целью были проведены экспериментальные исследования теплоемкости, диэлектрической проницаемости, в том числе под электрическим полем. Впервые выполнены прямые измерения интенсивного ЭКЭ в кислом селенате аммония. Анализ полевых зависимостей теплоемкости $C_p(T,E)$ и восприимчивости температуры фазового перехода к внешнему электрическому полю использовался для вычисления интенсивного и экстенсивного ЭКЭ. Показано, что рассматриваемый кристалл является перспективным для применений в малогабаритных твердотельных охлаждающих устройствах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10014, Красноярского краевого фонда науки, https://rscf.ru/project/23-22-10014/

Автор выражает благодарность соавторам работы: Михалевой Е.А., ИФ СО РАН, Флёрову И.Н. ИФ СО РАН, и научному руководителю Бондареву В.С., ИФ СО РАН.

Литература:

[1] Y. V. Sinyavski, G. E. Lugansky, and N. D. Pashov, Cryogenics 32, 28 (1992).

[2] К.С. Александров, А.И. Круглик, С.В. Мисюль, В.А. Симонов. Кристаллография, т. **25**, с. 1142, (1980).

Совместная реализация нетривиальной топологии и ферромагнетизма в слоях Te-Mn-Te изолятора $MnBi_2Te_4$

Гамов Александр
Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН,
Сибирский федеральный университет

Возникновение интереса к изучению топологического изолятора $MnBi_2Te_4$, представляющего собой последовательность из семи слоев Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te, расположенных перпендикулярно оси z, связано с формированием антиферромагнитного (АФМ) упорядочения между ионами Mn^{2+}, находящимися в разных слоях структуры, при температурах ниже температуры Нееля (24 K) [1-3]. При этом, как было предсказано в [4], АФМ порядок изменяет топологическую классификацию и модифицирует спектр краевых состояний. Природа нетривиальной топологии энергетической структуры в $MnBi_2Te_4$ зачастую связывается с электронными состояниями ионов Bi^{3+} и Te^{2-} и может быть описана в рамках эффективной модели двухслойки Te-Bi с учетом вкладов от магнитных ионов Mn [1].

При этом актуальными остаются вопросы о влиянии процессов ковалентного смешивания между спин-орбиталями ионов марганца и теллура, входящих в состав трехслоек Te-Mn-Te, на энергетическую структуру системы при учете большой величины (до 5 эВ) кулоновского отталкивания на ионах Mn^{2+}.

В данной работе рассматривается эффективный гамильтониан трехслойки Te-Mn-Te, учитывающий эффекты кристаллического поля, спин-орбитального взаимодействия и ковалентное смешивание электронных состояний ионов Mn^{2+} с состояниями ионов Te^{2-} в режиме сильных электронных корреляций [5]. Существенно, что построенная эффективная модель допускает формирование нетривиальной топологии энергетической структуры.

Показано, что к ферромагнитному упорядочению магнитных моментов ионов марганца может приводить кинематическое взаимодействие фермионов Хаббарда [6], являющихся носителями заряда в подсистеме ионов Mn^{2+}. Продемонстрировано, что формирование ферромагнетизма в слое ионов марганца может приводить к нетривиальной топологии энергетической структуры трехслойки Te-Mn-Te с числом Черна равным 1. В парамагнитной фазе для выбранных параметров число Черна равно нулю и топология тривиальна.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №23-22-10021 и Красноярского краевого фонда науки.

Автор выражает благодарность научному руководителю Злотникову А.О. и руководителю проекта Валькову В.В.

Литература:

[1] Zhang D., Shi M., Zhu T., Xing D., Zhang H., Wang J. Phys. Rev. Lett., V.122, P. 206401 (2019)
[2] Otrokov M. M., Kimovskikh I. I., Bentmann H., Estyunin D., et al., Nature., V.576, P. 416-422 (2019)
[3] Li J., Du S., Wang Z., Gu B. - L., Zhang S. - C., et al., Sci. Adv., V.5, P. eaaw5685 (2019)
[4] Mong R. S. K., Essin A. M. and Moore J. E., Phys. Rev. B., V. 81, P. 245209 (2010)
[5] Val'kov V. V., Zlotnikov A. O., Gamov A., JETP Lett. V. 118, Is. 5., P. 328-335 (2023)
[6] Zaitsev R. O., JETP. V. 96, P. 286-300 (2003)

К теории оптимальных размеров двумерных скирмионов различной морфологии

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

Магнитные скирмионы представляют собой вихревые структуры, для которых можно ввести понятие топологического заряда Q [1]. Данные структуры являются перспективными в создании новых устройств магнитной памяти благодаря их малым размерам и топологической устойчивости. В рамках численного моделирования было предсказано существование магнитных скирмионов сложной морфологии с различными топологическими зарядами, называемых скирмионными мешками [3,4]. К настоящему времени для таких структур слабо развита аналитическая теория. Данная работа посвящена развитию аналитической теории для таких структур, а именно нахождению их аналитической параметризации, а также нахождению оптимальных размеров для них. В работе [3] было показано, что скирмониумы, топологический заряд которых равен нулю, являются структурными элементами для построения скирмионных мешков. Используя аналогичный подход, нами была найдена аналитическая параметризация мешков.

Исследуя способы нахождения радиуса и ширины доменной стенки простого скирмиона, были найдены размерные параметры более сложных структур, таких, как скирмониум. Исходя из того, что скирмониумы являются структурными элементами мешков, были найдены оптимальные размеры самих мешков. Построения скирмионных мешков с различными топологическими индексами представлены на Рис. 1:

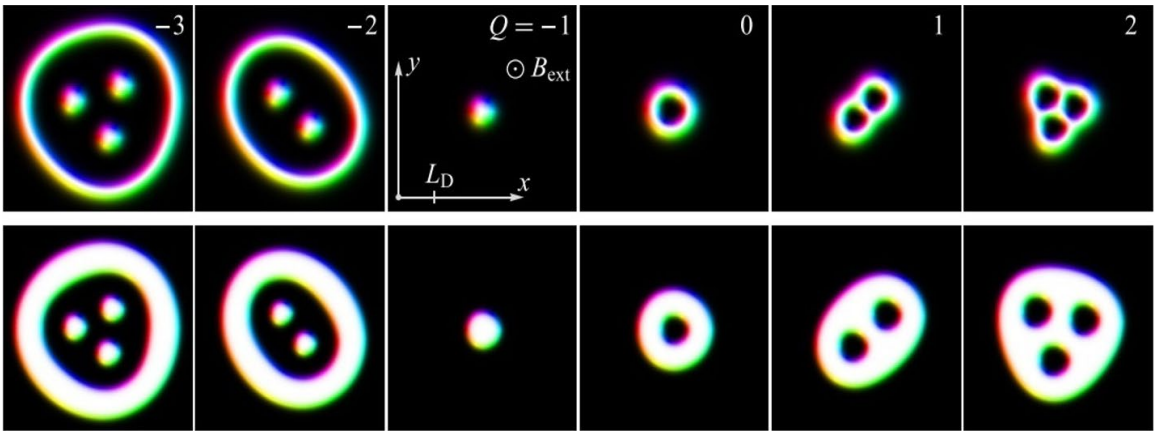


Рис. 1. Магнитные скирмионы с произвольными топологическими индексами, где цифрами сверху показано значение топологического заряда Q.

Благодарности:

Шустин М.С. выражает глубокую благодарность М.Н. Поткиной за предложенный ей анзац магнитного скирмониума и полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики <<БАЗИС>> (проект № 23-1-3-52-1) и при поддержке гранта Президента РФ (проект МК-4687.2022.1.2).

Литература:

[1] Skyrme T. H. R. A non-linear field theory, Proc. R. Soc. Lond. Ser. A, 260 (1961).
[2] C. Moreau-Luchaire J. et. al., Nat. Nano. 11, 444 (2016).
[3] Rybakov F.N., Kiselev N.S. Chiral magnetic skyrmions with arbitrary topological charge, Phys. Rev. B 99, 064437 (2019).
[4] Kuchkin V.M. Magnetic skyrmions, chiral kinks, and holomorphic functions, et. al., Phys. Rev. B 102, 144422 (2020).

Квантово-химический расчет спектра поглощения фрагмента светособирающего комплекса Rdb. Acidophilus

Ковалева Евгения Андреевна
ФИЦ КНЦ СО РАН

В работе проводилось моделирование структуры и свойств кольца бактериохлорофиллов а (*BChl a*) периферического светособирающего комплекса (*LH2*) пурпурных бактерий *Rhodoblastus acidophilus*, поглощающего свет при 800 нм (*B800*). На *Рис. 1* представлены результаты расчета изолированной молекулы *BChl a* в рамках *GGA* приближения с использованием функционала *PBE*.

Было показано отсутствие взаимодействия между молекулами *BChl a* внутри кольца *B800*, определена минимальная модель аминокислотного окружения (α-N-карбоксиметионин, α-аспарагин, β-аргинин), позволяющая описывать спектр поглощения *B800*, продемонстрирована важность учета обменного взаимодействия для его корректного описания. В случае функционала *HSE06* наблюдается одинаковая величина сдвига пика поглощения по отношению к *GGA-PBE* расчету как для изолированной молекулы, так и для аминокислотной модели, что может быть использовано в дальнейшем для приблизительной оценки положения максимума поглощения исходя из данных *PBE* расчета (*Таблица 1*).

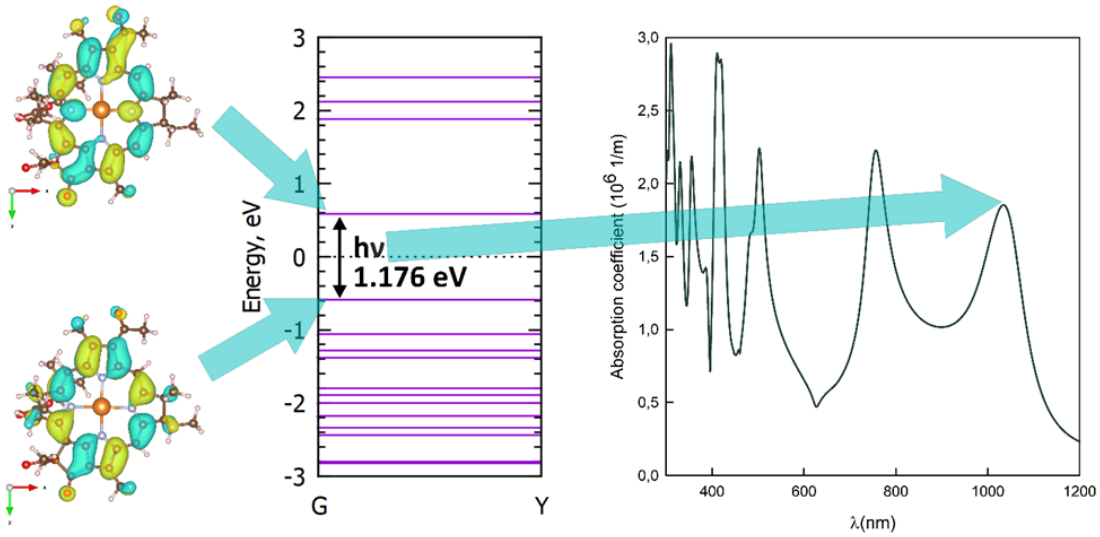


Рис. 1. Локализация HOMO и LUMO орбиталей BChl a в пространстве, энергетическая разница между ними и соответствующий ей пик в спектре поглощения. Атомы магния, углерода, азота, кислорода и водорода обозначены оранжевым, коричневым, голубым, красным и розовым цветом, соответственно. Желтые и голубые участки на рисунке соответствуют разным знакам волновой функции.

Таблица 1. Положение максимумов поглощения Q_x, Q_y в ближнем ИК диапазоне спектра поглощения для изолированной молекулы BChl a и модели, содержащей аминокислотные остатки, нм.

Структура	*PBE*	*B3LYP*	*HSE06*	*DFTB*
BChl	767, 1046	612, 876 (-155, -170)	581, 831 (-186, -215)	590, 683 (-177, -363)
BChl + Cxm-Asn +Arg	790, 1072	627, 885 (-163, -187)	609, 855 (-181, -217)	651, 700 (-139, -372)

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ФИЦ КНЦ СО РАН.
Автор выражает благодарность соавторам работы: Бегунович Л.В., Коршунову М.М., Шабанову В.Ф.

Квантовый SU(3) ферримагнетик на треугольной решётке с одноионной анизотропией

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

Исследование квантовых эффектов в сильно фрустрированных магнетиках с антиферромагнитным взаимодействием является одним из активно развивающихся направлений в физике твёрдого тела. Наличие одноионной анизотропии в таких системах приводит к необходимости рассматривать в качестве динамических переменных не только дипольные, но и квадрупольные степени свободы [1].

В работе изучены структура основного состояния и спектральные свойства трёхподрешёточного *SU(3)* ферримагнетика на треугольной решётке со спинами S=1/2,1/2,1 с одноионной анизотропией типа лёгкая плоскость при нулевой температуре. Для корректного учёта квадрупольных степеней свободы для подрешётки со спином S=1 использовался переход от алгебры спиновых операторов *SU(2)~SO(3)* к алгебре *SU(3)* с помощью перехода к операторам Хаббарда с последующей бозонизацией [2]. Для подрешёток со спином S=1/2 использовалось преобразование Гольштейна-Примакова.

Рассчитаны зависимости спиновых моментов, квадрупольного момента, а также полного момента трёх подрешёток от параметра одноионной анизотропии для различного соотношения между обменными интегралами I/J, где I-обменный интеграл между спинами S=1 и S=1/2, J-обменный интеграл между спинами S=1/2.

При $I/J<1$ реализуются два состояния системы: 1) скошенное ферримагнитное состояние при $0<D<D_c$, где $D_c=2\bullet(I^2/J)$-критическая анизотропия; 2) квадрупольное антиферромагнитное состояние при $D>D_c$. При $I/J>1$ реализуются три состояния системы: 1) коллинеарное ферримагнитное состояние при $0 < D < 0.6\ D_c$; 2) скошенное ферримагнитное состояние при $0.6D_c<D<D_c$; 3) квадрупольное антиферромагнитное состояние при $D>D_c$ (рис.1).

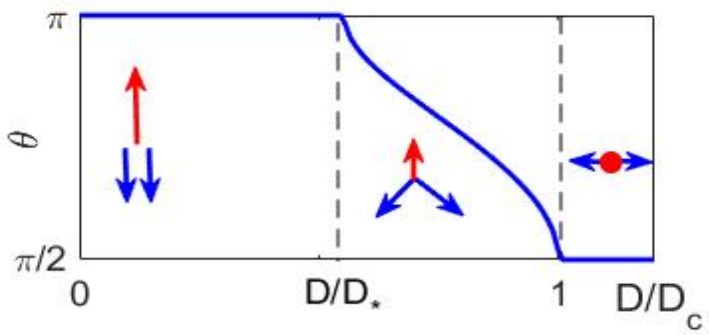


Рис. 1. Фазовая диаграмма SU(3) ферримагнетика от параметра одноионной анизотропии при I/J>1, θ-угол между подрешётками со спинами S=1 и S=1/2.

В спин-волновом приближении рассчитан спектр спиновых возбуждений и проведена классификация его 4-х ветвей. Показано, что при $D<D_*$ имеется одна голдстоуновская мода, а при $D_*<D<D_c$ таких мод становится две. Для $D>D_c$ две высокоэнергетические оптические ветви подрешётки с S=1 оказываются вырожденными, сливаясь в одну ветвь.

Литература:
[1] Матвеев В. М., ЖЭТФ Т. 38, С. 813-818 (1973).
[2] Онуфриева Ф. П., ЖЭТФ Т. 89, С. 2270-2281 (1985).
[3] Вальков В. В., Валькова Т.А., ЖЭТФ Т.99, С. 1881 (1991).

Кинетика реакции диспропорционирования в пленке GeO

Самусь Алексей Дмитриевич, Еремин Леонид Аркадьевич
Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Данная работа посвящена исследованию кинетики реакции диспропорционирования в плёнках монооксида германия.

В ходе работы были изготовлены тонкопленочные образцы GeO на стеклянных подложках методом термического испарения в вакууме порядка 10^{-5} Торр. Полученные образцы отжигались при атмосферном давлении, в диапазоне температур от 280 ÷ 390 °*C*. При отжиге происходит реакция $2\mathrm{GeO} \rightarrow \mathrm{Ge} + \mathrm{GeO}_2$, при этом изначально прозрачная пленка темнеет из-за формирования кластеров германия, что позволяет отслеживать реакцию по изменению цвета образца. Таким образом, видеосъемка этого процесса была использована, как метод исследования кинетики реакции. Процесс фиксировался на камеру *Panasonic hc-v*750. Для освещения использовалась *LED* панель. Данные цвета записывались в форме *RGB* (8 бит) для определенного пикселя на изображении с частотой 50 кадров в секунду.

Полученные кривые интенсивности цвета пикселя от времени характеризуют кинетику формирования Ge в процессе реакции. Полученные времена реакции из данных кривых (обозначены зеленым на рис.1) были интерпретированы с помощью уравнения $\tau = \tau_0 + b \cdot e^{\frac{E_a}{kT}}$ (сплошная черная линия на рис. 1), где второе слагаемое (синяя пунктирная линия) отражает характерное время реакции от температуры пленки. Поскольку вклад, связанный с кинетикой химической реакции, резко убывает с ростом температуры, отжиг при температурах 370 ÷ 390℃ приводит к протеканию процесса за время близкое к τ_0 (рис.1). Аппроксимация по методу наименьших квадратов позволяет оценить энергию активации реакции как $E_a = 0.7 \pm 0.1\ eV$. Полученная энергия активации хорошо согласуется с литературными данными [1,2].

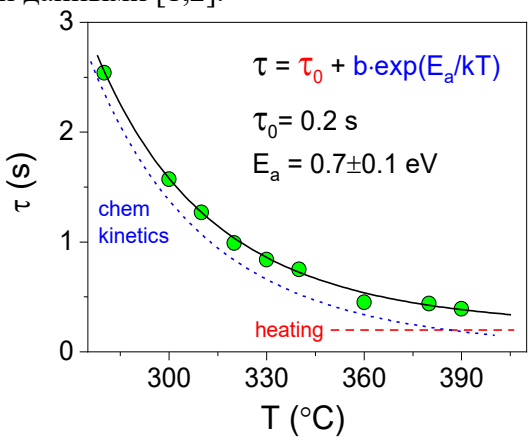


Рис. 2. – Время превращения в пленке GeO от температуры отжига.

Литература:

[1] Kai Wang S., Liu H. G., Toriumi A. Kinetic study of GeO disproportionation into a GeO2/Ge system using x-ray photoelectron spectroscopy //Applied Physics Letters. – 2012. – Т. 101. – №.6.

[2] Володин В. А. Определение энергии активации реакции диспропорционирования аморфной пленки GeOx на кварцевой подложке с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния света //Журнал технической физики. – 2023. – Т. 93. – №. 8.

Сорбционная и каталитическая активность магнитных наночастиц Fe_3O_4@Ag

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

В работе исследованы Fe_3O_4-Ag наночастицы (НЧ), синтезированные сольвотермическим методом. Морфология образовавшихся частиц определяется длительностью термолиза (3, 6 и 8 часов) при определенной температуре. Значительная величина намагниченности насыщения и малая коэрцитивная сила НЧ, синтезированных при длительности термолиза 6 и 8 часов, позволяют проводить многократную магнитную сепарацию НЧ из водной среды без вовлечения процессов их взаимодействия. Образцы продемонстрировали, практически мгновенную адсорбцию катионного красителя, при этом величина адсорбции определялась количеством активных центров, образовавшихся при синтезе. Каталитическую активность НЧ исследовали в присутствии $NaBH_4$ для анионных азо-красителей – Конго красный (CR) и Метиловый оранжевый (MO), и катионных – Метиленовый синий (MB) и Радомин С (RhC). В случае красителей CR и MO происходила их необратимая деградация под действием наночастиц и $NaBH_4$. Для MB и RhC происходил переход в бесцветные восстановленные формы молекул красителей.

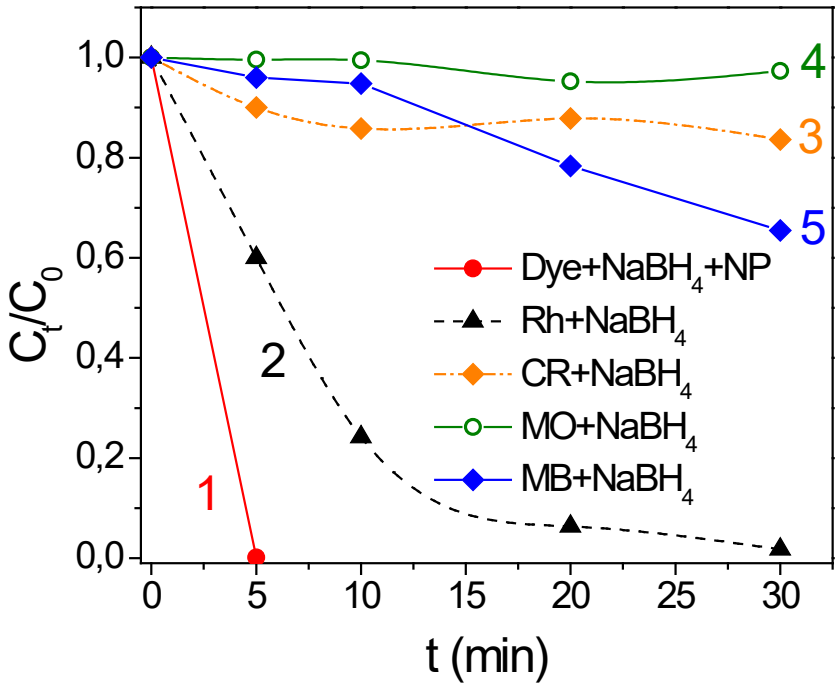


Рис. 1. Скорость деградации красителей в зависимости от времени, для растворов с $NaBH_4$ в присутствии НЧ (кривая 1) и без НЧ, кривые 2-5.

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-22-10025.

Литература:

[1] F. Benali , B. Boukoussa, Nour-El-HoudaBenkhedouda, A. Cheddad, I. Issam, J. Iqbal, M. Hachemaoui, M. Abboud and A. Mokhtar, Polymers 14, 4829, (2022).
[2] A.S. Ertürk, G. Elmaci, M.U. Gürbüz, Turk J Chem, 45,1968-1979, (2021).

Спин-ориентационный переход в редкоземельных ортоферритах: влияние внешних факторов и перспективы его использования

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

В классе редкоземельных ороферритов ($RFeO_3$) было обнаружено множество уникальных свойств и эффектов, таких как спонтанный спин-ориентационный переход (СС-ОП) [1, 2], возникновение «теневой моды» в магнонном спектре *R* иона [3], формирование квазиодномерных магнитных структур [4] и другие. Создание макроскопической модели, описывающей взаимодействие между подсистемами металла и *R* иона – важная фундаментальная задача физики конденсированного состояния. Явление СС-ОП перспективно для приложений в устройствах магнитной памяти, «spin switching device» и т.д.

В докладе представлены результаты исследований монокристаллов $TmFeO_3$ [3], $TbFeO_3$ [2] и $YbFeO_3$ [5], выполненных с применением передовой времяпролетной нейтроновской спектроскопии. С помощью этой методики удалось обнаружить уникальные эффекты для каждого соединения, в частности, исследование с применением ячейки давления при варьировании магнитного поля и температуры продемонстрировало влияние приложенного давления на температурную ширину перехода СС-ОП (рис.1а.) в $YbFeO_3$. Другой важный результат был получен в соединениях ряда $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ [6], где при замещении в 3d подсистеме для $HoFe_{0.6}Mn_{0.4}O_3$ была получена температура СС-ОП 294 K, что позволяет говорить о перспективах использования эффекта СС-ОП в устройствах.

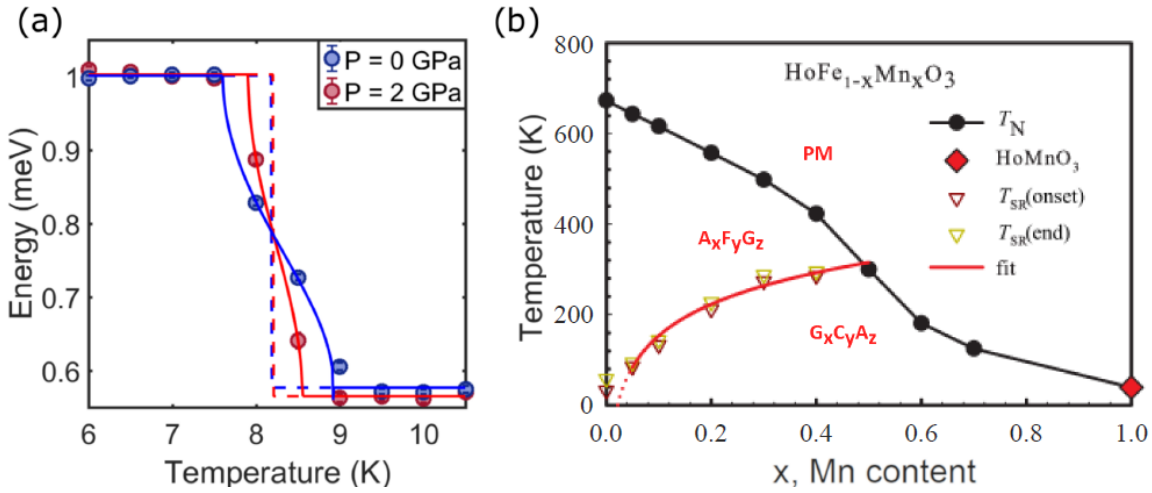


Рис. 1. (a) СС-ОП в $YbFeO_3$*, полученный из данных нейтронной спектроскопии и демонстрирующий зависимость ширины перехода от приложенного давления. (b) Зависимость температуры Нееля и температуры СС-ОП от концентрации ионов* Mn^{3+} *в* $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$.

Литература:
[1] White R.L., J. Appl. Phys. 40, 1061 (1969).
[2] Skorobogatov S. A. et al., Physical Review B. 106, 184404 (2022).
[3] Skorobogatov S. A. et al., Physical Review B. 101, 014432 (2020).
[4] Nikitin S. E. et al., Physical Review B. 98, 064424 (2018).
[5] Skorobogatov S. A. et al., Physical Review B. 108, 054432 (2023).
[6] Шайхутдинов К. А и др. ЖЭТФ том 165, номер 5, (2024), принята в печать.

Суперпарамагнитная блокировка и магнитные взаимодействия в наноферригидрите адсорбированном на биоминерализованных нанокристаллитов Fe_3S_4

Смородина Екатерина Дмитриевна
СФУ, ИИФиРЭ

В работе получен композиционный материал на основе субмикронных кристаллитов грейгита (Fe_3S_4) с nanorod shape, на которых адсорбированы наночастицы ферригидрита ($Fe_2O_3 \cdot nH_2O$). Синтез выполнен путём биоминерализации бактериальной стенки экстремофильных сульфатредуцирующих бактерий культуры *Desulfovibrio sp. A2*. Фазовый состав подтверждён методами рентгеновской порошковой дифракции, электронной дифракции, FT-IR, EXAFS и мёссбауэровской спектроскопии. Результаты магнитных измерений подтверждают наличие в образце двух магнитных фаз: субмикронного грейгита и наноразмерного ферригидрита. Постоянная атомная доля кристаллической фазы грейгита по данным мёссбауэровской спектроскопии в интервале 4–300 К (~20%) указывает на заблокированный магнитный момент nanorod shape Fe_3S_4. Показано, что nanorod shape кристаллиты Fe_3S_4 имеют сильную магнитную связь с адсорбированными наночастицами $Fe_2O_3 \cdot nH_2O$ (E_{int} ~ 1200kB). Это приводит к сильно затянутой суперпарамагнитной (СПМ) релаксации магнитных моментов наночастиц ферригидрита. Как следствие, мы наблюдаем значительное увеличение температуры блокировки, которая достигает по данным мёссбауэровской спектроскопии T_B =140 К (72 К по магнитным данным).

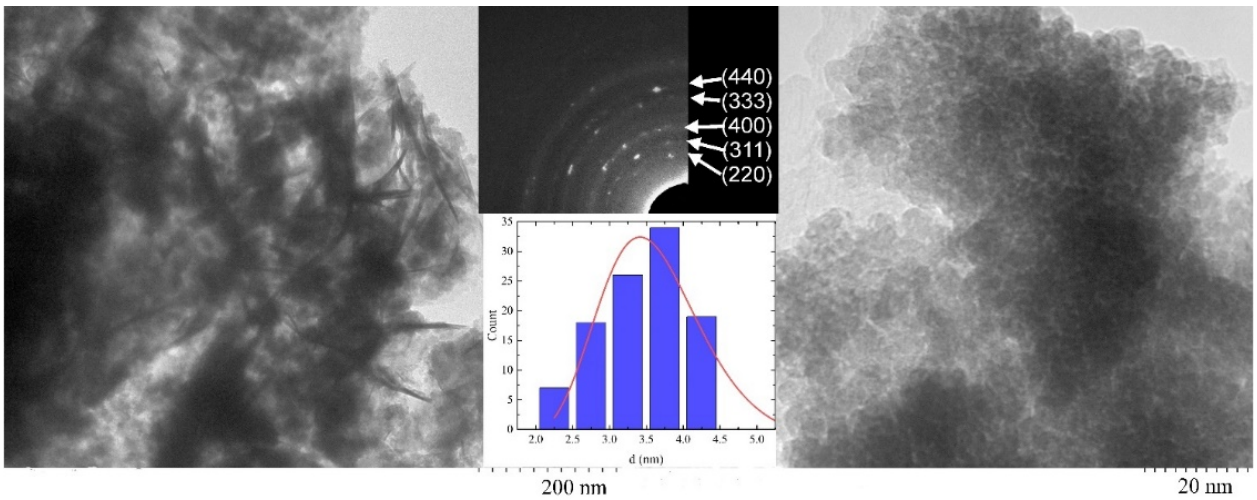


Рис. 1. Микрофотографии образца на различных масштабах. Слева показаны Fe_3S_4, а справа наночастицы ферригидрита. На вставке показана электронная микродифракция (SAED) и гистограмма для наночастиц ферригидрита.

Благодарности
Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, проект №. 22-24-00601

Литература:

[1] I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, C. R. Lin, S. Z. Lu, M. O. Shaikh, K. O. Funtov, T. V. Dmitrieva, S. G. Ovchinnikov, R. Ivantsov, Magnetic, structural, and electronic properties of iron sulfide Fe3S4 nanoparticles synthesized by the polyol mediated process. Journal of nanoparticle research, 15(1), (2013).
[2] Yu.V. Knyazev, D.A. Balaev, S.V. Stolyar, O.A. Bayukov, R.N. Yaroslavtsev, V.P. Ladygina, D.A. Velikanov, R.S. Iskhakov, Magnetic anisotropy and core-shell structure origin of the biogenic ferrihydrite nanoparticles. Journal of Alloys and Compounds 851 156753 (2021).

Влияние катионного беспорядка на магнитные свойства Co_2AlBO_5

Тарасова Анастасия Сергеевна
Сибирский федеральный университет

Монокристаллы Co_2AlBO_5 получены методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава в системе: 71%($Bi_2Mo_3O_{12}$ + Na_2O + 2.7B_2O_3) + 29%(2CoO + 0.5Al_2O_3 + 0.5B_2O_3). Измерения рентгеновской дифракции показали, что соединение кристаллизуется в ромбической симметрии, пространственная группа *Pbam* (№55). Параметры решетки a = 9.2072(3)Å, b = 12.0676(4) Å, c = 3.0017(1) Å, V = 333.515(19) Å^3. Имеется четыре кристаллографически неэквивалентные позиции по металлу (2a, 2d, 4g, 4h), пять неэквивалентных позиций по кислороду O1-O5 (4g, 4h) и одна позиция бора B (4g). Атомы алюминия конкурируют с атомами кобальта в соотношении Co:Al = 0.78:0.22 (M1), 0.53:0.47 (M2), 0.86:0.14 (M3) и 0.50:0.50 (M4). В результате, соединение характеризуется выраженным катионным беспорядком.

Измерения статической намагниченности выполнены в поле 600 Э, направленном параллельно кристаллографическим *b*- и *c*- осям. Соединение испытывает два магнитных перехода при T_1 = 41 K, T_2 = 20 K (Рис. 1). При T > 150 K магнитная восприимчивость подчиняется закону Кюри-Вейсса. Параметры подгонки вдоль *b* оси: χ_0 = (7.4±0.5)×10^{-3} emu/mol, C = 6.2±0.1 emu·K/mol, μ_{eff} = 4.97±0.02 μ_B/Co^{2+}, θ = -14.5±0.5 K.

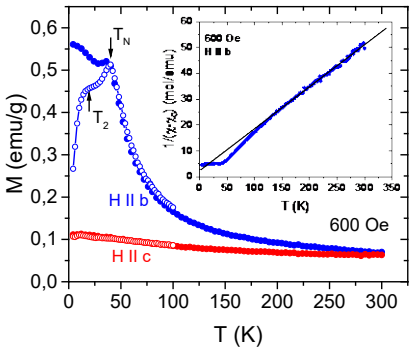


Рис. 1. Температурные зависимости намагниченности Co_2AlBO_5, измеренные в режимах FC, ZFC (H = 600 Э). Вставка: температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости вдоль b-оси.

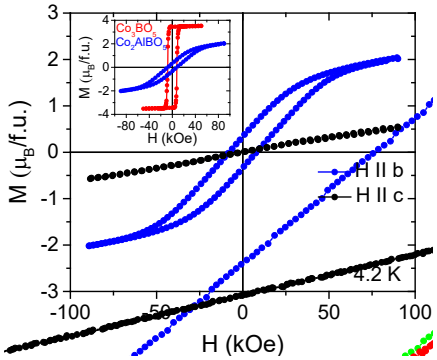


Рис. 2. – Полевые зависимости намагниченности монокристаллов Co_3BO_5 и Co_2AlBO_5, измеренные вдоль b- и c- осей (T=4.2 K). Вставка: сравнение кривых намагничивания Co_3BO_5 и Co_2AlBO_5.

Изотермы намагниченности Co_2AlBO_5, измеренные вдоль *c*-оси, представляют собой линейные зависимости типичные для антиферромагнетика, тогда как вдоль *b*-оси кривые *M*(*H*) — это температурно-зависимые петли гистерезиса (Рис. 2). С уменьшением температуры коэрцитивное поле растет, достигая величины H_c = 8 кЭ при T = 4.2 K. В сравнении с Co_3BO_5 [1], замещение немагнитных ионов кобальта Co^{3+} (S=0) диамагнитными ионами Al^{3+} приводит к эффекту катионного беспорядка, который вызывает изменение магнитной анизотропии и усиление антиферромагнитных корреляций. Катионный беспорядок индуцирует появление дополнительного низкотемпературного магнитного перехода при T_2, вероятно связанного с упорядочением одной или нескольких разбавленных магнитных подрешеток.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №24-12-20012 https://rscf.ru/en/project/24-12-20012/ при финансовой поддержке Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки. Автор выражает благодарность соавторам работы: Ю.С. Гохфельд, А.Д. Васильеву, Е.В. Еремину и научному руководителю Н.В. Казак.

Литература:

[1] Bartolomé J., Arauzo A., Kazak N.V., et al. Phys. Rev. B 83, p. 144426 (2011).

Связь магнитных и магнитоэлектрических свойств монокристаллов редкоземельных оксиборатов со структурой хантита с составами растворов-расплавов

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

Монокристаллы, полученные высокотемпературными методами, обладают уникальными физическими свойствами и вызывают большой интерес [1,2].

Целью исследования являлась разработка технологии воспроизводимого выращивания высококачественных монокристаллов редкоземельных оксиборатов со структурой хантита $NdSc_3(BO_3)_4$, $GdFe_3(BO_3)_4$ и $Ho_{0.5}Nd_{0.5}Fe_3(BO_3)_4$ и исследование зависимости их магнитных и магнитоэлектрических свойств от условий роста.

Рост проводился в двух различных раствор-расплавных системах: $Bi_2Mo_3O_{12}$ – $R^1R^2M_3(BO_3)_4$ и Li_2WO_4 - $R^1R^2M_3(BO_3)_4$ (табл. 1).

Таблица 1. Растворы расплавы со стехиометрическим соотношением кристаллообразующих окислов.

$NdSc_3(BO_3)_4$	80%масс.{$Bi_2Mo_3O_{12}$ + $2B_2O_3$ + $3Li_2O$ + $0,6Nd_2O_3$} + 20%масс.$NdSc_3(BO_3)_4$
	88% вес. {Li_2WO_4 + $3B_2O_3$ + $0,6Nd_2O_3$} + 12%вес. $NdSc_3(BO_3)_4$
$GdFe_3(BO_3)_4$	88% вес. {Li_2WO_4 + $3B_2O_3$ + $0,3Gd_2O_3$]+ 12% вес. $GdFe_3(BO_3)_4$
$Ho_{0,5}Nd_{0,5}Fe_3(BO_3)$	80% вес. {$Bi_2Mo_3O_{12}$ + $3B_2O_3$ + $0,5Nd_2O_3$} + 20%вес. $Ho_{0,5}Nd_{0,5}Fe_3(BO_3)_4$
	79% вес. {Li_2WO_4 + $3,5B_2O_3$ + $0,4(0,5Nd_2O_3$ + $0,5\ Ho_2O_3)$} + 21%вес. $Ho_{0,5}Nd_{0,5}Fe_3(BO_3)_4$

Магнитные и магнитоэлектрические свойства были исследованы на PPMS (Quantum Design) в диапазоне температур 4.2-300 K и магнитных полях до 9 T. При высоких температурах для обоих составов намагниченность подчиняется закону Кюри−Вейсса. Экспериментально найденные парамагнитные температуры Кюри значительно отличаются, подчеркивая анизотропный характер магнитных свойств (табл. 2):

Таблица 2. Парамагнитные температуры Кюри, эффективный магнитный момент $GdFe_3(BO_3)_4$ и $NdSc_3(BO_3)_4$ [3].

Р-р/параметры	T_N (K)	$\theta_{\parallel}$ (K)	$\theta_{\perp}$ (K)	μ_{eff} (μ_B)
$GdFe_3(BO_3)_4$	37.2	-44.5	-43.8	12.96
$GdFe_3(BO_3)_4$:Bi	36.4	-43.9	-43.2	12.81
$NdSc_3(BO_3)_4$		-52.3	-31.1	3.94
$NdSc_3(BO_3)_4$:Bi		-41.7	-27.6	3.74

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки и Российского научного фонда в рамках проекта № 22-12-20019.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Еремину Е.В. научному руководителю и Гудим И.А. научному консультанту.

Литература:

[1] Hinatsu Y., Doi Y., Ito K. et al. // J. Solid State Chem. 2003. V. 172. P. 438.

[2] Звездин А.К., Кротов С.С., Кадомцева А.М. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2005. V. 81. № 6. P. 335.

[3] Е.В. Еремин, А.А. Дубровский, И.А. Гудим, В.Р. Титова, М.В. Меркулов. Магнитные и магнитоэлектрические свойства скандобората $NdSc_3(BO_3)_4$ // ФТТ. – 2021. – Т. 63, № 7. – С. 911-914.

Нанофильтрация органических красителей с помощью керамических мембран модифицированных углеродом

Харченко Иван Александрович
Институт вычислительного моделирования, ФИЦ КНЦ СО РАН,
Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время керамические материалы находят широкое применение в мембранных технологиях разделения смесей и получения чистых веществ. Одним из перспективных приложений керамических мембран является водоподготовка и очистка сточных вод. Цель данной работы - исследование фильтрационных свойств органических красителей с помощью керамических мембран.

В данной работе представлена методика получения новых типов керамических материалов [1]. Основу мембраны составляет подложка, на поверхности которой формируется селективный слой. Керамические подложки получены на основе узкой фракции дисперсных микросфер летучих зол. Для нанесения промежуточного слоя на подложку использовались нановолокна оксида алюминия, которые наносились методом вакуумной фильтрации с последующей термообработкой. Электропроводность селективного слоя достигалась за счет осаждения углеродных слоев на нановолокна оксида алюминия методом химического осаждения из газовой фазы. В качестве прекурсора и газа-носителя использовались пары этанола и аргон соответственно.

Эксперименты по фильтрации проводили на лабораторной установке, состоящей из фильтрационной ячейки УФЯ-25-400 (НПК «Биотест», г. Кириши, Россия), компрессора, регулятора давления, весов и магнитной мешалки. Исследуемый раствор заливался в ячейку, расположенную на магнитной мешалке. В верхнюю часть ячейки подавался сжатый воздух от компрессора через регулятор давления, на котором задавалось требуемое давление в ячейке. Зависимость потока пермеата от времени регистрировалась с помощью весов, соединенных с компьютером. Задерживающие свойства мембран с селективным слоем исследовались путем фильтрации водных растворов красителей Dextran blue 70 кДа и Dextran blue 500 кДа (200 мг/л) при давлении 4 бар. В течение эксперимента собиралось до 5 проб пермеата объемом от 10 до 50 мл. Концентрацию красителей в исходном растворе и пробах пермеата определяли фотометрическим методом на длине волны 620 нм.

На основании полученных результатов были сделаны следующие выводы:1) для Dextran70 поток пермеата раствора изменялся от 100 л/м^2 ч до 36 л/м^2 ч в течение 3 часов, а коэффициент задержания составил R=95.9–99.9%; 2) для раствора Dextran500 поток изменялся от 125 л/м2 ч до 35 л/м2ч, а коэффициент задержания составил 98.6–99.8 %. Концентрация растворов красителей, оставшихся в ячейке после фильтрации, составила 457 мг/л для Dextran70 и 655 мг/л для Dextran500. Увеличение концентрации остаточных растворов свидетельствует о том, что молекулы декстрана задерживаются мембраной, при этом часть молекул, сорбируется в селективном слое, снижая проницаемость мембраны с течением времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-19-00269 «Электро / баромембранное разделение многокомпонентных растворов электролитов на основе электропроводящих нанофильтрационных мембран. Физико–химический анализ материалов был выполнен в Красноярском региональном центре коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Выражаем благодарность соавторам работы – Н.П. Фадеевой, И.Р. Волковой, Е.В. Фоменко, Г.В. Акимочкиной, Е.В. Елсуфьеву.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Рыжков И.И.

Литература:

[1] E. V. Fomenko, G. V. Akimochkina, A. G. Anshits, N. P. Fadeeva, I. A. Kharchenko, E. V. Elsuf'ev, K. A. Shabanova, A. A. Maksimova, and I. I. Ryzhkov. Ceramic Substrates for Filtration Membranes Based on Dispersed Fly Ash Microspheres, Membranes and Membrane Technologies, 2024, Vol. 6, No. 2, pp. 71–83.

Самопроизвольное вращение магнитов над высокотемпературным сверхпроводником

Шаломов Степан Юрьевич
Физико-математическая школа Сибирского Федерального Университета

Левитация постоянного магнита Nd–Fe–B цилиндрической формы над высокотемпературным сверхпроводником, охлаждаемым жидким азотом, сопровождается спонтанными колебаниями, переходящими в устойчивое вращение с постоянной частотой. Причиной вращения является неоднородность намагниченности магнита, вызванная градиентом температур вдоль вертикальной оси и немонотонной температурной зависимостью намагниченности Nd–Fe–B [1,2].

Проведено измерение частот вращения 10 различных магнитов трех различных классов. Левитация магнитов происходила над сверхпроводящей платформой, собранной из композитных сверхпроводящих лент (REBCO), произведенных компанией SuperOx. Полученные результаты подтверждают, что скорость вращения управляется изменением намагниченности верхней и нижней половин магнитов. Впервые установлено, как контроль температуры вдоль вертикали магнита позволяет регулировать частоту вращения. К замедлению частоты вращения приводит либо охлаждение нижней половины магнита до температуры кипения азота, либо поддержание одинаковой температуры в нижней и верхней половинах. Нагрев верхней половины ускоряет вращение магнита.

Обнаружено, что для магнитов с большим моментом инерции характерны меньшие частоты вращения. Однако для самых малых исследуемых магнитов с диаметром 5 мм. спонтанное раскачивание не переходило во вращение. Такое поведение вероятно вызвано малым градиентом температур вдоль вертикального диаметра и быстрым теплообменом в малых магнитах.

Таблица 1. Размеры, масса и частота вращения магнитов Nd–Fe–B.

	№	Диаметр, mm	Толщина, mm	Масса, g	Частота, sec^{-1}
I	*1*	5.0	1.8	0.25	0
	2	10.0	10.0	6.1	2.2
	3	12.0	2.8	2.3	2.1
	4	20.0	3.0	7.5	1.8
II	*5*	11.9	10.0	8.3	1.6
	6	15.0	5.0	6.7	1.5
	7	20.0	5.0	11.8	1.1
	8	20.1*	3.0	5.3	1.1
	9	25.0	2.9	10.7	0.6
III	*10*	9.0	6.4	3.0	1.2

*Полый цилиндр с диаметром отверстия 10 mm.

Благодарности:

Автор выражает благодарность соавторам работы: Петрову М.И., Сультимову Д.Б. и научному руководителю Гохфельду Д.М.

Литература:

[1] Martini G., Rivetti A., Pavese F., Adv. Cryog. Eng., V. 35, P. 639 (1990).

[2] Ma K.B., Liu J.R., McMichael C., Bruce R., Mims D., Chu W.K., J. Appl. Phys., V. 70, P. 3961 (1991).

Секция «Химия и химические технологии»

Сульфатирование агарозы сульфаматом аммония

Бережная Ярослава Дмитриевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Агароза – биоразлагаемый полисахарид с молекулярной массой 120 кДа, выделяемый из морских водорослей. Агароза состоит из сахаров D-галактозы и 3,6-ангидро-L-галактозы. Сульфатирование агарозы позволяет синтезировать её сульфаты, обладающие широким спектром биологической активности [1].

В настоящее время актуальна разработка более экологичных методов сульфатирования агарозы без использования кислот, например, с использованием солей и комплексных соединений. Сульфамат аммония – перспективный сульфатирующий агент.

В данной работе рассмотрено влияние различных активаторов и катализаторов сульфатирования агарозы сульфаматом аммония в 1,4-диоксане на состав образующегося сульфата агарозы. Данные по влиянию разнообразных активаторов и катализаторов на содержание серы, полученных сульфатов агарозы приведены в таблице 1.

Таблица 1. Влияние активатора/катализатора на содержание серы сульфата агарозы в процессе сульфатирования сульфаматом аммония.

№	Активатор/катализатор	S, %	DS*
1	Без активатора	2,1	0,215
2	Мочевина	7,4	0,926
3	Перманганат калия	13,2	2,179
4	*Amberlyst*–15 ®	14,6	2,611
5	Оксид алюминия	6,7	0,815
6	Диоксид титана	7,3	0,910
7	*Sibunit*-4 ®	12,9	2,095

*-степень замещения

В сравнении с сульфатированием сульфаминовой кислотой, механизм реакции у сульфамата аммония с твердыми катализаторами отличается. Твердые катализаторы способствуют разрыву связей S–N в сульфамате аммония и образованию триоксида серы. В присутствии 1,4-диоксана триоксид серы превращается в сульфатирующий комплекс с 1,4-диоксаном, который, в свою очередь, сульфатирует молекулу агарозы по гидроксильной группе.

Наличие сульфатной группы в молекуле агарозы подтверждено ИК-спектроскопией появлением соответствующих полос поглощения, а также элементным анализом. Исходная и сульфатированная агароза исследована методами РФА, атомно-силовой микроскопией и гель-проникающей хроматографией.

Показано, что сульфатирование агарозы на твердых катализаторах с бренстедовскими кислотными центрами (*Amberlyst*-15®) эффективнее, чем при использовании других твердых катализаторов.

Данное исследование выполнено в рамках государственного задания №.0287-2021-0017 для Института химии и химической технологии Сибирского отделения РАН, на оборудовании Красноярского краевого центра коллективного пользования Красноярского научного центра Сибирского отделения РАН.

Литература:

[1] Zhao X. et al. Carbohydrate polymers. V.176, P.29-37 (2017).

Физико-химические основы получения и функционализации природных полисахаридов из древесины ели Picea abies

Боровкова Валентина Сергеевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Тенденция к переработке и использованию лигноцеллюлозной биомассы (ЛЦБ) для производства ценных химических продуктов, является перспективной, но весьма сложной задачей [1]. В последние годы именно нецеллюлозные полисахариды (НПС) из ЛЦБ привлекают значительное внимание при разработке функциональных полимерных материалов путем химической модификации [2]. При этом, изучение физико-химических основ получения таких материалов является разносторонней и масштабной задачей, решение которой позволяет установить влияния качественных и количественных характеристик, условий синтеза на структуру и, как следствие, свойства конечного продукта.

В данной работе предложен экологически безопасный способ выделения НПС из древесины ели *Picea abies* методом окислительной делигнификации в среде «уксусная кислота – пероксид водорода – вода», а также исследовано влияние физико-химических параметров растворителя на процесс сульфатирования НПС комплексами на основе «сульфаминовой кислоты – мочевины» с установлением механизмов и порядка реакции.

В результате выделения был получен галактоглюкоманнан (ГГМ) с максимальным выходом 11,7 мас.%, молекулы которого имеют конформацию подвижного клубка с разветвленным строением, на что указывают данные гель-проникающей хроматографии. В процессе изучения влияния растворителей было установлено, что использование менее полярного растворителя 1,4-диоксана (ε_0=2,3) с низкой основностью ($-lgK_b$=16,9) позволяет получать продукт с высоким содержанием серы (до 12,7 мас.%). При исследовании сульфатирования ГГМ в оптимальных условиях было установлено, что данный процесс описывается уравнением нулевого порядка и проходит в четыре этапа (Рис.1А) и согласно механизму (Рис.1Б), который наглядно демонстрирует влияние продолжительности процесса на степень сульфатирования (СС) и молекулярно-массовые характеристики (ММХ).

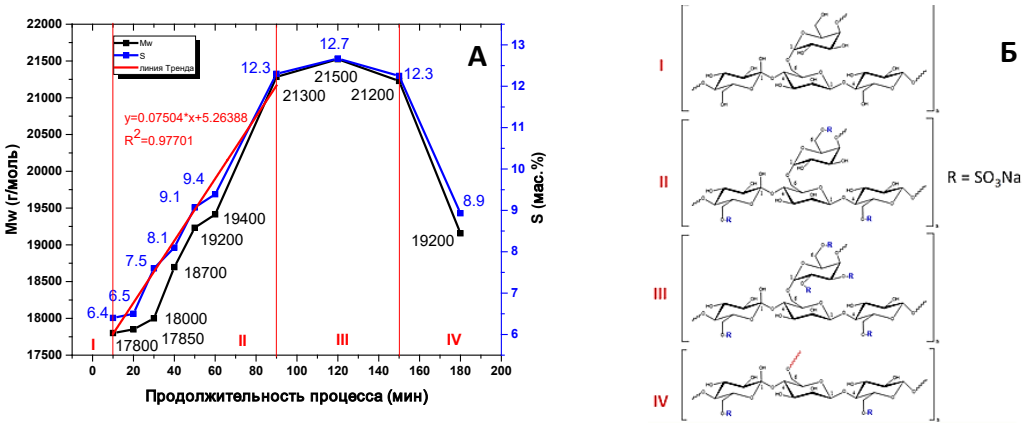


Рис.1.А – Зависимость СС и ММХ, выраженная уравнением нулевого порядка, от продолжительности процесса; Б – Механизм протекания процесса сульфатирования ГГМ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-73-10212. Автор выражает благодарность научному руководителю и соавтору работы Маляру Ю.Н., а также Казаченко А.С.

Литература:

[1] Zhan Q., Lin Q. et al. Bioresource Technology, V.376, P.128887 (2023).
[2] Rao J., Lv Z. et al. Progress in Polymer Science, V.140, P.101675 (2023).

Моноядерные (POCOP^{Ph}) пинцерные комплексы платины (II) с терминальными лигандами – потенциальные катализаторы электрохимического восстановления протонов до водорода

Волкова Дарья Сергеевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Пинцерные комплексы переходных металлов являются актуальными объектами современных исследований. Одна из сфер их применения – электрохимия, где они демонстрируют высокую эффективность, как катализаторы электрохимического восстановления протонов до водорода [1]. В тоже время, влияние терминальных лигандов, входящих в состав таких комплексов, на их физико-химические свойства недостаточно изучено. Поэтому нами была изучена серия новых пинцерных комплексов платины (II) (POCOP^{Ph})Pt-X (X = Cl (**1**), Br (**2**), I (**3**), CN (**4**), C≡C-Ph (**5**), C≡C-(4-$C_6H_3N_2S$) (**6**)), методами циклической вольтамперометрии на Pt, стеклоуглеродном (СУ) электродах и полярографии на р.к.э. с целью установления влияния природы терминальных лигандов в **1-6** на окислительно-восстановительные свойства и каталитическую активность комплексов в реакциях электрохимического восстановления протонов до водорода (ЭВП).

Установлено, что комплексы **1-6** в ацетонитриле способны как окисляться, так и восстанавливаться. Предложены схемы их редокс-превращений. Окисление **1-6** протекает на Pt и СУ электродах в одну двухэлектронную стадию с изменением степени окисления металла: Pt(II)→Pt(IV). Восстановление **1-6** существенно зависит от материала рабочего электрода, а превращения комплексов в таких условиях протекают по разным механизмам в зависимости от природы терминального лиганда: комплексы **1-5** восстанавливаются по ECE механизму, комплекс **6** по EECE механизму (E – электрохимический, C – химический), с элиминированием терминального лиганда в результате присоединения электронов.

Для исследования возможности комплексов **1-6** катализировать реакции ЭВП изучено их электрохимическое поведение в ацетонитриле в присутствии доноров протонов. Установлено, что редокс-превращения комплексов и их устойчивость в этих реакциях зависят от природы терминального лиганда и количества добавленных протонов. Соединения **1** и **4** достаточно устойчивы в редокс-реакциях в присутствии протонов и способны катализировать реакции ЭВП. Предложена схема ЭВП с участием комплексов **1** и **4**. Электрокаталитическое восстановление протонов до водорода протекает в ацетонитриле через начальное кислотно-опосредованное удаление терминального лиганда из комплекса с образованием связанного с растворителем интермедиата, который катализирует восстановление протонов до водорода.

Таким образом, потенциальными катализаторами реакций ЭВП являются соединения (POCOP^{Ph})Pt-Cl (**1**) и (POCOP^{Ph})Pt-CN (**4**).

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект 121031500209-6). Автор выражает благодарность соавторам работы: Бурмакина Г. В., Зимонин Д.В.

Литература:

[1] S. Kaur-Ghumaan, P. Hasche, A. Spannenberga, T. Beweries, Dalton Trans, V. 48, P. 16322 (2019).

Гидрирование глюкозы на катализаторах Ru/C; влияние кислотности углеродного носителя

Голубков Виктор Александрович
Институт химии и химической технологии СО РАН

Сорбит — сахарный спирт, широко используемый в производстве продуктов питания, средств личной гигиены и медикаментов. Внедрение в производство сорбита стабильных и безопасных катализаторов позволит улучшить эколого-экономические показатели процессов глубокой химической переработки растительного сырья. Рутений наиболее активный катализатор гидрирования карбонильных соединений в воде [1]. Углеродные материалы в качестве носителей имеют ряд преимуществ, в том числе на их поверхности могут быть созданы функциональные группы, позволяющие настраивать химические свойства носителя и катализатора [2].

Нами проведено исследование влияния кислотных групп носителя на размер частиц и гидрирующую активность нанесённого рутения. Приготовлены серии углеродных носителей на основе материалов Сибунит-4 и СМК-3, модифицированные окислением влажным воздухом и сульфированием. Нанесённые рутениевые катализаторы синтезированы методом пропитки по влагоёмкости с последующим восстановлением в токе H_2. Носители и катализаторы охарактеризованы адсорбцией-десорбцией азота, РФА, РФЭС, ПЭМ, кислотно-основным титрованием, pH точки нулевого заряда. Модификация носителя окислением и сульфированием приводит к уменьшению среднего размера частиц металла, что согласуется с данными DFT моделирования.

Катализаторы показали конверсию и селективность в гидрировании глюкозы близкие к 100% (5,5 МПа H_2; 60°C; 90 мин). Увеличение кислотности носителя Сибунит-4 ведёт к увеличению активности, а носителя СМК-3 – к снижению. Катализаторы, содержащие наночастицы Ru размером около 1,6 нм, проявляют наибольшую активность. Для получения такой дисперсии катализаторов на основе Сибунит-4 требуется жесткая окислительная обработка, снижающая размер частиц. Напротив, на СМК-3 отсутствие окислительной обработки ведёт к размеру 1,6 нм и лучшей производительности.

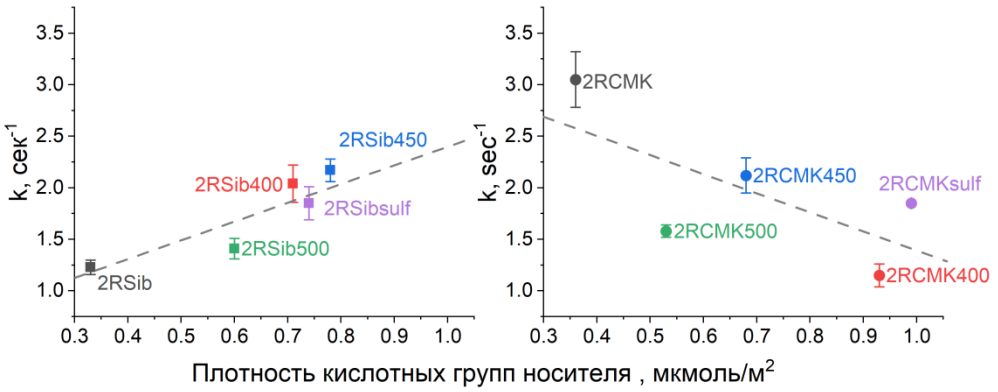


Рис. 3. Зависимость активности катализатора, выраженная константой скорости первого порядка, от плотности кислотных групп на поверхности углеродного носителя.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20269. Автор выражает благодарность соавторам работы: Зайцева Ю. Н., Сычёв В. В., Еремина А. О., Наслузов В. А. и Таран О. П.

Литература:

[1] Gromov N.V., Medvedeva T.B., Rodikova Y.A., Timofeeva M.N., Panchenko V.N., Taran O.P., Kozhevnikov I.V., Parmon V.N., Bioresource Technology, V.319, PP. 87-98. (2021).
[2] Taran O.P., Descorme C., Polyanskaya E.M., Ayusheev A.B., Besson M., Parmon V.N., Catalysis in Industry, V.5, № 2, PP. 164-174 (2013).

Новый подход к изучению механизмов электрохимической конверсии левулиновой кислоты на твердых электродах в неводных средах

Зимонин Дмитрий Валерьевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Левулиновая кислота (ЛК) является одним из основных продуктов кислотного каталитического гидролиза растительной биомассы. Многообразие превращений ЛК, в том числе и электрохимическое гидрирование, обладают большим потенциалом при конверсии ЛК в ценные химические вещества и жидкие биотоплива. В настоящее время практически все исследования в этом направлении проводятся в водных средах. Однако, исследовать механизмы электрохимической конверсии ЛК в водной среде практически невозможно. Показано, что использование апротонных органических растворителей, в частности ацетонитрила, в отличие от водных растворов, позволяет определять количество стадий, число электронов и значения потенциалов полуволн ($E_{1/2}$), и, следовательно, устанавливать механизмы их редокс-превращений.

Методами вольтамперометрии, электролиза при контролируемом потенциале в ацетонитриле и высокоэффективной жидкостной хроматографии изучен процесс электрохимической конверсии-ЛК до γ-валеролактона (ГВЛ) и валериановой кислоты(ВК) на различных электродных материалах (Pt, Rh, СУ, Г, Ni, Al, Cu, Pb) в ацетонитриле в отсутствии и присутствии донора протонов $HBF_4 \bullet Et_2O$.

Установлено, что восстановление ЛК в ацетонитриле в присутствии протонов в зависимости от природы электродного материала может протекать по разным механизмам - с участием атомарного водорода, с образованием протонированной формы ЛК и др. Впервые показано, что направление гидрирования ЛК зависит от разности ($\Delta E_{1/2}$) между $E_{1/2}$ восстановления протонов и ЛК (рис. 1). При больших величинах $\Delta E_{1/2}$ (в случае Pt, Rh, СУ электродов) образуется ГВЛ, при малых (на Pb электроде) – ЛК восстанавливается до ВК. Однако, на Al электроде, несмотря на то, что $\Delta E_{1/2}$ большая, как на Pt электроде, образуется ВК и ГВЛ. Это связано с образованием промежуточных металлорганических соединений.

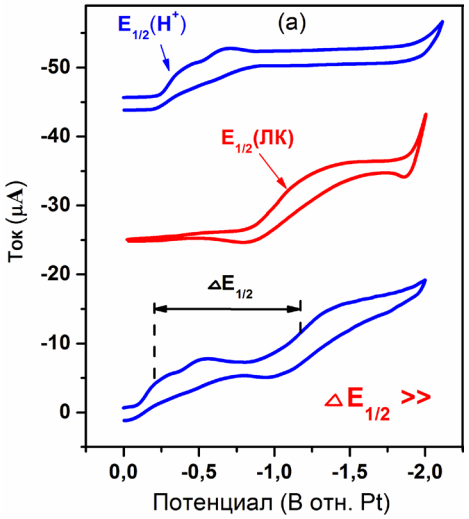


Рис. 1. ЦВА ЛК, HBF_4, и ЛК + HBF_4 (1:1) на Pt электроде

Предложенный подход к изучению механизмов электрохимической конверсии ЛК может быть применен и для других продуктов переработки и компонентов природного органического сырья. Полученные результаты важны для понимания механизмов электрокаталитических процессов их гидрирования и выбора эффективного электрода при получении целевых продуктов.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН. Автор выражает благодарность соавторам работы: Сычев В.В., Бурмакина Г.В.

Фотоэлектрокаталитическая активность модифицированных Cu_2O нанотрубок TiO_2 в реакции разложения воды

Зосько Николай Андреевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Нанотрубки TiO_2, получаемые методом электрохимического анодирования титановой фольги, являются одной из эффективных структур для фотокаталитического разложения воды. Однако, для них до сих пор не решёнными остаются проблемы высокой скорости рекомбинации носителей зарядов и плохой адсорбции видимого света. Ранее сообщалось о различных подходах для повышения чувствительности нанотрубок диоксида титана к видимому свету, включая добавление металлов или неметаллов, сенсибилизацию красителями или модификацию поверхности полупроводниками с меньшей шириной запрещённой зоны. [1,2] Однако, крайне мало внимания уделяется модификации диоксида титана недорогими доступными материалами, которые обладают реальным потенциалом для их широкого применения. Одним из таких материалов является Cu_2O, который представляет собой полупроводник p-типа с запрещенной зоной около 2,2 эВ и, таким образом, может использоваться для формирования гетеропереходов с широкополосными полупроводниками n-типа, что значительно повышает фотоативность последних при освещении видимым светом.

В работе приводятся результаты сравнения фотоэлектрокаталитической активности нативной TiO_2 наноструктуры и наноструктурированных анодных плёнок TiO2, которые были модифицированы Cu_2O методом ЦВА, либо потенциостатическим методом.

Морфологию поверхности исследовали при помощи сканирующей электронной микроскопии, оптические свойства были определены по полученным спектрам диффузного отражения с использованием преобразования Кубелки-Мунка, а также с помощью спектроскопии электрохимического импеданса были определены электрические свойства полученных фотоанодов. Фотоэлектрокаталитическую активность образцов в реакции разложения воды исследовали по эффективности преобразования падающего фотона в электрон (IPCE), которая была получена на основе хроноамперометрических измерений в широком диапазоне видимого и UV спектров. Величина IPCE, определенная при потенциале 0.2 В (ХСЭ), при облучении видимым светом для обычных нанотрубок TiO_2 остаётся крайне низкой и постепенно возрастает с уменьшением длины волны от 0,002% при 700нм, до 0,19% при 450нм и 6,2% при 360нм.

Для фотоанодов, модифицированных Cu_2O методом ЦВА, при облучении видимым светом, величина IPCE в среднем выше в 10-13раз (при 700-500нм) и в 2,5 раза при облучении синим светом (450нм). При дальнейшем синем сдвиге длины волны облучения, модифицированные методом ЦВА фотоаноды имеют примерно в 5 раз меньшие значения IPCE. Также необходимо отметить, что такие фотоаноды имеют ярко выраженный пик IPCE при 450нм, после которого происходит снижение эффективности. В то же время, фотоаноды модифицированные при помощи потенциостатического режима, продемонстрировали в 2-4 раза меньшую фотоактивность, относительно ЦВА активированного образца, при облучении видимым светом (700-500нм) и, при дальнейшем синем сдвиге облучения, наименьшую фотоактивность из всех исследованных образцов.

В ходе хроноамперометрических измерений и экспериментов по длительному облучению образцов было установлено, что модифицированные Cu_2O фотоаноды имеют недостаточную стабильность, что по-видимому может быть связано с фотодеградацией нанесённого Cu_2O.

Литература:

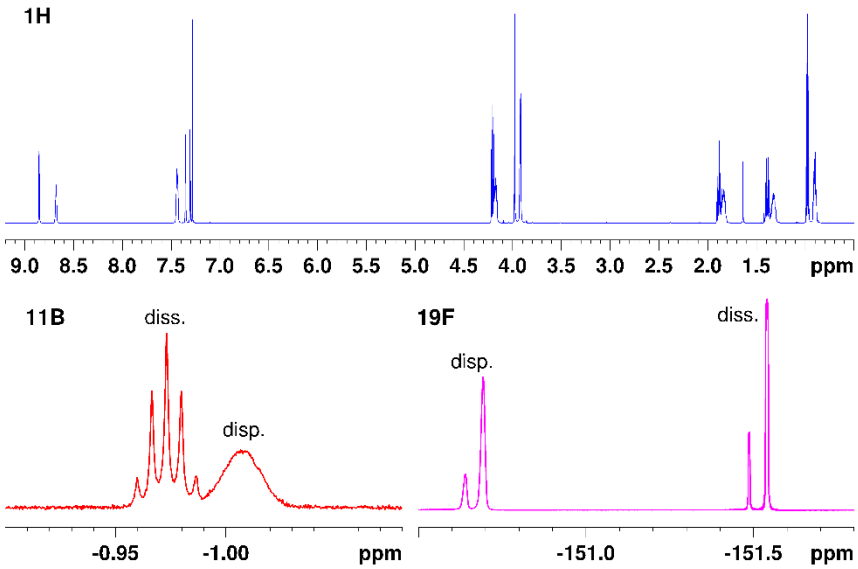
[1] T. Ma, M. Akiyama, E. Abe, and I. Imai, Nano Lett., V. 5, PP. 2543 (2005).
[2] B. H. Meekins and P. V. Kamat, ACS Nano, V.3, PP. 3437 (2009).

Исследование фазового состава и динамических характеристик ионной жидкости [BMIM]BF_4 методами ЯМР спектроскопии и диффузометрии

Иваненко Тимур Юрьевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Ионные жидкости (ИЖ) – это особый класс жидкостей, полностью состоящих из ионов, с температурой плавления ниже 100°С. Благодаря структурному разнообразию и уникальным физико-химическим свойствам применение ИЖ расширилось, среди прочего, на катализ, электрохимию и химическую технологию. Являясь воспроизводимыми и нетоксичными для окружающей среды, ИЖ применяются в интересах «зелёной химии» как растворители в том числе для целлюлоз и компонентов природного органического сырья [1].

Методами ЯМР спектроскопии и диффузометрии было изучено динамическое поведение и фазовый состав ионной жидкости тетрафторбората 1-бутил-3-метилимидазолия ([BMIM]BF_4) в хлороформе (рис. 1).



diss. – растворённая фаза; disp. – дисперсная фаза
Рис. 1 – ЯМР спектры раствора 4 об.% [BMIM]BF_4 в $CDCl_3$.

Получены зависимости химических сдвигов ядер катионного (^{1}H) и анионного (^{11}B, ^{19}F) фрагментов, а также коэффициента диффузии катиона от объёмной доли ИЖ в растворе. Полученные данные демонстрируют сложное фазовое поведение ИЖ в растворе: в диапазоне малых концентраций (до 0.6 об.%) наблюдаются только процессы ассоциации с образованием кластеров, что сопровождается снижением молекулярной подвижности. А при больших значениях содержания ИЖ (> 1 об.%) происходит фазовое разделение системы на раствор ИЖ в $CDCl_3$ и дисперсную фазу, представляющую собой уже раствор $CDCl_3$ в ИЖ.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (FWES-2021-0012) с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Автор выражает благодарность научному руководителю к.ф.-м.н. Морозову Е.В.

Литература:

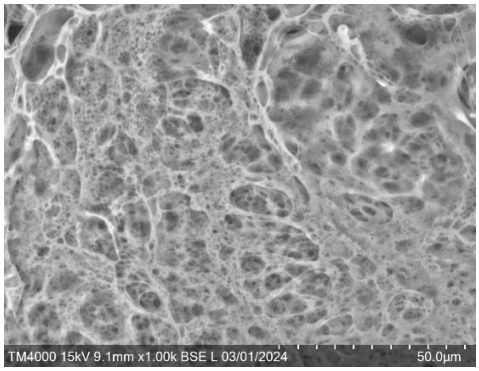
[1] Chen S., Zhang S., Liu X., Wang J., Wang J., Dong K., Sun J., Xu B. Phys.Chem.Chem.Phys., V.16, PP. 5893-5906 (2014).

Влияние пластификаторов на характеристики таннин-содержащих твердых пен

Ионин Владислав Александрович
Институт Химии и Химической Технологии СО РАН

Постепенное истощение запасов ископаемых органических ресурсов, а также изменения климата вызывают растущую потребность в разработке материалов на основе возобновляемых ресурсов. Универсальные благодаря многообразию составов и областей применения (клеи, герметики, покрытия, пены) полиуретаны получают в промышленном масштабе за счет реакции конденсации диизоцианатов с полиолами. Перспективным альтернативой полиуретанам для получения подобных материалов являются легкоизвлекаемые из растительной биомассы таннины [1], которые могут применяться как полимер-основа, в частности, для твердых пен.

Цель данной работы – оценка влияния пропиленгликоля, используемогов в качестве пластификатора, а также модифицирующих добавок на прочность получаемых материалов на основе таннинов.



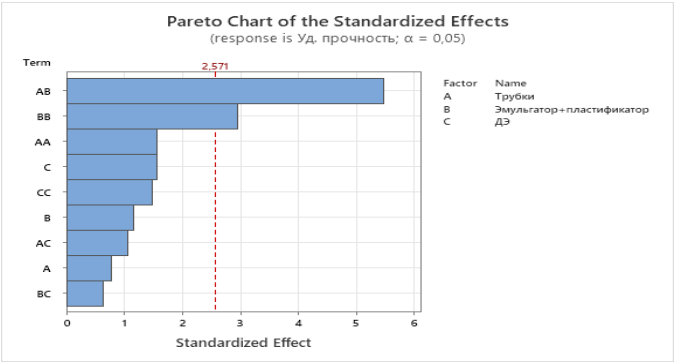


Рис. 4. Морфология поперечного разреза таннин-содержащих твердых пен.

Для решения этой задачи, с использованием плана оптимизации Бокса-Бенкена, синтезировано более 15 образцов таннин-содержащих твердых пен. Варьировались следующие параметры: содержание пропиленгликоля и диэтилового эфира, а также содержание углеродных нанотрубок . результате выявлено, что наибольшим влиянием на выходной параметр (удельную прочность материала) оказывает не содержание вспенивающего агента (диэтилового эфирра), как предполагалось ранее, а совместное влияние двух факторов: количество пластификатора и эмульгатора (пропиленгликоль), способствующее диспергирование компонентов в составе, а также содержание углеродных нанотрубок, используемые в качестве наполнителя для придания прочности получаемому составу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, проект № 20231114-06422, а также частично в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (FWES-2021-0017). Автор выражает благодарность соавторам работы: Таран О.П.

Литература:

[1] Ионин В.А., Казаченко А.С., Елсуфьев Е.В. Вестник Томского государственного университета. Химия. №23. С. 54–66 (2021).

Электрохимическое окисление растительных полисахаридов

Капаева Светлана Николаевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Растительные полисахариды в своем составе содержат большое количество высокореакционных функциональных групп и в связи с этим являются перспективным сырьем для окислительных и восстановительных реакций с получением различных востребованных продуктов. Цель данной работы состояла в электрокаталитической окислительной модификации крахмала и карбоксиметилцелллозы периодатом натрия и калия.

Модифицированный крахмал заметно отличается от природного улучшенными физико-химическими свойствами, что обеспечивает его более широкое применение в различных областях.

Электрокаталитическое окисление крахмала периодатом калия проводили в двухкамерной ячейке с мембраной на платиновом и стеклоуглеродном анодах. Платиновые электроды относятся к универсальным электродным материалам, на которых успешно проводят процессы электроокисления и электровосстановления. Электрокаталитическое окисление крахмала проводили в 0,1М NaOH при оптимальной плотности тока 50 мА/см^2, концентрация субстрата 13,3 г/л, температуре 25°С. Полученный выход альдегидных групп – 40%, карбоксильных – 0,15%. На аноде из стеклоуглерода с предварительной ультразвуковой обработкой раствора при плотностях тока 15,25,50 мА/см^2 выход альдегидных групп составляет 3,56 и 20% соответственно.

Карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ) - одно из основных производных целлюлозы, которая является природным полисахаридом и одним из лучших возобновляемых ресурсов. Химическая модификация целлюлозы путем окислительных процессов приводит к получению востребованных продуктов с добавленной стоимостью. Благодаря своим свойствам, таким как биоразлагаемость, нетоксичность и биосовместимость, КМЦ нашла разнообразное применение во многих отраслях промышленности, включая фармацевтическую, косметическую, пищевую и т.п.[2-3].

Электрокаталитическое окисление карбоксиметилцелллозы проводили на диоксидсвинцовом электроде периодатом натрия при плотности тока 80 мА/см^2, время электролиза 5 часов, концентрация субстрата составляла 0,17 г/л, окислителя 0,10 г/л, выход альдегидных групп достигает 60%. Методом ИК-спектроскопии установлено, что в исследуемых образцах в области 1735-1740 см$^{-1}$ обнаружены альдегидные группы.

Работа выполнена в рамках проекта ИХХТ СО РАН (0287-2021-0012) с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

[1] Руськина А. А., Попова Н. В., Науменко Н. В., Вестник южно-уральского государственного университета. Серия: пищевые и биотехнологии, Т. 5, № 3, С. 12-20 (2017).
[2] Coseri S. Carbohydrate polymers, V. 93, №. 1, PP. 207-215 (2013).
[3] Kulikowska A., Wasiak I., Ciach T. Challenges of Modern Technology. V.4. №. 2, (2013).

Исследование природы металл-лигандного взаимодействия в пинцерных комплексах на основе Ni(II) методами квантовой химии

Кормес Елизавета Сергеевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Среди многочисленных полидентатных лигандов, полученных за последние десятилетия, все большее значение приобретают лиганды пинцерного (клешневидного) типа благодаря их особым характеристикам и способности «настраивать» электронные свойства образованных ими комплексов. Такая настройка позволяет увеличивать термодинамическую стабильность металлокомплексных систем, а в некоторых случаях, стабилизировать необычные и неустойчивые степени окисления металлического центра при образовании хелатных металлоциклов[1,2]. Несмотря на такой широкий интерес к пинцерным комплексам, остается открытым вопрос электронного строения таких соединений. В этой связи теоретические подходы, основанные на методах квантовой химии, являются актуальными, поскольку они представляют возможность существенно дополнить результаты экспериментальных исследований.

Целью нашей работы являлось изучение электронного строения и характера взаимодействия никеля (II) с пинцерным лигандом типа *POCOP* и алкильным заместителем 2,1,3-бензотиадиазол, БТД (рис. 1) методами анализа электронного строения: *QTAIM* и *NBO.*

Все квантово-химические расчеты были выполнены с помощью пакета программ *Gaussian09*. Оптимизация геометрии изучаемых структур была выполнена методом функционала плотности с корреляционно-обменным функционалом *TPSSh*. Анализ электронного строения проводился программами *NBO7* и *Multiwfm*.

По данным анализа методами *NBO* и *QTAIM* был установлен смешанный ионно-ковалентный тип взаимодействия *POCOP*-лиганда и 2,1,3-бензотиадиазола с металлическим центром Ni(II). Найдено, что в комплексном соединении [C_6H_3-1,3-$(OPPh_2)_2$]Ni-C≡C-(4-$C_6H_3N_2S$) (рис. 1А) сила взаимодействия Ni(II) с пинцерным лигандом типа *POCOP* больше, по сравнению с силой взаимодействия Ni(II) с алкильным лигандом БТД. В его протонированной форме (рис. 1Б) вклады во взаимодействие со стороны обоих лигандов примерно сопоставимы.

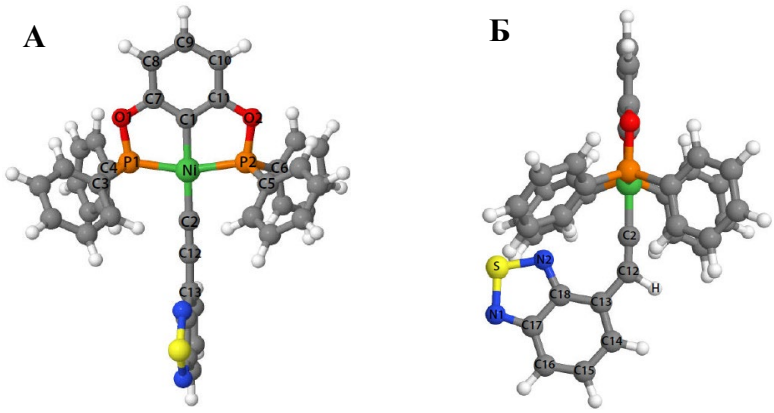


Рис. 1. Структура комплекса [C_6H_3-1,3-$(OPPh_2)_2$]Ni-C≡C-(4-$C_6H_3N_2S$) (А) и его протонированной формы (Б).

Автор выражает благодарность соавторам работы: Шор Е.А., Шор А.М.

Литература:

[1] Johnson M.T., Wendt O.F., Inorganica Chimica Acta, V. 367, PP 222-224 (2011).
[2] Murugesan S., Kirchner K., Dalton Transactions, V. 45, PP 416-439 (2016).
[3] Сайкова С. В., Киршнева Е.А., Пантелеева М.В., Пикурова Е.В., Евсевская Н.П. Журнал неорганической химии. Т. 64., № 10. С.1013 (2019).

Нанокомпозитные полиуретаны

Куулар Айраана Ак-ооловна
Институт химии и химических технологий СО РАН

Полимерные композиты являются областью активных исследований на протяжении последних нескольких десятилетий [1]. К потенциальным наполнителям полимерных композитов наравне с углеродными нанотрубками можно отнести нановолокна оксида алюминия (НОА). Доказано, что механические свойства, такие как прочность на растяжение, модуль упругости, модуль сжатия и вязкость разрушения, возрастают при возрастании доли нановолокон [2]. Полимерная матрица включает эпоксидную смолу, полиуретан, полиэтилен и так далее [3].

В проведённой работе исследовались механические свойства разрушения полиуретана. Материал изготавливали из смеси компонентов полиольной и полиизоцианатной в результате самопроизвольной реакции, между которыми возникает полиуретан. В компоненты добавляли до 2% нановолокон оксида алюминия покрытые аминогруппами методом силанизации.

Полученные изделия испытывали методом трёхточечного изгиба и методом отрыва монтажного шурупа. Испытания на трёхточечный изгиб проводились по ГОСТ Р 56810-2015 с 5 изделиями для каждой концентрации добавки. Испытания проводились с целью установления зависимости механических свойств от доли нановолокон оксида алюминия в полимере.

Таблица 1. Сводные данные механических характеристик нанокомпозитного полиуретана.

Доля НОА, %	0	0,05	0,1	0,2	0,5	1	2
Предельная прочность, МПа	33,92	33,85	32,43	31,24	31,60	32,53	36,43
Предельное удлинение, %	0,10	0,20	0,19	0,19	0,15	0,16	0,13
Сопрот. Отрыву кН/м	7,18	6,95	6,98	7,08	7,20	7,24	7,77

Важнейшие сводные данные можно увидеть в таблице 1. В полиуретанах нановолокна оксида алюминия функционализированные аминогруппами выполняют функцию повышения когезии материала. При изготовлении полиуретанов добавка механически препятствует химическому взаимодействию между форполимерными компонентами полиуретана. Ослабление полимерной матрицы имеет побочный эффект в виде повышения подвижности полимерных цепей. Это приводит к повышению предела текучести полимера. В качестве пробных испытаний на товарных изделиях из полиуретана следует выбрать долю добавки нановолокон около 0,05%, 0,5% или 2%. Ослабление полимерной матрицы по механическим причинам требует использования наполнителей для полимерной матрицы, что может, с одной стороны улучшить механические свойства материала, а с другой уменьшить долю полимера в товарном изделии. По-видимому, оптимальный эффект будет получен в сочетании высокомодульной изометрической и волокнистой добавки.

Литература:

[1] R. Ma, W. Li, M. Huang, M. Feng, X. Liu, Composites Science and Technology, V. 170, PP. 128-134 (2019).
[2] Q. Zhao, M. Xie, Y. Liu, J. Yi Applied Surface Science V. 409, PP. 164-168 (2017).
[3] L. Meng, W. Li, R. Ma, M. Huang, J. Wang, Y. Luo, J. Wang, K. Xia, European Polymer Journal, V. 105, PP. 55-60 (2018).

Восстановительное фракционирование древесины березы в присутствии Ni-содержащих катализаторов, нанесенных на HfO_2

Ли Сяоминь
Сибирский Федеральный университет

Растительная биомасса является возобновляемой альтернативой традиционному нефтяному сырью для получения разнообразных химических веществ. Перспективным способом комплексной переработки биомассы является метод восстановительного каталитического фракционирования (ВКФ) [1]. Осуществление данного процесса протекает с использованием металлических катализаторов, нанесённых на устойчивые носители (Al_2O_3, углерод и т.д.). Оксиды гафния проявляют сильные кислотные свойства [2], поэтому его использование в качестве подложки для металлического катализатора должно обеспечить бифункциональные свойства катализатора, что позволит эффективно осуществлять реакции ВКФ.

В данной работе впервые предложено использовать никель, нанесенный на оксид гафния в качестве бифункционального катализатора для каталитического восстановительного фракционирования древесины березы.

Для приготовления катализаторов: 1% Ni/HfO_2, 5%Ni/HfO_2, 10%Ni/HfO_2, 5%Ni/HfO_2-S и 5%Ni/HfO_2-P использовали метод пропитки по влагоемкости.

Было установлено, что использование полученных катализаторов увеличивают выход мономеров в 1,5-2 раза в процессе ВКФ, по сравнению с некаталитическим экспериментом. При этом наибольшее увеличение содержания мономеров наблюдается для катализатора, содержащего 5%Ni на HfO_2, не модифицированном кислотами.

В присутствии катализатора, обработанного фосфорной кислотой достигается наибольшее содержание пропенилсирингола (5,6 мас.%). Получаемое соединение является преобладающим при фракционировании древесины березы.

Анализ твердых продуктов гидрирования показал, что катализаторы приводят к снижению относительного содержания лигнина и гемицеллюлоз в твердом продукте. Стоит отметить, что к наибольшему снижению содержания целлюлозы и увеличению содержания гемицеллюлоз приводит катализатор 5%Ni/HfO_2S.

Исследование выполнено при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания института химии и химической технологии СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН (проект FWES-2021-0017), а также при финансировании National Study Abroad Fund, China.. Автор выражает благодарность соавторам работы: Мирошниковой А.В., Казаченко А.С., Сычеву В.В.

Литература:

[1] Renders T., Van den Bossche G., Vangeel T., Van Aelst K. and Sels B. Current Opinion in Biotechnology. Vol. 56, P. 193-201 (2019).

[2] Li, G.; Jang, H.; Liu, S.; Li, Z.; Kim, M.G.; Qin, Q.; Liu, X.; Cho, J. Nature Communications, V. 13, P. 1270 (2022).

Восстановительное каталитическое фракционирование костры льна в присутствии моно-и биметаллических Ru, Ni-содержащих катализаторов

Мирошникова Ангелина Викторовна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Основным отходом (до 70 мас.%) при производстве льноцеллюлозного волокна является костра льна, которая представляет собой одревесневшую часть стебля льна. Содержание основных компонентов в костре льна: лигнина (~25%), целлюлозы (~50%) и гемицеллюлоз (~20%) варьируется в зависимости от зрелости растений, места их произрастания и части стебля льна.

Восстановительное каталитическое фракционирование (ВКФ) лигноцеллюлозной биомассы представляет собой стратегию комплексной переработки биомассы, путём деполимеризации лигнина наряду с образованием жидких углеводородов при сохранении углеводного комплекса гемицеллюлоз и, главным образом, целлюлозы для дальнейшего преобразования. Для эффективного осуществления процесса ВКФ используются твердые бифункциональные катализаторы, содержащие кислотные и металлические активные центры.

Изучено ВКФ костры льна в присутствии монометаллических Ru и Ni-содержащих катализаторов, а также на биметаллических NiRu-катализаторов, нанесенных на окисленные углеродные материалы (УМ): мезопористый УМ Сибунит и УМ СМК-3 (carbon mesostructured by KAIST).

По данным метода низкотемпературной адсорбции азота катализаторы на УМ СМК-3 обладают более высокой площадью поверхности (1216 $м^2/г$), по сравнению с катализаторами на Сибуните (315 $м^2/г$). По данным метода сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) для катализатора на СМК-3 (10Ni3RuC400) характерно более равномерное распределение частиц Ni, в отличие от катализатора на Сибуните (10Ni3RuS450), на поверхности, которого встречаются крупные агломерированные частицы (300-400 нм).

При ВКФ льняной костры бифункциональные мономкеталлические Ni/C и Ru/C катализаторы на окисленном углеродном носителе Сибунит продемонстрировали высокую активность и увеличение выхода мономерных продуктов с 1,6 до 10 и 12 мас.% соответственно [1,2].

При использовании биметаллических катализаторов было установлено, что они более селективны по отношению к пропанолзамещенным метоксифенолам, по сравнению с монофункциональными Ru/C и Ni/C катализаторами. Высокий выход мономеров (до 26 мас.%, в том числе 17% 4-пропанолгваякола) получен в присутствии катализатора 10Ni3RuC400 на УМ СМК-3.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № проект № 20-63-47109. Автор выражает благодарность соавторам работы: Сычев В.В., Казаченко А.С., Скрипников А.В., Тарабанько В.Е.

Литература:

[1] Miroshnikova, A.V.; Kazachenko, A.S.; Tarabanko, V.E.; Sychev, V.V.; Skripnikov, A.M.; Mikhlin, Y.L.; Kosivtsov, Y.; Chudina, A.I.; Taran, O.P. Catalysts. V.12, P.1177 (2022).
[2] Kazachenko, A.S.; Tarabanko, V.E.; Miroshnikova, A.V.; Sychev, V.V.; Skripnikov, A.M.; Malyar, Y.N.; Mikhlin, Y.L.; Ba-ryshnikov, S.V.; Taran, O.P. Catalysts. V.11, P.42 (2021).

Кислотно-основные и спектральные свойства азотсодержащих перфторированных β-дикетонов

Патрушева Анастасия Андреевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Перфторированные β-дикетоны широко используются в качестве хелатирующих и экстракционных реагентов для редкоземельных, переходных и благородных металлов в растворах. В зависимости от характера заместителей, дикетоны проявляют сродство к различным группам лантаноидов и другим металлам. Для изучения характера взаимодействия и выявления закономерностей, а также для использования такого рода лигандов, как селективные агенты, необходимо иметь данные о их состоянии в растворе, параметрах кислотно-основного и кето-енольго равновесий, а также о константах устойчивости их комплексов с редкоземельными металлами.

В работах [1,2] было показано что устойчивость дикетонатных комплексов лантаноидов возрастает при увеличении ароматичности и нуклеофильности замещенной группы. В этом контексте лиганды, содержащие азотные гетероциклические кольца, являются перспективными объектами изучения. В данной работе были изучены три лиганда, содержащих пиридиновое, пиролловое и пиразольное замещенные кольца (Рис. 1).

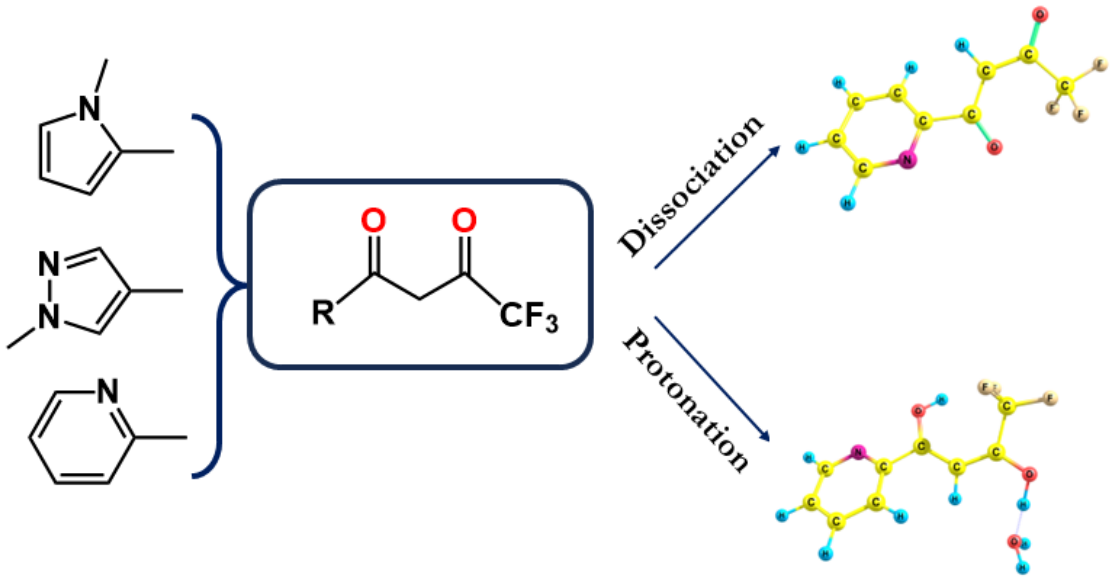


Рис. 5 - Структура замещенных групп (слева) и оптимизированные структуры равновесных форм (справа) в растворе.

Было показано, что кислотность лигандов увеличивается в ряду замещенных групп как пиразол < пиррол < пиридин. В случае пиразолового кольца наблюдалось его протонирование в сильнокислых средах, в то время как для остальных лигандов наблюдалось лишь частичное протонирование дикарбонильного фрагмента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке базового проекта 0287-2021-0012 с использованием приборной базы КРЦП СО РАН. Автор выражает благодарность соавторам работы: Лутошкин М.А, Рубайло А.И., Тайдаков И.В.

Литература:

[1] Lutoshkin M.A., J. Phys. Chem. A V.127, PP. 8383–8391 (2023).
[2] Lutoshkin M.A., Petrov A.I., Malyar Y.N., Kazachenko A.S., Inorganic Chemistry V. 60, PP. 3291–3304 (2021).

Синтез азотсодержащих производных 2,1,3-бензохалькогендиазола

Пономарев Илья Сергеевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Производные различных 2,1,3-бензохалькогендиазолов и бетадикетонатных эфиров, таких как этил-3-оксобутаноат, являются одними из наиболее многообещающих соединений для синтеза полидентатных лигандов, в которых содержатся координационные центры различной природы, например, гетероциклы. Благодаря своим электронным свойствам их производные могут быть использованы для получения люминесцентных материалов [1], молекулярных проводников [2], биологически активных веществ [3] и прекурсоров к катализаторам [4]. Однако, несмотря на то, что в настоящее время известно много различных способов синтеза и модификации одного из халькогендиазолов, 2,1,3-бензотиадиазола, координационная химия остальных халькогендиазолов не изучена в надлежащей степени. Хотя введение селена или теллура на место серы в цикле могло бы придать ранее не известные свойства или усилить уже имеющиеся.

В связи с этим, целью работы является разработка эффективных методов синтеза 2.1.3-бензохалькогендиазолов с теллуром и селеном, а также кетоиминов, содержащих ацетоуксусный эфир.

Для получения замещенных халькогендиазолов применялась методика [5]. Ранее по ней получали только селенодиазолы, нами впервые были получены теллуровые производные. Полученные по методике [5] 4-амино-2.1.3-халькогендиазолы конденсировались с ацетоуксусным эфиром с получением ранее неизвестных кетоиминов по методике [1]. Было найдено, что максимумы спектров люминесценции аминозамещенного теллур-диазола смещены в синюю область на 100 нм относительно исходного лиганда.

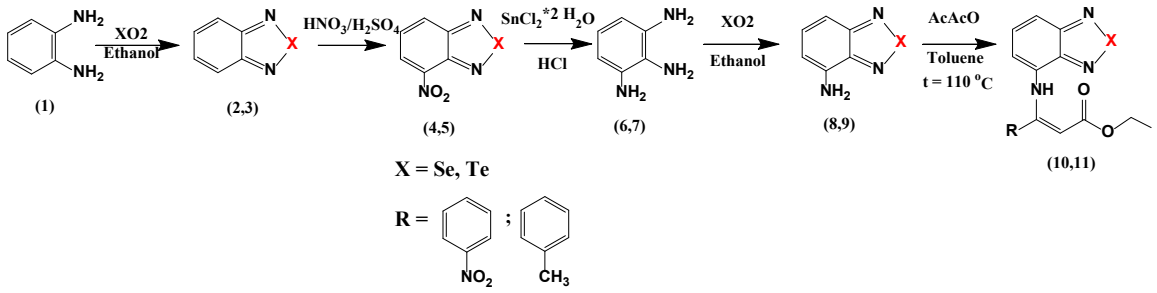


Рис. 6. – Синтез халькогендиазолов по стадиям.

Исследование выполнено в рамках государственного задания FWES-2021-0012 Автор выражает благодарность соавторам работы: Юнусова П.Р., Лутошкин М.А, Рубайло А.И.

Литература:

[1] Sukhikh T. S., Bashirov D. A., RSC Adv. V. 6, P. 43901–43910 (2016).
[2] Conte G., Bortoluzzi A.J., Gallardo H., Synthesis. V. 23, P.3945-3947 (2006).
[3] Носова, Э.В., Урал. ун-та, С. 204(2014).
[4] Trofimenko, S., Journal of the American Chemical Society., V. 92, P. 5118-5126 (1970).
[5] Патент № WO 2018/122232. (Aza)indole-, benzothiophene- and benzofuran-3-sulfonamides: № 122232: заявл. 29.12.2017: опубл. 28.03.2018 / E.C. Mueller; C. Pegurier at el. заявитель, патентобладатель UCB PHARMA GMBH. – 493 с.

Восстановительное каталитическое фракционирование древесины березы в присутствии Pd-содержащих катализаторов

Селезнева Ольга Сергеевна
Институт химии и химической технологии СО РАН

Древесная биомасса состоит из трех основных компонентов – целлюлозы, лигнина и гемицеллюлоз, и представляет собой сложную структуру, что затрудняет ее химическую переработку в востребованные химические соединения. Традиционные промышленные технологии ориентированы на переработку преимущественно целлюлозной составляющей древесной биомассы. Лигнин при этом, являясь одним из основных компонентов биомассы и потенциальным источником ценных ароматических веществ, остается в качестве отхода.

Перспективным направлением является комплексная переработка всех компонентов лигноцеллюлозной биомассы с использованием метода восстановительного каталитического фракционирования (ВКФ). Процесс ВКФ обеспечивает деполимеризацию лигниновой составляющей биомассы, при этом сохраняя основную часть целлюлозного продукта. Для эффективного осуществления процесса ВКФ используются гетерогенные металлические катализаторы, нанесенные на устойчивые носители.

Высокопористые углеродные материалы, такие как нанотрубки и СМК-3, широко используются в качестве носителей для катализаторов. Эти материалы обладают рядом преимуществ: химической и термической стабильностью в широком диапазоне температур, возможностью синтеза образцов высокой чистоты.

В данной работе изучено влияние катализаторов на основе палладия на выход и состав жидких, твердых и газообразных продуктов гидрирования растительной биомассы березы в среде сверхкритического этанола при температуре 250 °С. Впервые предложено использовать приготовленные в гидротермальных условиях катализаторы Pd-таунит и Pd-СМК-3 для процессов восстановительного каталитического фракционирования биомассы.

При гидрировании древесины березы с использованием катализатора Pd-таунит в сверхкритическом этаноле (250˚С, 3 часа, P_{H2} = 10,0 Мпа) конверсия составила 55,0 мас.%, выход жидких продуктов 54,0 мас.%, выход твердых продуктов 45,0 %. При ВКФ древесины березы с использованием катализатора Pd-СМК-3 в сверхкритическом этаноле конверсия составила 60,7 мас.%, выход жидких продуктов 58,6 мас.%, выход твердых продуктов 39,3 мас. %.

Выход мономеров в жидких продуктах гидрирования древесины березы составил 49,1 мас.% (из них 31,6 мас.% 4-пропанолсирингол) при использовании катализатора Pd на СМК-3. При использовании катализатора Pd на тауните, общий выход мономеров составил 29,0 мас.% (из них 10,4 мас.% 4-пропанолсирингол; 6,2 мас.% 4-пропилсирингол).

Конверсия структурных компонентов древесины березы в процессе гидрирования в сверхкритическом этаноле при 250˚С при использовании катализатора Pd на СМК-3 составила: целлюлоза 13,2 мас.%, гемицеллюлозы 95,4 мас.%, лигнин 89,1 мас. %. При использовании катализатора Pd на тауните: целлюлоза 9,9 мас. %, гемицеллюлозы 92,0 мас. %, лигнин мас. 83,6 %.

Данное исследование выполнено при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания института химии и химической технологии СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН (проект FWES-2021-0017), при использовании оборудования Красноярского краевого центра коллективного пользования Красноярского научного центра Сибирского отделения РАН.

Исследование возможности образования хлорорганических соединений в результате применения химических реагентов, используемых при выполнении ГТМ на этапе добычи нефти

Синьшинов Павел Алексеевич
Институт химии и химических технологий СО РАН

ХОС являются нежелательным компонентами нефтей, в первую очередь в связи с тем, что при определённых условиях они могут образовывать хлоридные соли и соляную кислоту, являющиеся источниками коррозии оборудования.

Методики определения ХОС, регламентированные ГОСТ Р 52247-2021 «Нефть. Методы определения хлорорганических соединений», устанавливают методы определения массовой доли ХОС только применительно к нефти и исключительно по отношению к легким ХОС, несмотря на полный запрет ТР ЕАЭС 045/2017 наличия ХОС в химических реагентах.

С целью оценки возможности образования ХОС на в процессе ГТМ, были проведены модельные экспериментов многофазной системы «нефть-пластовая вода-керн-хим. реагент» было установлено:

1. Применение HCl в составах для ОПЗ приводит к образованию ХОС в нефти, увеличение концентрации HCl в смеси повышает содержание ХОС. С уменьшением концентрации HCl в результате реакции с керном образование ХОС уменьшается.
2. Добавление неорганических солей, содержащих нитрат-ионы в смеси с HCl приводит к резкому увеличению образования ХОС в нефти.
3. Обнаружено, что в исходных образцах нефти существует предельная концентрация соединений и функциональных групп, способных образовывать ХОС при взаимодействии с соляной кислотой (при отсутствии других реагентов).
4. В пластовых условиях повышенные содержания ХОС (> 4 ppm) могут образовываться в системе «нефть – пластовая вода» в присутствии сильных окислителей (персульфата аммония). Предполагается, что механизм реакции образования ХОС в данном случае идет по механизму реакции хлорирования активным (молекулярным) хлором, так как в присутствии реагентов-окислителей возможен процесс генерации активного хлора, получающегося при окислении хлорид-иона.
5. При увеличении кислотности пластовых вод растёт число веществ, способных окислять хлорид-ион с образованием молекулярного хлора (рисунок 1). Данные условия могут реализовываться как при кислотной обработке скважин, так и в результате некоторых окислительно-восстановительных процессов, протекающих с образованием кислот. При этом некоторые окислители, например, персульфат-ионы, способны генерировать молекулярный хлор при любых значениях pH.

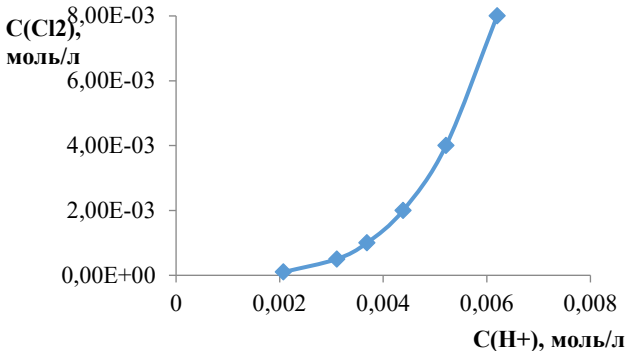


Рис. 1 - Изменение равновесной концентрации молекулярного хлора в водном растворе, контактирующем с Mn3O4 в зависимости от концентрации минеральной неокисляющей кислоты, T = 60 oC, P = 1 Mпа.

Исследование выполнено в рамках проектов по заказу АО «Востсибнефтегаз», ООО «Харампурнефтегаз». Автор выражает благодарность научному руководителю к.х.н. Калякину С.Н.

Твердые бифункциональные Ru/C катализаторы переработки компонентов растительной биомассы в ценные химические продукты

Сычев Валентин Владимирович
Институт химии и химической технологии СО РАН

Восстановительное каталитическое фракционирование (ВКФ) является одним из перспективных методов переработки растительной биомассы, включающее в себя каталитическую деполимеризацию лигнина и гемицеллюлоз, а также выделение твердого целлюлозного продукта [1,2]. Деполимеризация лигнина позволяет получить ценные ароматические соединения – метоксифенолы. Среди перспективных соединений, получаемых из полисахаридной части ЛЦБ можно выделить гамма-валеролактон (ГВЛ) – зеленый растворитель и сырье для получения биополимеров, биотоплив, применяется как в пищевой, так и в фармакологической отраслях промышленности. ГВЛ и его производные также могут быть использованы как присадки к углеводородным топливам.

Для процессов гидрирования в рамках ВКФ наибольший интерес представляют твердые катализаторы на основе Ru, поскольку в водной и водно-спиртовых средах он проявляет наибольшую гидрирующую активность по сравнению с другими платиновыми металлам [2,3].

Целью исследования является разработка твердых бифункциональных катализаторов на основе наночастиц рутения закрепленных на мезопористом графитоподобном углеродном материале (УМ) Сибунит для процессов переработки компонентов лигноцеллюлозной биомассы в ценные химические продукты.

Установлено, что присутствие катализатора в процессе ВКФ костры льна увеличивает выход метоксифенолов более чем в 10,2 раза (до 12 мас.%), по сравнению с некаталитическим экспериментом. Целенаправленный дизайн Ru-катализатора – придание кислотных свойств носителю, позволяет увеличить выход метоксифенолов более чем в 2 раза, по сравнению с Ru-катализатором, на основе неокисленного УМ (условия процесса: 3 г костра, 0.3 г кат; 40 мПа H_2, этанол 60 мл, 250°C.

В гидрировании ЛК до ГВЛ повышение кислотности катализатора негативно сказывается на выходе целевого продукта. Максимальная селективность процесса гидрирования ЛК до ГВЛ в водной среде (выход >98 мол.%) достигается при использовании катализаторов, характеризующихся слабощелочными значениями pHтнз) (условия процесса: 2.5 г ЛК, 0.125 г кат; 1.2 мПа H_2, H_2O 50 мл, 160°C).

Таким образом показана эффективность Ru-катализаторов на основе УМ Сибунит-4, а также разнонаправленное влияние кислотности носителя в зависимости от исследуемого процесса.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20269 и Российского фонда фундаментальных исследований № 20-03-00636. Автор выражает благодарность соавторам работы: Мирошникова А.В., Казаченко А.С., Таран О.П., Тарабанько В.Е.

Литература:

[1] Ross K.,Giuseppe M. International Journal of Molecular Sciences. V.11 (2010).
[2] Galkin M. V.,Samec J. S. ChemSusChem. V.16, № 13, P.1544-1558 (2016).
[3] Alonso D.M., Wettstein S.G., Dumesic J.A. Green Chem. V.15, P.584 (2013).

Каталитическая деполимеризация арабиногалактана в присутствии твердого кислотного катализатора - ZrO_2-SBA-15

Троцкий Юрий Анатольевич
Институт химии и химических технологий СО РАН

Арабиногалактан (АГ) - распространенный полисахарид, содержащийся в больших количествах в древесине лиственницы. Кислотный гидролиз арабиногалактана позволяет получить ценные мономерные соединения, среди которых арабиноза, галактоза, 5-гидроксиметилфурфурол (5-ГМФ) и фурфурол [1]. Применение растворимых кислотных катализаторов, таких как H_2SO_4 и HCl, является низкоэкологичным, оборудование подвергается коррозии, а сам катализатор сложно отделить от реакционной смеси. Альтернативой является использование твердых катализаторов. Мезопористый силикат SBA-15 модифицированный ZrO_2, благодаря выраженной кислотности и мезопористости является перспективным катализатором для жидкофазных процессов [2, 3].

Цель данной работы – разработка твердых кислотных катализаторов деполимеризации полисахаридов на основе SBA-15, модифицированного ZrO_2.

Серия катализаторов ZrO_2-SBA-15 с разным содержанием ZrO_2 (от 2,5 до 20%) синтезирована методом соконденсации. Катализаторы изучены методами низкотемпературной адсорбции N_2, РФА, РФЭС, ПЭМ, СЭМ, $pH_{тнз}$. Каталитические испытания проведены в реакторе автоклавного типа Autoclave Engineers (USA) объемом 100 мл, при 110-150 °C в водной среде.

Установлено, что зависимость кислотности катализатора от содержания ZrO_2 имеет экстремальный характер. Максимально низкое значение $pH_{тнз}$ наблюдается при 5 мас. % ZrO_2 ($pH_{тнз}$ 2,65). Повышение общей кислотной катализатора ($pH_{тнз}$) положительно влияет на общий выход продуктов. При 130 °C, в присутствии катализатора 5%ZrO_2-SBA-15 максимальный выход продуктов составил 62,9 мас. %, содержание целевых продуктов реакции – галактозы и арабинозы составило 51,4 и 5,1 мас. % соответственно.

При повышении температуры до 150 °C наблюдается дальнейшая конверсия моносахаридов до 5-ГМФ и фурфурола с выходами 16,4 и 2,4 мас. % соответственно. Левулиновая кислота при этом образуется в незначительных количествах (<1 мас. %). При повышении содержания ZrO_2 до 10, 15 и 20% наблюдается снижение общего содержания продуктов до 49,1, 39,6 и 3,35 мас. % соответственно, с катализатором 2,5%ZrO_2-SBA-15 выход продуктов не превышает 20 мас. %.

Внедрение ZrO_2 в матрицу мезопористого силиката SBA-15 позволило синтезировать твердый катализатор, подходящий для жидкофазных процессов и обеспечивающий эффективную деполимеризацию полисахарида, что привело к высоким выходам целевых продуктов. 5%ZrO_2-SBA-15 может быть рекомендован, как перспективный носитель для металлических активных центров, что позволит создать бифункциональный катализатор для переработки компонентов растительной биомассы, в рамках такого процесса, как гидролиз-гидрирование.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №21-73-20269. Автор выражает благодарность соавторам работы: Еремина А. О., Новикова С. А., Сычев В. В., Таран О. П.

Литература:

[1] Dion C., Chappuis E., Ripoll C., Nutrition & Metabolism. V13, P.28 (2016).
[2] Enumula S. S., RSC Advances. V.6(24). P.20230-20239 (2016).
[3] Gromov N., Taran O., Parmon V., The Royal Society of Chemistry. PP. 65-97 (2018).

Получение и изучение сверхконцентрированных органозолей наночастиц серебра

Флерко Максим Юрьевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Органозоли наночастиц (НЧ) серебра могут быть использованы для производства гетерогенных катализаторов, антимикробных материалов, оптических систем, электронных и сенсорных устройств, композитных материалов и структур, 2D- и 3D-печати, SERS и т.д. Существует множество способов получения НЧ серебра, однако наиболее распространен «мокрый» химический синтез из-за более широких возможностей контроля процесса, путем использования различных химических соединений (восстановителей, стабилизаторов и др.), а также варьированием концентраций и условий.

Среди множества способов получения органозолей серебра наибольшую популярность приобрел метод фазового переноса, заключающийся в первоначальном получении гидрозолей НЧ серебра с последующим переводом частиц в органическую фазу с использованием поверхностно активных веществ и так называемых «катализаторов переноса». Между тем, типичная концентрация для коллоидных растворов редко превышает 0.1 г/л, что сильно осложняет массовое производство и практическое применение НЧ.

В данной работе предложен простой и высокопроизводительный метод получения органозолей серебра (рисунок 1) с концентрацией металла до 2100 г/л, содержащих наночастицы сферической формы с низкой полидисперсностью и медианным размером 9.1 нм, заключающийся в первоначальном получении гидрозолей НЧ серебра с концентрацией более 30 г/л с последующим переводом НЧ в органическую фазу о-ксилола. Найдены закономерности и оптимальные условия экстракции серебряных наночастиц о-ксилолом в присутствии бромида цетилтриметиламмония (ЦТАБ) и этилового спирта и определены оптимальные условия процесса, в которых степень экстракции достигала 62.5 %. Комплексом физико-химических методов установлено, что анион брома, входящий в состав молекулы ЦТАБ, вызывал агрегацию некоторого количества наночастиц серебра с образованием в водной фазе осадка металлического серебра, содержащего на поверхности, по данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), до 4 ат.% бромид-ионов. Синтезированные в оптимальных условиях органозоли отличались стабильностью в течение более 6 мес. и выдерживали многократно повторяющиеся циклы высушивания и редиспергирования. На основе органозолей серебра получены металлические пленки с электропроводностью около 68500 См/см, которая возрастала до 412000 и 509500 См/см (87.8 % от электропроводности объемного серебра) после их термической обработки при 150 °C и 250 °C соответственно.

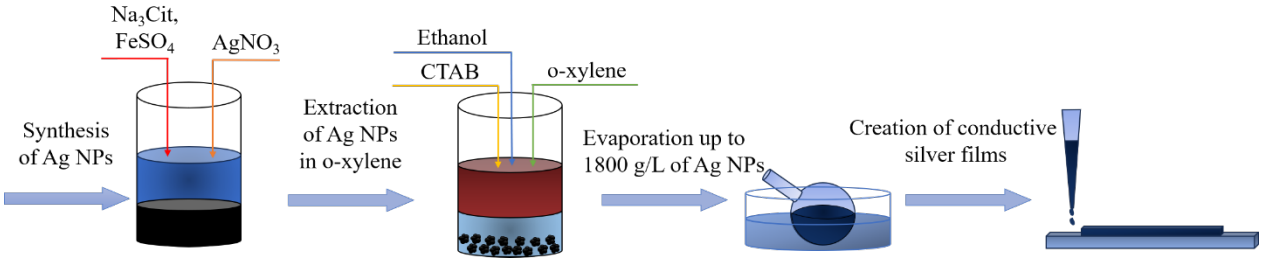


Рис. 1. Схема основных этапов синтеза высококонцентрированных органозолей серебряных НП и их применения в производстве пленок и покрытий.

Автор выражает благодарность соавтору работы: Воробьеву С.А.

Изучение разложения пирита, сидерита и некоторых других минеральных компонентов при прямом щелочном вскрытии томторских руд

Эпов Олег Анатольевич
Институт Химии и Химической технологии СО РАН

Томторское месторождение является уникальным сырьевым источником редкоземельных элементов и ниобия по их содержанию и запасам в рудах. Основными редкометальными минералами руд являются монацит ($(\mathrm{Ce,La,Y})(\mathrm{PO_4})$) и стронций-бариевый пирохлор ($(\mathrm{Sr,Ba})(\mathrm{Nb_2O_6})$). Вместе с тем, из-за тонкодисперсности и сильной взаимной срощенности минеральных частиц [1, 2] эти минеральные компоненты невозможно выделить и очистить обогатительными методами, а переработка руд требует их прямого химического вскрытие.

При проведении гидротермального вскрытии монацита обработкой руды 45% раствором гидроксида натрия, установлено необычное для данного процесса активное газовыделение и образование устойчивой пены, заполняющей реактор, что существенно осложняет проведение технологического процесса. Установлено, что полученный газ является водородом, образующимся за счет побочных окислительно-восстановительных реакций щелочи с минералами пустой породы.

В ходе исследований были получены данные по влиянию температуры проведения процесса и концентрации гидроксида натрия на скорость выделения водорода и глубину процесса. Установлено, что для исследованных образцов руды объем выделенного водорода достигает 6-7 л на кг руды.

Ввиду особенностей протекания процесса было предположено, что получение водорода может быть связано с разложением пирита (FeS_2) или сидерита ($FeCO_3$), аналогично процессам при щелочном вскрытии бокситов по Байеру [3, 4]. Эти минералы присутствуют в значительных количествах в руде. Исследования этих систем показали, что основная причина образования водорода при вскрытии томторской руды обусловлена окислительно-восстановительным процессом разложения высокодисперсного пирита щелочным раствором. Сидерит в этих условиях разлагается с образование гидроксида железа(2+) при проведение процесса в инертной атмосфере или гематита – проведение процесса на воздухе или в атмосфере кислорода.

Проведены предварительные исследования по выявлению причин образования устойчивой пены. Предположено, что их стабильность обусловлена адсорбцией на границе раздела водной и газовой фаз ультрадисперсных гидрофобных частиц. Экспериментально было найдено, что добавление к пульпе раствора стеарата натрия в количестве 2,5 г на 1 кг руды полностью подавляет пенообразование.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №23-63-10017. Автор выражает благодарность соавторам работы: Кузьмину Д.В.

Литература:

[1] Лазарева Е.В., Жмодик С.М., Толстов А.В., Щербов Б.Л., XV международное совещание по геологии россыпей и месторождений кор выветриваний, С. 127-129 (2015).
[2] Kuzmin V.I., Flett D.S., Kuzmina V.N., Zhizhaev A.M., Gudkova N.V., Kuzmin D.V., Mulagaleeva M.A., Tolstov A.V., Logutenko O.A., CHEMICAL PAPERS, V.73, Is.6. – PP. 1437-1446 (2019).
[3] Самсонов Г.В., Дроздова С.В. Сульфиды. Москва: Металлургия, 1972.
[4] Лайнер А.И. Производство глинозема. Москва: Металлургиздат, 1961.

Секция «Био- и медицинские технологии»

Полиненасыщенные жирные кислоты зообентоса реки Обь и ее притоков

Андрущенко Светлана Викторовна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ,
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время широко обсуждается роль полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК) в нормальном развитии и функционировании нервной и сердечно-сосудистой систем животных и человека. Известно, что незаменимые ПНЖК должны поступать в организм животных с пищей [1]. В верхнем течении реки Обь значительную долю ихтиофауны составляют бентоядные рыбы, питающиеся как в основном русле реки, так и способные заходить для кормления в притоки первого порядка, к которым относятся реки Иня и Тула [2]. Состав и содержание жирных кислот (ЖК) в рыбах во многом будет зависеть от ЖК состава кормовой базы - зообентоса, который в разных реках может быть различен и требует уточнения.

Пробоотбор зообентоса проводили в августе 2023 года в верхнем течении р. Обь в районе города Новосибирск и в устьевых зонах рек Иня и Тула с глубины до 1 метра. Для анализа состава и содержания ЖК были отобраны доминирующие по численности и биомассе систематические группы зообентоса для каждой реки: хирономиды, брюхоногие и двустворчатые моллюски, стрекозы и пиявки для реки Обь; хирономиды, брюхоногие моллюски, пиявки и поденки для реки Иня; хирономиды, большекрылки, ручейники и гаммарусы для реки Тула.

Среди всех систематических групп зообентоса по всем рекам отмечается относительно высокий уровень ЭПК – в среднем порядка 15% от суммы ЖК. Исключением являются лишь двустворчатые моллюски реки Обь, для которых выявлены низкие значения уровня ЭПК (3%). При этом у данных моллюсков зарегистрирован самый высокий уровень ДГК среди других систематических групп по реке Обь. Сравнительно высокий уровень ДГК так же отмечается у брюхоногих моллюсков реки Иня и гаммарусов реки Тула. Стоит отметить самый высокий уровень α-линоленовой кислоты у ручейников (20%) и линолевой кислоты у большекрылок (19%) реки Тула, а также высокий уровень арахидоновой кислоты у брюхоногих моллюсков (14%) и пиявок (11%) реки Обь. Высокие уровни данных ЖК могут свидетельствовать об относительно высоком вкладе зеленых водорослей и аллохтонного органического вещества в трофические цепи указанных животных.

Литература:

[1] Махутова О. Н., Гладышев М. И., Российский физиологический журнал им. ИМ Сеченова, Т. 106, № 5, С. 601–621 (2020).
[2] Интересова Е. А., Российский журнал биологических инвазий, Т. 9, №. 1, С. 83-100 (2016).

Особенности формирования фитомассы в разногустотных сосновых молодняках средней Сибири

Арясов Владимир Евгеньевич
Институт леса им В.Н.Сукачева СО РАН

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

Объектами исследований служили разногустотные сосновые молодняки естественного происхождения, сформировавшиеся на вырубке в районе обсерватории ZOTTO (60° с.ш., 89° в.д.).

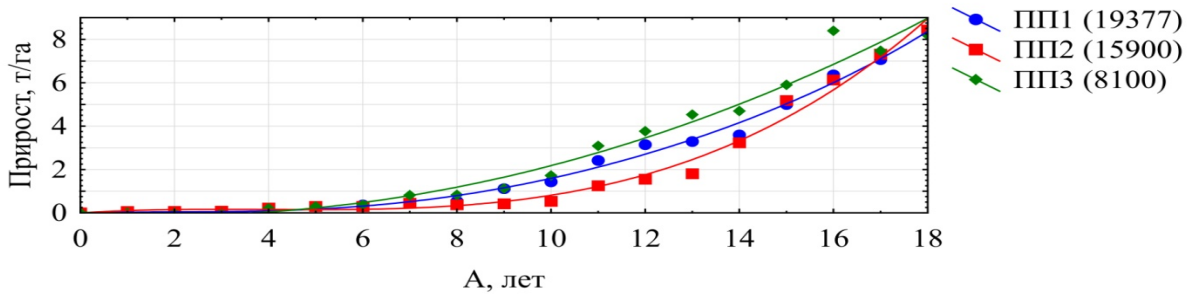


Рис. 7. Прирост всех компонентов фитомассы сосновых молодняков (в скобках указана густота древостоя).

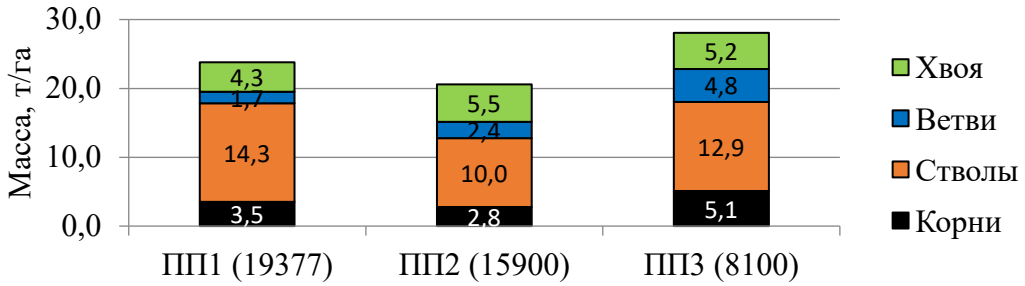


Рис. 2. Накопленная масса всех компонентов сосновых молодняков за 18 летний период.

Установлено, что густота является важнейшей характеристикой древостоев, которая обуславливает биологические механизмы внутренней регуляции, процессов роста и формирования различных компонентов фитомассы.

Работа выполнена в рамках государственного задания №FWES-2024-0040 и реализации важнейшего инновационного проекта государственного значения "Разработка системы наземного и дистанционного мониторинга пулов углерода и потоков парниковых газов на территории Российской Федерации, обеспечение создания системы учета данных о потоках климатически активных веществ и бюджете углерода в лесах и других наземных экологических системах» (рег. № 123030300031-6).

Литература:

[1] Бузыкин А.И., Пшеничникова Л.С. Ресурсно-экологический потенциал лесов красноярского края. Хвойные бореальной зоны. Т. 25, № 3-4, С. 327-332 (2008).

Этнические особенности предрасположенности к интернет-зависимости: роль полиморфизмов гена дофаминового рецептора

Афоничева Ксения Васильевна
Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС, ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время активно изучаются гены нейромедиаторов как факторы формирования интернет-зависимости (ИЗ). Одним из ключевых генов, ассоциированных с ИЗ является ген дофаминового рецептора 2 (*DRD2*) [1]. Рецепторы дофамина – это белки, способные связываться с дофамином, который участвует в процессах мотивации, внимания и контроля за поведением. Полиморфизмы в генах рецепторов имеют разную распространенность в популяциях мира, они изменяют чувствительность к дофамину, чем обуславливают риск развития расстройств и зависимостей. Целью работы было изучение частоты вариантов полиморфизмов rs1800497 и rs6277 гена *DRD2* у тувинских и русских подростков с интернет-зависимостью.

Протестировано 417 подростков 9-18 лет (тувинцы, n=66 и русские, n=351) по шкале Чен (CIAS). Генотипирование ДНК осуществлено с помощью метода ПЦР-РВ. Согласно шкале CIAS участники были разделены на группы без и с признаками ИЗ (до 64 и более 64 баллов, соответственно). Исследование одобрено этическим комитетом ФИЦ КНЦ СО РАН (протокол № 6 от 06.11.2012 г.).

Показано, что частота встречаемости генотипа CC rs1800497 *DRD2* ниже у тувинцев с ИЗ относительно русских (41,2% vs 74,6%). Генотип TT чаще встречается у тувинцев без ИЗ по сравнению с русскими (12,2% vs 2,7%). Аллельный вариант T rs1800497 значимо чаще встречается у тувинцев с ИЗ по сравнению с русскими с ИЗ (0,3% vs 0,2%). Частота встречаемости генотипа CC rs6277 *DRD2* у русских с ИЗ выше относительно тувинцев (30,9% vs 55,1). Выявлено, что вариант T rs6277 чаще встречается у тувинцев без признаков ИЗ, чем у русских (0,5% vs 0,3%). Согласно исследованиям, полиморфизмы rs1800497 и rs6277 ассоциированы с пониженной экспрессией DRD2, что приводит к развитию зависимости от психоактивных веществ (наркотики, алкоголь, никотин) и азартных игр. Таким образом, пониженная чувствительность к дофамину побуждает искать отличные от повседневных источники удовольствия [2]. Изучение распространенности вариантов генов рецепторов дофамина поможет понять механизмы регуляции дофаминэргической системы и ее связь с различными психическими и поведенческими расстройствами.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания №124020100064-6. Автор выражает благодарность соавторам работы: д.м.н., профессору Терещенко С.Ю. (НИИ МПС) и научному руководителю, к.б.н., Смольниковой М.В.

Литература:

[1] Wise R.A., Robble M.A. Dopamine and Addiction. Annual Review of Psychology. №71. PP. 79–106 (2020).

[2] Guerri L., Dobbs L.K., da Silva e Silva D.A. et al. Low Dopamine D2 Receptor Expression Drives Gene Networks Related to GABA, cAMP, Growth and Neuroinflammation in Striatal Indirect Pathway Neurons. Biological Psychiatry Global Open Science. №3. PP. 1104–1115 (2023).

Пространственно-биотопическая приуроченность лесных видов Ястребиных Средней Сибири

Баранов Александр Алексеевич, Зеленская Елена Сергеевна
Сибирский федеральный университет

Среди представителей семейства Ястребиные (*Accipitridae*), обитающих в Средней Сибири чётко выделяется ряд видов, преимущественно населяющих лесные биотопы. К таким видам относятся хохлатый осоед (*Pernis ptilorhyncus* (orientalis) Tacz.), тетеревятник (*Accipiter gentilis* L.), перепелятник (*Accipiter nisus* L.), малый перепелятник (*Accipiter gularis sibiricus* Step.), канюк (*Buteo buteo* L.), змееяд (*Circaetus gallicus* Gm.), орёл-карлик (*Hieraaetus pennatus milvoides* Jerdon), большой подорлик (*Aquila clanga* Pall.), а также беркут (*Aquila chrysaetos* L.) [1]. Будучи хищниками, птицы семейства Ястребиные чувствительны к любым изменениям среды и являются индикатором экологической устойчивости населяемых ими биотопов. Прежде всего связь Ястребиных с лесными сообществами прослеживается в трофических взаимоотношениях. Хохлатый осоед, будучи энтомофагом, осуществляет регуляцию численности насекомых, питаясь не только потенциально полезными для лесных сообществ опылителями – чешуйчатокрылыми, но и вредителями леса. Миофаги, например, канюк, перепелятник, тетеревятник регулируют численность мелких млекопитающих. Змееяд является регулятором численности лесных пресмыкающихся и земноводных, составляющих основу его рациона [2].

Среди лесных представителей семейства Ястребиные наблюдается различие в высоте размещения гнёзд и близости их от стволовой части дерева. Тетеревятник может строить гнёзда на различной высоте в пологе леса. Такие виды, как орёл-карлик, большой подорлик располагают гнёзда на высоте около 10 метров [4]. Перепелятник, малый перепелятник чаще всего строят гнёзда на высоте 4 метров [3]. На наибольшей высоте встречаются гнёзда беркута, который также строит гнёзда на крепких ветвях ближе к вершине дерева.

Для лесных видов представленного семейства особенно характерна привязка к определённым породам деревьев, к их высоте, к общей лесистости территорий, наличию поблизости открытых пространств и иным параметрам, определяющим успешность гнездования Ястребиные устраивают гнездовые сооружения, как правило, из сухих ветвей деревьев, выполняя санитарную роль для древостоя. В свою очередь ветви хвойных пород деревьев, обладающие фитонцидной активностью и регулярно приносимые птицами в гнездо, выполняют функцию санитарной обработки. В связи со всеми вышеперечисленными положениями особенно необходимо поддержание устойчивости лесных экосистем на должном уровне.

Литература:

[1] Баранов А.А., Банникова К.К. Биоразнообразие позвоночных животных Средней Сибири: учебное пособие. Красноярск, 2018. 460 с.
[2] Дементьев Г.П. Отряд хищные птицы. Птицы Советского Союза. Т. 1. М.: Советская Наука, 1951. С. 71-341.
[3] Сыроечковский Е.Е., Рогачева Э.В. Животный мир Красноярского края. Красноярск : Книжное издательство, 1980. С. 22-256.
[4] Сыроечковский Е.Е., Рогачева Э.В., Савченко А.П., Соколов Г.А., Баранов А.А., Емельянов В.И. Красная книга Красноярского края. Редкие и находящиеся под угрозой исчезновения виды животных. Красноярск : Изд-во ин-та физики СО РАН, 2000. 248 с.

VS-CAMBIUM DEVELOPER: новое веб-приложение для моделирования развития камбиальной зоны хвойных

Белоусова Дарья Александровна
Сибирский федеральный университет

Годичные кольца древесины являются результатом адаптации роста древесных растений к меняющемуся климату на основе активности камбия в вегетационный период. Камбиальные клетки формируют уникальную структуру ткани под влиянием внутренних биохимических процессов и факторов окружающей среды. Имитационные модели роста годичных колец являются точным инструментом для анализа этих взаимосвязей [1–3].

Разработка модели, количественно описывающей функционирование камбия, – это не только фундаментальная задача и интегрирование нашего знания об этой ткани, но и прикладная, позволяющая определить инструменты управления камбиальной активностью. Большинство существующих моделей сложны по структуре и предъявляют высокие требования к входным параметрам. В большинстве случаев это затрудняет их внедрение в качестве автоматизированных инструментов прогнозирования [3–5].

Нами разработано новое веб-приложение для прогнозирования камбиальной активности хвойных растений VS-Cambium-Developer (http://vs-genn.ru/VSCD/). Это подсистема, включенная в имитационную модель Ваганова-Шашкина. VS-CD не требует ежегодной ручной калибровки параметров. Для каждого года модель рассчитывает клеточную продукции и камбиальные кинетики. Разработанные виджеты (средства визуализации процесса) позволяют отслеживать динамику роста камбиальной зоны с высоким временным разрешением. Тестирование VS-CD проводилась на косвенных наблюдениях за камбиальной активностью деревьев *Larix sibirica* в Южной Сибири (п. Биджа, Хакасия), а именно по измеренной клеточной продукции с 1963 по 2011 гг.

В результате эксперимента было показано, что климатические условия объясняют более 55% вариаций клеточной продукции. Разработанная модель постепенно переходит от концептуальной к модели, частично учитывающей основные механизмы, регулирующие активность камбия и образование новых клеток ксилемы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №22-14-00048 и Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта №FSRZ-2023-0007. Автор выражает благодарность соавторам работы: Ильину В.А., Попковой М.И, Шишову В.В.

Литература:

[1] Чавчавадзе Е. С. Древесина хвойных. Морфологические особенности, диагностическое значение. Ленинград: Наука, 1979.
[2] Larson P. R. The vascular cambium. Development and structure. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
[3] Vaganov E. A., Hughes M. K., Shashkin A. V. Growth dynamics of conifer tree rings: images of past and future environments. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
[4] Hartmann F. P., Rathgeber C. B. K., Fournier M., Moulia B. Modelling wood formation and structure: power and limits of a morphogenetic gradient in controlling xylem cell proliferation and growth. Annals of Forest Science, V. 74, № 1, P. 1-15 (2017).
[5] Drew D. M., Downes G. A model of stem growth and wood formation in *Pinus radiata*. Trees, V. 29, № 5, P. 1395-1413 (2015).

Синтез политиоэфиров природным штаммом Cupriavidus necator B-10646

Березовская Арина Владимировна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Биополимеры являются основой для всех форм жизни и производятся организмами чтобы использовать, например, в качестве генетической информации, катализаторов, структурных и запасных соединений. Известны восемь классов биополимеров, которые включают нуклеиновые кислоты, полиангидриды, полиамиды, полиизопреноиды, полифенолы, полисахариды, полиоксоэфиры и политиоэфиры (ПТЭ) [1]. Считается, что полимеры ПТЭ, синтезируемые микроорганизмами, являются «небиоразлагаемыми» биополимерами. Более высокая устойчивость к биодеградации обусловлена наличием атома серы вместо кислорода в основной цепи [1]. Эта характеристика ПТЭ является наиболее примечательной особенностью и может стать особенно полезной для промышленных применений, например в качестве замены синтетическим пластикам, полученным из нефтехимии. Кроме того, предполагается, что наличие серы в молекуле полимера, может свидетельствовать об антибактериальных свойствах данных полимеров [2].

Целью исследования было изучение условий синтеза серосодержащих сополимеров в культуре штамма *Cupriavidus necator B-10646* с использованием предшественников и выявить связь между составом и физико-химическими свойствами.

Объектом исследования служил штамм *Cupriavidus necator B-10646*. В качестве субстратов-предшественников использовали следующие вещества: 3-меркаптопропионовую кислоту, 3,3′-дитиодипропионовую кислоту и 3,3′-тиодипропионовую кислоту.

Показано, что, варьируя концентрацию и количество доз предшественника, вносимого в бактериальную культуру, удалось найти условия, обеспечивающие образование мономеров 3-меркаптопропионата (3МП) из предшественника и включение их в С-цепь, поли(3-гидроксибутирата). Получен набор сополимеров с различным содержанием 3-гидроксибутирата (от 60,01 мол.% до 97,96 мол.%) и включений 3-меркаптопропионата (от 2,04 мол.% до 39,0 мол.%). Проведены исследования, позволившие выявить зависимость между содержанием 3МП и их физико-химическими свойствами. Показано, что новые типы мономеров (3МП) в составе ПГА влияют на молекулярную массу, температурные характеристики и степень кристалличности синтезируемых сополимеров.

Получен важный результат влияния новых мономеров на свойства ПГА, заключающийся в выравнивании аморфной и упорядоченной фаз и значительном снижении степени кристалличности (ниже 50%) синтезированных образцов сополимера. Снижение степени кристалличности образцов ПГА положительно сказывается на их свойствах и кинетики кристаллизации, что облегчает переработку в специализированные продукты, улучшая технологические свойства [3].

Литература:

[1] Wubbeler H. J., Steinbuchel A., Current option in Biotechnology, V.2 9, PP. 85-92 (2014).
[2] Lutke-Eversloh T., Fischer A., Marchessault R. H., Nature Materials, V. 1, PP. 236-240 (2002).
[3] Zhila N.O., Sapozhnikova K.Yu., Berezovskaya A.V. et al., Polymer Journal. V. 15, PP. 1005-1030 (2023).

Дифференциальная диагностика хронического аллергического и хронического вазомоторного ринитов по показателям системы «перекисное окисление липидов – антиоксидантная защита

Гончарова Наталья Сергеевна
Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС, ФИЦ КНЦ СО РАН

Введение. Хронические риниты (ХР) с наличием носовой обструкции имеют высокую распространенность среди населения [1]. Дифференциальная диагностика хронического аллергического (ХАлР) и вазомоторного (ХВР) ринита сложна, так как оба заболевания при разном исходе имеют схожую клинико-эндоскопическую характеристику. Интермиттрующая гипоксия из-за заложенности носа вызывает изменение равновесия в системе «ПОЛ-АОЗ», что вероятно зависит от фенотипа ХР. В связи с этим, целью нашей работы явилось изучение показателей системы «ПОЛ-АОЗ» при ХАлР и ХВР [2,3].

Материалы и методы. В исследование были включены 134 пациента с ХР, из которых 45 с ХАлР, 49- с ХВР, 40 – контрольная группа. Показатели системы «ПОЛ-АОЗ» оценены в плазме крови спектрофотометрическим методам. Статистическая обработка данных осуществлялась с помощью пакета прикладных программ Statistica 10.

Результаты. При ХАлР выявлено достоверно значимое увеличение концентрации диеновых коньюгатов и малонового диальдегида относительно контрольной группы и пациентов с ХВР, которое расценивается, как усиление перекисного окисления липидов мембран клеток. При исследовании антиоксидантной системы у всех больных происходит достоверно значимое снижение концентрации медианы супероксиддисмутазы, каталазы, восстановленного глутатиона относительно контрольной группы, что свидетельствует об их угнетении и недостаточности.

Заключение. При ХАлР обнаруживается окислительный стресс с преобладанием прооксидантов над антиоксидантами, вероятно из-за дополнительных патогенетических факторов (аллергическая сенсибилизация и наличие реагинов), при ХВР – только угнетение факторов АОЗ. Показатели «ПОЛ-АОЗ» могут использоваться в качестве дифференциально-диагностических критериев ХР.

Таблица 1. Показатели прооксидантной и антиоксидантоной системы в плазме крови у больных хроническим аллергическим и вазомоторным ринитом Me [Q_{25}-Q_{75}].

Показатели	Контрольная группа, N=40 (1)	Хронический аллергический ринит , N=45 (2)	Хронический вазомоторный ринит, N=49 (3)
DK мкмоль / л	0,66 [0,56 - 0,77]	0,88 [0,85-0,97]	0,69 [0,65-0,82]
		p_{1-2}<0,001	p_{2-3}<0,001
MDA, нмоль/ 1 г белка	2,24 [1,6-3,01]	2,97 [2,31-3,12]	2,31 [1,91-3,01]
		p_{1-2}=0.006	p_{2-3}=0.009
SOD, ед/мин/ 1г белка	180,8 [147,3-195,87]	146,3 [132-155]	137,5 [128-146,1]
		p_{1-2}<0,001	p_{1-3}<0,001
CAT мкмоль/с/ 1 г белка	0,34 [0,26-0,43]	0,21 [0,11-0,32]	0,19 [0,1-0,32]
		p_{1-2}<0,001	p_{1-3}<0,001
GSH, нмоль/мл	23,7 [20,56-25,6]	18,5 [16,9-20,5]	21,3 [19,1-24]
		p_{1-2}<0,001	p_{1-3}=0,01 p_{2-3}<0,001

Литература:

[1] Гусева А. Л., Дербенева М. Л. Ринит: дифференциальная диагностика и принципы лечения //Медицинский совет. 2020; 16: 102-108. doi: 10.21518/2079-701X-2020-16-102-108.
[2] Zhang T., Yu G.D., Gu P., Tang Q., Jin Y., He X.C. Evaluation and analysis of anxiety, depression and quality of life in vasomotor rhinitis // Zhonghua Er Bi Yan Hou Tou Jing Wai Ke Za Zhi. 2020. Vol. 55. №. 8. p. 769-773. doi:10.3760/cma.j.cn115330-20191230-00787
[3] Valgimigli L. Lipid Peroxidation and Antioxidant Protection // Biomolecules. 2023. Vol. 13. №. 9. p. 1291. https://doi.org/10.3390/biom13091291

Характеристика зообентоса и экспорта биомассы и полиненасыщенных жирных кислот при вылете хирономид (Diptera, Chironomidae) из трех соленых озер Южной Сибири

Демина Ирина Александровна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Субсидии водного органического вещества имеют особое значение для территорий аридных ландшафтов, обладающих относительно низкой продуктивностью [1]. Обычными элементами ландшафта аридных регионов всего мира являются соленые озера и реки [2]. Бентосная фауна соленых экосистем зачастую отличается низким видовым разнообразием [1,3,4], но вместе с тем значительным доминированием амфибионтных насекомых отр. *Diptera*, прежде всего – хирономид.

В течение двух вегетационных сезонов определяли таксономический состав, численность, биомассу зообентоса трех соленых озер: Шира, Шунет и Учум, расположенных в аридных степях Южной Сибири. Мы также оценили продукцию, потенциальный экспорт биомассы и физиологически ценных омега-3 полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК) на сушу при вылете хирономид. Зообентосные сообщества изученных водоемов характеризовались низким таксономическим разнообразием и были представлены в основном личинками насекомых сем. *Chironomidae* и *Ceratopogonidae*, а также рачками *Gammarus lacustris* в озерах Шира и Шунет. В целом таксономический состав, численность и продуктивность изученных сообществ амфибионтных насекомых существенно различались. В оз. Шира доминантами являлись личинки *Polypedilum bicrenatum*, *Chironomus nigrifrons* и *Glyptotendipes salinus*. В оз. Шунет основную часть численности сообщества обеспечивали личинки рода *Procladius* и *Chironomus salinarius*, наряду с *P. bicrenatum*. Бентос оз. Учум был представлен личинками рода *Procladius*, подсем. *Orthocladiinae* и сем. *Ceratopogonidae*. Продукция хирономид озер Шира, Шунет и Учум за период 30 дней составила в среднем 16,1 ± 4,1, 45,6 ± 13,6 и 9,6 ± 4,6 г сырой массы/м^2, соответственно, увеличиваясь с ростом индекса Е.В. Балушкиной, оценивающего степень загрязненности воды. Потенциальный экспорт биомассы имаго хирономид из озер колебался от 0,6 до 3,1 г сырой массы/м^2 акватории в год. Величина продуктивности и экспорта биомассы на сушу, вероятно, определялась количеством пищи (органического вещества) в донных отложениях. Имаго *Glyptotendipes*, вылетающие из озер Шунет и Шира, и имаго *Orthocladiinae*, роившиеся близ озера Учум, имели близкие величины содержания ПНЖК на единицу сырой массы. Таким образом, продуктивность, а не таксономический состав хирономидного сообщества, может быть более важным фактором при экспорте ПНЖК из соленых озер.

Исследование выполнено в рамках Госзадания № 0287–2021–0019 и при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 19–34–90099 и № 20–04–00346а. Автор выражает благодарность соавторам работы: Шулепиной Светлане Петровне (Сибирский федеральный университет), Агееву Александру Владимировичу (Сибирский федеральный университет), Сущик Надежде Николаевне (Институт биофизики СО РАН, Сибирский федеральный университет).

Литература:

[1] Gutierrez-Canovas C., et al., Science of the Total Environment, V. 658, PP. 912–921 (2019).
[2] Williams W.D. Environmental Conservation, V. 29(2), PP. 154–167 (2002).
[3] Williams W.D. Hydrobiologia, V. 381(1–3), PP. 191–201 (1998).
[4] Millan A., et al., Journal of Arid Environments, V.75(12), PP. 1352–1359 (2011).

Изготовление и исследования in vitro и in vivo 3D-печатного пористого каркаса из поли(3-гидроксибутирата-со-3-гидроксивалерата) для регенерации костной ткани

Дудаев Алексей Евгеньевич
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Трехмерная печать, также известная как аддитивное производство, представляет собой современную технологию изготовления трехмерных физических объектов слой за слоем по цифровой модели. Сегодня 3*D*-печать считается новейшей технологией в реконструктивной медицине, включая создание каркасов для клеточной и тканевой инженерии и имплантатов для восстановления поврежденных тканей и органов [1].

Успех развития технологий 3*D*-печати во многом связан с поиском новых материалов с необходимыми свойствами, обеспечивающих создание высокофункциональных имплантатов и конструкций с требуемыми характеристиками. Важное положение среди разлагаемых полимеров занимают полигидроксиалканоаты [2].

С использованием сополимера П(3ГБ-со-3ГВ) были изготовлены филаменты методом экструзии и напечатаны 3*D* каркасы ячеистой цилиндрической формы диаметром 13 мм и высотой 4 мм, пористостью 65 %.

Биологическую совместимость с привлечением световой и флуоресцентной микроскопиии МТТ-теста изучали *in vitro* в культуре фибробластов мыши *NIH* 3*T*3. *In vivo* имплантацию 3*D*-каркасов исследовали на модели сегментарной остеотомии болешеберцовой кости свиней в соответствии с правилами этики и гуманного обращения с животными и одобренным протоколом эксперимента локального этического комитета Сибирского федерального университета.

СЭМ, флуоресцентное окрашивание и МТТ-тест показали высокую биологическую совместимость каркасов и активную колонизацию скаффодов клетками, которые сохраняли свою метаболическую активность в течение длительного времени (до 10 дней). Рентгеновский и гистологический анализы подтвердили формирование полностью зрелой костной ткани и полное восстановление дефекта через 150 дней наблюдения. Полученные результаты позволяют нам заключить, что сконструированные рассасывающиеся 3D-каркасы перспективны для костной пластики.

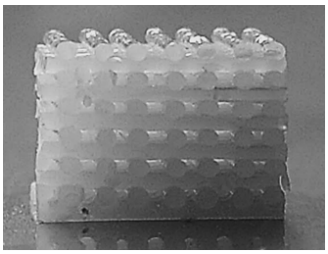


Рис. 1. Продольный разрез 3D-печатного пористого каркаса из поли(3-гидроксибутирата-со-3-гидроксивалерата) для регенерации костной ткани.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FWES-2021-0025). Автор выражает благодарность научному руководителю Воловой Татьяне Григорьевне.

Литература:

[1] Utela, B., Storti, D., Anderson, R., Ganter, M. J Manuf Process. V. 10, № 2. PP. 96–104 (2008).

Новый подход в прогнозировании профессиональной пригодности работника железнодорожного транспорта

Жукова Галина Викторовна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Выявление факторов, вызывающих стресс и утомление, важно для создания условий, снижающих стрессовую нагрузку, что позволяет разработать эффективные профилактические меры для уменьшения аварийности [1]. Предложен новый подход исследования слюнной жидкости, который позволяет не только быстро оценивать состояние организма перед рабочей сменой, но и выявить профессионально неуспешных работников.

В качестве анализируемых образцов была использована смешанная слюна специалистов оперативно-диспетчерского состава Красноярской железной дороги-филиала ОАО «РЖД». Оценку ингибирующего действия слюнной жидкости на активность биферментной системы: НАД(Ф)Н:ФМН-оксидоредуктаза+люцифераза (Р + Л) проводили по величине максимальной интенсивности свечения. Концентрацию лактата определяли спектрофотометрическим методом [2,3]. Для выявления факторов, влияющих на анализ, было проведено анкетирование по самооценке состояния организма и получены результаты медицинских осмотров, содержащие общеклинические анализы крови и мочи и другие терапевтические показатели здоровья.

По результатам исследования, с помощью биолюминесцентного тестирования слюны, работники разделились на 3 группы: для 1-ой группы характерно устойчивое повышение уровня остаточного свечения после рабочего дня, для 2-ой группы характерно устойчивое понижение величины остаточного свечения после рабочего дня и повышение уровня лактата ($r = 0.6$, $p < 0.005$), для 3-ей группы было выявлено как повышение, так и понижение величины остаточного свечения. Неустойчивая реакция биолюминесцентной (Р + Л) системы в ответ на биохимический состав слюны испытуемых 3-ей группы может быть следствием большого числа факторов, к которым можно отнести небольшой опыт работы в профессии ($r = - 0.5$, $p < 0.005$), отклонение в весе ($r = - 0.6$, $p < 0.005$), курение ($r = - 0.8$, $p < 0.005$), частое употребление кофе ($r = 0.5$, $p < 0.005$), отсутствие завтрака ($r = - 0.9$, $p < 0.005$) и др. Наличие данных факторов у испытуемых позволяют отнести их к группе риска.

С помощью биолюминесцентного анализа (Р + Л) образцов слюны работников железнодорожного транспорта была показана возможность первичной экспрессной оценки стрессового состояния организма сотрудника, вызванная выполнением трудовых функций. Выявление группы риска по изменению интегрального биолюминесцентного показателя слюнной жидкости необходимо для мониторинга состояния организма в ходе рабочей смены.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № № 23-25-10039, https://rscf.ru/project/23-25-10039/ совместно с Красноярским краевым фондом науки. Автор выражает благодарность соавторам работы: Степановой Л. В., Кратасюк В. А. за помощь в проведении экспериментальной работы и сотрудникам Красноярской железной дороги-филиала ОАО «РЖД» - за предоставленные данные.

Литература:

[1] Briguglio G., Teodoro M., et al., Int. J. Environ. Res. Public Health, V.18, P.3184. (2021).
[2] Kratasyuk V.A, Stepanova L.V., et al., Luminescence, V. 36(2), PP. 384–390, (2020).
[3] Zhukova G.V., Sutormin O.S., et al., Sensors, V.23(5), P 2865, (2023).

Производство топливных гранул (пеллет) как процесс адаптации лесопромышленного комплекса к новым условиям на примере Красноярского края

Злобин Андрей Алексеевич
Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН

Российский лесной сектор ориентируется на экспорт, однако новый кризис создал стимулы для работы на внутреннем рынке. Одно из ключевых направлений развития стало наращивание производства различных видов биотоплива, в частности производство топливных гранул (пеллет). Это направление активно развивалось и до кризиса, являясь источником дифференциации товарной номенклатуры.

Такая тенденция наблюдается и на предприятиях лесной промышленности Красноярского края. Рациональное использование отходов древесного производства способно значительно повысить эффективность лесного комплекса. Относительно низкая продуктивность лесов региона и высокая доля потерь древесины при лесозаготовках подтверждают необходимость такого подхода [1]. Лесопромышленный комплекс характеризуется высокой долей потери сырья при осуществлении многих производственных процессов. По оценкам специалистов, только на стадии лесозаготовок потери в качестве отходов производства составляют от 20 до 37% деловой древесины [1, 2].

На территории Красноярского края активно развивается программа перевода котельных на биотопливо, которое практически во всех случаях представлено пеллетами. За несколько лет, в крае было осуществлено значительное наращивание их производства. Вероятными драйверами можно считать два условия: снижение объемов производства предприятиями Северо-Западного федерального округа и активное продвижение со стороны государства перевода котельных края на биотопливо.

Согласно данным Росстата в 2019 году наблюдалось снижение объема производства лесоматериалов необработанных на 35,4% и рост объемов производства пеллет на 60,7%. В последующий период, при нормализации объема рубок и наращивании производства лесоматериалов необработанных, рост производства пеллет фактически остановился. Таким образом, вторичное использование отходов производства древесины все ещё является для предприятий края удобным инструментом диверсификации производства. Несмотря на программу перехода котельных на биотопливо и другие проекты развития внутреннего рынка, возможности экспортной выручки остаются более привлекательными.

Исследование выполнено в рамках Госзадания «Роль природных и антропогенных факторов в системе устойчивого управления лесами Сибири» (2024-2026 гг.) FWES-2024-0007.

Литература:

[1] Соколов В. А. Оценка лесов Сибири в условиях глобальных изменений. Санкт-Петербург: Издательство «Наукоемкие технологии», 2023.
[2] Андреев, А. А. Ресурсосбережение и использование отходов заготовки и переработки древесного сырья / Фундаментальные и прикладные исследования: проблемы и результаты. № 10, С. 148-155 (2014)

Влияние фракционного состава частиц поли-3-гидроксибутирата *и волокна древесины на физико-механические характеристики композитных материалов*

Ипатова Наталья Дмитриевна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Исследовано влияние размера частиц поли-3-гидроксибутирата (П3ГБ) и древесного волокна сосны (ВД) на физико-механические характеристики композитных материалов. П3ГБ синтезирован в ЛХАБ ИБФ СО РАН по авторской технологии [1, 2], ВД предоставлено СибГУ имени академика М. Ф. Решетнёва.

Размол П3ГБ и ВД проводили на ультрацентробежной мельницеZM 200 (Retsch, Германия). Фракционирование материалов после размола осуществляли на просеивающей машине AS 200 control (Retsch, Германия). Композитные материалы были получены с помощью гидравлического пресса Avto series Plus (Carver, США). Физико-механические испытания образцов проведены на Instron 556 (5 KN, Великобритания). Результаты физико-механических испытаний образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-механические характеристики композитных материалов.

Образец/параметр	Модуль Юнга, МПа	Предел прочности, МПа	Деформация при разрушении, %	Нагрузка при разрушении, Н
П(3ГБ)	3615,10±100,1	39,13±5,9	1,59±0,3	288,96±63,2
Волокно древесины	1971,28±254,3	17,76±1,9	2,33±0,9	151,62±49,6
П(3ГБ)/волокно древесины 50/50:				
Фракция 100	1906,3±276,4	19,6±0,9	1,80±1,1	121,7±9,3
Фракция 40	3360,3±62,3	29,5±1,1	1,41±0,8	195,3±7,2
Фракция 20	3545,4±194,6	28,7±0,2	1,40±0,1	182,6±2,7
Фракция ≤ 20	2200,1±172,6	29,2±6,2	1,72±0,5	218,1±79,3
П(3ГБ)/волокно древесины 30/70:				
Фракция 100	2088,9±190,8	18,7±2,6	1,7±0,2	129,1±18,1
Фракция 40	3092,2±294,4	22,5±7,8	1,4±0,5	147,1±46,2
Фракция 20	3751,4±210,1	35,8±0,2	1,8±0,1	182,6±2,7
Фракция ≤ 20	1387,9±203,7	17,6±8,1	2,3±0,6	121,8±68,2

Максимальное значение модуля Юнга и предела прочности, соответствует композитному материалу с размером фракции 20 мкм и соотношением П(3ГБ)/ВД 30/70, и составляет 3751,42; 35,84 МПа соответственно. По результатам исследования наблюдалась прямая зависимость физико-механических характеристик композитного материала от размерного ряда частиц П(3ГБ) и ВД. Было зафиксировано, что уменьшение фракций до 20 мкм приводит к увеличению прочности композитного материала.

Образцы с размерным рядом частиц и волокон менее 20 мкм не подходит для изготовления композитного материала методом горячего прессования. Это происходит в результате слабого взаимодействия между материалами, волокно древесины теряет армирующие свойства из-за не достаточной длины волокон во фракции ≤ 20 мкм.

Литература:

[1] Volova T., Kiselev E., Nemtsev I., et al., Journal of Biological Macromolecules, V. 182, PP. 98–114 (2021).
[2] Волова Т.Г., Шишацкая Е.Г. Штамм бактерий *Cupriavidus eutrophus* ВКПМ В-10646 – продуцент полигидроксиалканоатов и способ их получения. Патент РФ №2439143 (2012).

Ингибиторный анализ для выявления скрытых эффектов формулянтов в составе пестицидов

Калябина Валерия Павловна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Пестициды прочно внедрились в нашу жизнь, претерпев множество изменений за последние полвека. Химические составы препаратов непрерывно совершенствуются – они безопаснее, менее устойчивы и обладают более направленным действием на мишени в сравнении с предшественниками. Известно более 1000 активных ингредиентов пестицидов [1], на их основе выпущено нескольких тысяч наименований различных коммерческих препаратов – столь широкое разнообразие обеспечивают формулянты, вспомогательные инертные компоненты в составе. Они же и таят в себе наибольшую опасность [2].

Ферменты живых организмов тонко реагируют на ксенобиотики, вступая с ними во взаимодействие, изменяя свою активность [3]. Целью данной работы стала оценка применимости ингибиторного ферментативного анализа для мониторинга формулянтов в экотоксикологических исследованиях. Использование набора ферментативных систем позволило решить ряд задач, среди которых – установить вносят ли формулянты вклад в ингибиторную способность коммерческих препаратов пестицидов; определить какие именно молекулярные нарушения обуславливают эффект; будет ли он меняться при усложнении цепи сопряжения ферментов. Анализ влияния 7 активных ингредиентов пестицидов (пиретроиды, неоникотиноиды и фосфорорганические соединения (ФОС)) и 10 коммерческих препаратов на их основе на функционирование ферментативных систем позволил установить, что коммерческие препараты пестицидов оказывают значительно более выраженное ингибирующее действие на ферменты в сравнении только с активными ингредиентами, что подтверждает вклад формулянтов в их токсикологические свойства. Так, имидаклоприд в чистом виде не оказывал регистрируемого эффекта во всем исследуемом диапазоне концентраций, однако содержащие этот неоникотиноид коммерческие пестицидные препараты продемонстрировали существенные эффекты ингибирования тестовых систем: высокую чувствительность на уровне МДУ проявили моноферментные реакции на основе алкогольдегидрогеназы (АДГ), NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазы (Р), лактатдегидрогеназы (ЛДГ), биферментная система светящихся бактерий NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза и люцифераза (Р+Л), а также триферментные системы. К примеру, в составе препарата «Биотлин» имидаклоприд ингибировал активность АДГ в два раза от контрольной в концентрации 0,17 мг/л; в составе препарата «Корадо» IC_{50} активного ингредиента для обеих тестовых систем на основе АДГ+Р+Л и ЛДГ+Р+Л составляла 0,04 мг/л. С помощью регистрации структурных изменений методами оптической спектроскопии (спектроскопия кругового дихроизма, спектрофлуориметрия) оценена взаимосвязь ингибиторного действия коммерческих препаратов пестицидов на ферменты с нарушением их белковой структуры: предположительно, ингибиторный эффект обусловлен иными механизмами.

Результаты исследования согласуются с литературными данными о скрытых токсикологических эффектах формулянтов. Вероятно, «инертные» ингредиенты не являются экотоксикологически безопасными и могут значительно усиливать действие пестицидных составов, поэтому их использование должно контролироваться более строго.

Автор выражает благодарность научному руководителю Есимбековой Е.Н. и соавторам работы Немцевой Е.В., Копыловой К.В., Лоншаковой-Мукиной В.И., Торгашиной И.Г., Анташкевич А.А.

Литература:

[1] Shah R. Emerging Contaminants. Rijeka: IntechOpen, 2021.
[2] Mullin C.A, Fine J.D., et al., Front. Public Health. V. 4, N. 92 (2016).
[3] Mahajan L., Verma P.K., et al., Toxicol. Ind. Health V. 34, PP. 726–735. (2018).

Состав и содержание жирных кислот гольцов p.Salvelinus из оз. Собачье и аквакультуры

Карпов Владимир Алексеевич
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН,
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Поиск видов рыб с наиболее высоким естественным содержанием ПНЖК, способных сохранять и увеличивать данное содержание при товарном выращивании в аквакультуре, является чрезвычайно актуальной задачей для обеспечения населения России здоровым функциональным питанием. Одна из форм гольца *Salvilinus alpinus complex* из озера Собачье (Красноярский край, Заповедники Таймыра) имеет наивысшее, среди пресноводных рыб, содержание ЭПК+ДГК в мышечной ткани около 33 мг/г [1].

Цель работы - сравнить состав и содержание жирных кислот (ЖК) в мышечной ткани (филе) гольцов разного пола, возраста и стадии онтогенеза из оз. Собачье и аквакультуры.

Объектом нашей работы послужили гольцы *Salvilinus alpinus complex* (Mina, 1986) разного возраста, пола и стадии онтогенетического развития из оз. Собачье и аквакультурных хозяйств. Для всех особей был проведён полный биологический анализ, отобраны регистрирующие структуры для определения возраста и пробы мышечной ткани для проведения биохимического анализа. Определение состава и содержания ЖК в мышечной ткани гольцов проводилось с использованием метода газовой хроматографии и масс-спектрометрии.

Сравнение содержания ЖК в мышечной ткани гольцов из озера Собачье выявило достоверные отличия в содержании физиологически ценных эйкозапентаеновой (ЭПК) и докозагексаеновой (ДГК) кислот между особями разной стадии онтогенеза и разного возраста, тогда как половая принадлежность не оказывала достоверного влияния. Отличия в составе ЖК у особей гольцов из оз. Собачье, выявлены не были, однако достоверно отличались от особей из аквакультуры.

Для ювенильных особей из оз. Собачье суммарное содержание ЭПК и ДГК составило 3,0±0.6 мг/г сырой массы; для особей пропускающих нерест 8,34±0,68 мг/г; для нерестующих особей 12,41±1,38 мг/г. Значительное увеличение содержания ЭПК и ДГК наблюдается у гольцов в возрасте 5+ лет, после чего сохраняется на стабильно высоком уровне.

Неполовозрелые особи гольца из двух аквакультурных хозяйств содержали 3.5±0.3 и 5.5±1.1 мг/г сырой массы ЭПК + ДГК. Полученные данные говорят о высоких уровнях ЭПК и ДГК у неполовозрелых особей из аквакультуры, и являются близкими к значениям ЭПК и ДГК у взрослых особей из оз. Собачье.

Литература:

[1] Гладышев М.И., Глущенко Л.А., Махутова О.Н. и др. Сибирский экологический журнал, Т. 25, №. 3, С. 325-339 (2018).

Конструирование химерных Ca^{2+}-регулируемых фотопротеинов как подход к созданию маркерных молекул с новыми свойствами

Коновалова Ольга Вячеславовна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Рекомбинантные Ca^{2+}-регулируемые фотопротеины гидромедуз представляют собой стабильный комплекс апобелка с целентеразином. Ионы кальция связываются в EF-hand петлях, запуская реакцию биолюминесценции. К настоящему времени клонирован ряд фотопротеинов, в числе которых акворин из *Aequorea victoria* и митрокомин из *Mitrocoma cellularia*. Эти белки имеют относительно высокую гомологию аминокислотных последовательностей – 68%, но несмотря на это, отличаются в показателях удельной биолюминесцентной активности, стабильности и чувствительности к ионам кальция. Из-за чего фотопротеины широко используют как маркерные молекулы, в частности, как индикаторы кальция. На примере химерного белка "фотина", с заменой участка II EF-hand обелина на таковой клитина, была показана возможность создания фотопротеинов с отличными от белков дикого типа свойствами [1]. Перекомбинация EF-hand структур таких белков, как акворин и митрокомин, еще не проводилась.

Целью работы являлось получение экспрессионных конструкций и характеризация химерных белков на основе генов акворина и митрокомина.

Получено пять генно-инженерных конструкций на основе вектора pET22b для экспрессии химерных фотопротеинов: акворина с заменой I или IV EF-hand на таковые митрокомина (MCI-AVII-IV и AVI-III-MCIV), митрокомина с заменой I или IV EF-hand на таковые акворина (AVI-MCII-IV и MCI-III-AVIV), а также митрокомина с заменой обоих участков (AVI-MCII-IV-AVIV). Созданы продуценты для индуцируемой экспрессии генов на основе штамма *E. coli* и подобраны оптимальные условия для фолдинга апобелков. Проанализированы биолюминесцентные и спектральные свойства высокоочищенных фотопротеиновых комплексов. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Свойства химерного фотопротеина.

Белок	Условия активации		Выход активного белка, %	Отн. удельная биолюм. активность, %	K_d, s^{-1}	Остаточная активность после 1 ч при 37 °C, %	Спектры	
	pH	NaCl, M					BL λ_{max}, нм	FL λ_{max}, нм
MCwt	8,0	0,2	20	100	1,1	79	475	476
AVwt	7,0	0	100	81,5	1,0	78	465	470
AVI-MCII-IV	8,0	1,0	100	13,2	0,9	98	470	470
MCI-AVII-IV	8,0	0,4	60	4,3	0,9	10	465	467
AVI-III-MCIV	6,0	0,3	73	0,004	0,9	69	460	450
MCI-III-AVIV	9,0	0,6	30	59,0	0,7	50	455	474
AVI-MCI-III-AVIV	7,0	0,5	100	108,0	0,08	63	460	470

Таким образом, AVI-MCII-IV демонстрирует наиболее эффективный фолдинг и является термостабильным, а AVI-MCI-III-AVIV отличается самой высокой удельной активностью и имеет пониженную чувствительность к кальцию, что делает его перспективным для использования в качестве индикатора Ca^{2+} в митохондриях.

Литература:

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

Локализация каталитического домена люцифераз копепод: исследование укороченных вариантов люциферазы Metridia longa

Коротов Игорь Александрович
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Люциферазы копепод *Metridia longa* и *Gaussia princeps* успешно применяются в качестве биолюминесцентных репортеров в исследованиях *in vivo* и *in vitro*. Эти ферменты катализируют простую реакцию окисления субстрата целентеразина, не требующую кофакторов [1]. Изоформа MLuc7 люциферазы Metridia, наименьшая из природных люцифераз, имеет массу 16,5 кДа. Ввиду высокой ферментативной активности и компактных размеров, MLuc7 является привлекательным биолюминесцентным репортером, а также может служить удобным объектом для исследования минимального белкового кора, осуществляющего каталитическую функцию копеподных люцифераз. В данном исследовании на основе изоформы MLuc7 люциферазы из *M. longa* методом олигонуклеотид-направленного мутагенеза была создана серия N- и C-концевых делеционных мутантов с целью идентификации наименьшей аминокислотной последовательности, обладающей биолюминесцентной активностью (Рис. 1).

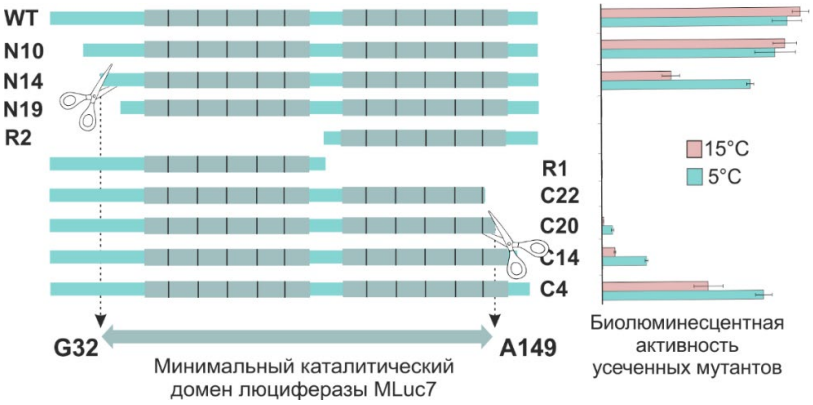


Рис. 1. Схема делеционных мутантов люциферазы MLuc7 и их биолюминесцентная активность.

В ходе исследования установлено, что каталитический домен расположен между остатками *G32* и *A149* и образован двумя не идентичными повторами, содержащими 10 цистеиновых остатков. Поскольку данные повторы имеют высокую гомологию с другими копеподными люциферазами, предполагается, что границы каталитических доменов будут одинаковыми для всех копеподных люцифераз. Также установлено участие *C*-конца в удержании продукта реакции, что подтверждено структурным моделированием и исследованием кинетики. Вариант *ML7-N10* с делецией 10 аминокислот на *N*-конце был успешно использован в качестве биолюминесцентного репортера в живых клетках. Использование подобных миниатюрных репортеров позволяет снизить метаболическую нагрузку на клетку, а также уменьшить стерические и функциональные интерференции в составе гибридных молекул.

Работа выполнена при поддержке совместного гранта № 20-44-242003, предоставленного РФФИ, Правительством Красноярского края и Краевым фондом науки. Автор выражает благодарность соавторам работы М.Д. Ларионовой, Е.С. Высоцкому и научному руководителю С.В. Марковой (Институт биофизики СО РАН).

Литература:

[1] Markova S.V., Larionova M.D., Korotov I.A., Vysotski E.S., Life, V. 13(5), PP. 1222 (2023).

Динамика внутреннего состояния гетерогенных искусственных нейронных сетей, обученных задаче на рефлексию

Маркова Галия Муратовна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Рефлексия в широком смысле – внутреннее представление внешнего мира. В рефлексивной игре наличие рефлексии у игрока обеспечивает эффективное поведение [1]. Поскольку успех в игре связан с наиболее точным предсказанием действий противника, задача в общем смысле состоит в хранении представлений о типичных паттернах поведения противника и их использовании для выбора собственных действий, что может осуществляться благодаря достаточно сложной динамике внутреннего состояния игрока [2]. Если в качестве игроков рассматривать нейросетевые модельные объекты (НМО), их внутренним состоянием является нейронная активность (сигналы на нейронах). Сигналы на всех нейронах НМО в данный момент времени рассматриваются как координаты точки в многомерном пространстве, а динамика внутреннего состояния НМО – траектория на аттракторе [3]. Цель работы – выявить преобладающие типы аттракторов в пространстве нейронной активности у НМО гетерогенной структуры, обученных игре чет-нечет (ЧН) и камень-ножницы-бумага (КНБ).

Гетерогенные НМО были разработаны нами для моделирования функциональной иерархии. НМО типа DTRNN состоят из 2 групп – рекуррентных полносвязных нейросетей по 15 нейронов, «медленная» группа выдает отклик однократно, а «быстрая» трижды на каждом шаге игры. DTRNN+ обладают дополнительным входом для оценки предыдущего хода НМО (-1/+1). НМО типа RefNet также состоят из 2 групп по 15 нейронов, «играющая» группа функционирует как обычная рекуррентная сеть, «рефлексирующая» может изменить ход «играющей». RefNet+ обладают дополнительным входом как DTRNN+.

Использовались НМО с фиксированными весами связей между нейронами, предварительно обученные игре против себе подобных НМО в течение 1000 ходов. После инициации активности НМО единичным стимулом получены следующие преобладающие типы аттракторов (Табл. 1). Тип аттрактора определялся по совокупной активности всех нейронов НМО. Значения получены по данным экспериментов с 500 НМО.

Таблица 1. Преобладающие типы аттракторов у гетерогенных НМО.

Игра	DTRNN	DTRNN+	RefNet	RefNet+
Чет-нечет, за позицию «чет»	Цикл (6 точек), 76%	Цикл (6 точек), 38%	Ненулевая точка, 51%	Ненулевая точка, 80%
Камень-ножницы-бумага	Нулевая точка, 92%	Нулевая точка, 83%	Нулевая точка, 100%	Нулевая точка, 100%

Наблюдаются существенные различия в динамике внутреннего состояния НМО, игравших в ЧН и КНБ, несмотря на общий тип задачи (рефлексивная игра). Преобладание аттрактора типа «нулевая точка» в КНБ может быть связано с вариативностью игровых событий по сравнению с ЧН.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-21-10041, Красноярского краевого фонда науки. Автор выражает благодарность соавтору и научному руководителю Барцеву Сергею Игоревичу (Институт биофизики СО РАН).

Литература:

[1] Bartsev S., Markova G. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., V. 734(1), P. 012109 (2020).
[2] Bertschinger N., Natschläger T. Neural Comput., V. 16(7), PP. 1413-1436 (2004).
[3] Ceni A., Ashwin P., Livi L. Cogn. Comput., V. 12(2), PP. 330-356 (2020).

Получение и анализ свойств новых термостабильных форм рекомбинантной люциферазы мягкого коралла Renilla muelleri

Нур Шейла Акбар
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ

Люцифераза мягкого коралла *Renilla muelleri* представляет из себя одноцепочечный, относительно малый (36 кДа) полипептид, катализирующий окисление целентеразина с испусканием синего света (λ_{max} = 478 нм) [1]. Светоизлучающие белки – люциферазы – широко используются как репортеры для высокочувствительного молекулярного анализа in vitro и in vivo [2], однако многие люциферазы, полученные из холодолюбивых морских организмов, имеют достаточно низкий температурный оптимум, поэтому их ферментативная активность сильно понижается при физиологических температурах [3], что осложняет их применение в работах in vivo. Последовательная замена 7 аминокислотных остатков в люциферазе из мягкого коралла *Renilla muelleri* позволила получить термостабильный вариант белка Rm7, послуживший основой для создания множества гибридных белков. Чтобы получить термостабильный вариант люциферазы Rm7, были произведены следующие аминокислотные замены: A55T, C124A, C130A, A143M, M185V, M253L, S287L [4]. Rm7 демонстрирует существенно большую устойчивость к инактивации при 37°C и почти в 1,5 раза большую активность по сравнению с нативной RmLuc [1].

Целью данной работы является получение новых термостабильных форм люциферазы RmY, и исследование их спектральных и физико-химических свойств. Основой для аминокислотных замен послужила уже усовершенствованная версия «желтой» люциферазы *Renilla muelleri* (RmY), в которой были произведены следующие аминокислотные замены: A55T, C124A, C130A, A143M, M253L, S287L, A123T, D154M, E155G, D162E, I163L и V185L [4]. Для экспрессии люциферазы использовали генетическую конструкцию pDEST566-His6-MBP-TEV-RmY, содержащую целевой ген RmY, ген мальтоза-связывающего белка (MBP, необходим для повышения растворимости люциферазы в цитоплазме клеток), полигистидиновую последовательность для аффинной очистки белка и сайт узнавания TEV-протеазы для проведения процедуры протеолиза [4].

По результатам данной работы было получено 4 термостабильных варианта рекомбинантной люциферазы RmY. Все полученные мутанты обладали высокой активностью и выявляли различия в спектральных свойствах. Максимумы спектров биолюминесценции среди мутантных вариантов наблюдались в широком диапазоне 400-535 нм. Мутанты, имеющие общую замену K189Q, продемонстрировали сдвиг температурного оптимума в область 37°C и сохранили порядка 60–65% активности после инкубации при 37°C в течение 8 часов, тогда как исходная люцифераза RmY имела оптимум биолюминесценции в диапазоне 23–26°C и не выдерживала длительного экспонирования при температурах, используемых для культивирования клеточных линий млекопитающих. Таким образом было показано, что внесение выбранных аминокислотных замен увеличило термостабильность люциферазы RmY.

Литература:

[1] Франк Л.А. и др., Журнал Сибирского федерального университета. Биология, Т. 10, № 2, С. 199-210 (2017).
[2] Frank L.A. Journal of Siberian Federal University. Biology, V.2, PP. 166-173 (2018).
[3] Hiramatsu N.N., Kasai A., et al., Analytical Biochemistry, V. 339, PP. 249–256 (2005).
[4] Stepanyuk G.A., Unch J., Malikova N.P., et al. Analytical Biochemistry, V. 398, PP. 1809-1817 (2010).

Магнитные наночастицы для сепарации клеток рака мочевого пузыря

Петрова Валерия Вячеславовна
ФИЦ КНЦ СО РАН

Рак мочевого пузыря составляет около 2,7% от всех онкологических заболеваний в России (по данным на 2021 год), однако характеризуется высокой частотой рецидивов [1,2]. При этом более 70% случаев данного вида рака, выявляется на неинвазивной стадии, ограничиваясь слизистой или подслизистой оболочкой и не достигая мышечного слоя (немышечно-инвазивный рак мочевого пузыря, NMIBC) [3]. Таким образом, опухолевые клетки могут слущиваться с поверхности опухоли в полость мочевого пузыря и наблюдаться в моче пациента. Однако осадок мочи человека содержит большое количество различных элементов, что может затруднять поиск и анализ опухолевых клеток. В этом случае, важной становится возможность обогащения образца или даже специфического выделения эпителия из общей смеси для последующего анализа. Магнитная сепарация позволяет успешно решать эту проблему. Однако, для этого необходимо создать частицы, которые удовлетворяли бы ряду требований, таких как безопасность для клеток, специфичность захвата, быстрая реакция на магнитное поле и т.д. Целью исследования было сконструировать магнитные наночастицы (МНЧ), конъюгированные с антителами, для выделения клеток эпителия из проб мочи человека.

МНЧ синтезировали методом соосаждения с использованием FeCl3 и FeCl2·4H2O в мольном соотношении 2:1 в водном растворе, в присутствии NH4OH. Затем частицы послойно покрывали тетраэтилортосиликатом (ТЭОС) и 3-аминопропилтриэтоксисиланом (АПТЭС) для получения оболочки достаточной толщины и содержащей на поверхности активные аминогруппы. Изучены физические и химические свойства МНЧ.

Было показано, что синтезированные нанокомпозиты содержат около 4·10^17 реакционно-способных NH2-групп на 1 мг частиц. Была проведена оптимизация протокола иммобилизации тестового белка (бычьего сывороточного альбумина, БСА) на поверхности магнитных частиц посредством сшивания NH2-NH2 с применением гомобифункционального линкера диметил суберимидата. Согласно экспериментальным данным, при оптимальных условиях на 1 мг частиц может иммобилизоваться до 400 мкг БСА. Подобранные протоколы позволят создавать МНЧ для сепарации клеток как прямым захватом при помощи антител, так и через взаимодействие стрептавидин-биотин.

Благодарности:

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда и Фонда поддержки науки и технологий Красноярского края, грант № 22-14-20020.

Автор выражает благодарность соавтору работы: научному руководителю Тюменцевой Анне Владимировне.

Литература:

[1] Под ред. Каприна А.Д., Старинский В.В., Шахзадова А.О.. Злокачественные новообразования в России в 2021 году (заболеваемость и смертность). М.: МНИОИ им. П.А. Герцена − филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2022.

[2] Van der Heijden A.G., Witjes J.A. Recurrence, Progression, and Follow-Up in Non–Muscle-Invasive Bladder Cancer, V. 8, P. 556 (2009).

[3] Van Rhijn B.W., Burger M., Lotan Y., Solsona E., Stief C.G., Sylvester R.J., Witjes J.A., Zlotta A.R. Recurrence and progression of disease in non-muscle-invasive bladder cancer: from epidemiology to treatment strategy. Eur Urol, V. 56(3), PP. 430-42 (2009).

Сравнительная характеристика изотопного состава углерода в двух типах экосистем Центральной Сибири

Полосухина Дарья Александровна, Прокушкин Анатолий Станиславович
Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН

Лесные экосистемы бореальной зоны являются важными глобальными поглотителями углерода, однако в связи с климатическими изменениями [1] прогнозируется смещение баланса углерода к источнику [2]. Использование стабильных изотопов является мощным исследовательским инструментом в науках об окружающей среде, поскольку соотношение между «легкими» и «тяжелыми» фракциями элементов (в нашем случае углерода) отражают состояние и экологические условия экосистем [3]. Цель настоящего исследования заключалась в определении состава стабильных изотопов углерода в компонентах лесных экосистем средней и северной тайги Центральной Сибири, а именно, особенностей их соотношения в доминантах растительного покрова различных ярусов и почвенном органическом веществе.

Исследования проводились в двух подзонах тайги Центральной Сибири: 1) среднетаежные сосновые леса, вблизи Средне-Енисейского опорного экспедиционного пункта ИЛ СО РАН (60° с.ш., 90° в.д.; 2) северотаежные лиственничники, на базе Эвенкийского опорного экспедиционного пункта ИЛ СО РАН (64º с.ш., 100º в.д.). Все отобранные растительные и почвенные образцы высушивали при температуре 105 ºС и гомогенизировали путём их измельчения. Содержание изотопного состава (δ13C) определялись на элементном анализаторе (Vario EL cube, Elementar, Германия) подключенном к изотопному масс-спектрометру (IsoPrime100, Elementar, Германия).

Согласно полученным данным для древесного яруса среднетаежных экосистем характерны более низкие значения δ13C в листовом аппарате по сравнению с северотаежной экосистемой, что отражает оптимальные условия для фотосинтеза растений в этих условиях. В северотаежных лиственничниках наблюдается, наоборот, утяжеление изотопного состава, что свидетельствует о более существенном фракционировании изотопов, свидетельствуя об ограничении фотосинтетической активности, вероятно, обусловленной снижением устьичной проводимости при дефиците почвенной влаги на мерзлотных почвах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке важнейшего инновационного проекта общегосударственного значения: «Разработка системы наземного и дистанционного мониторинга пулов углерода и потоков парниковых газов на территории Российской Федерации, создания системы учета данных о потоках климатически активных веществ и бюджете углерода в лесах и других наземных экологических системах» (№123030300031-6). Натурные наблюдения и обработка экспериментальных данных выполнены в рамках государственного задания № FWES-2024-0023 и № FWES-2024-0040.

Литература:

[1] Ekman E., Trivino M., Blattert C., Mazziotta A., Potterf M., Eyvindson K., Disentangling the effects of management and climate change on habitat suitability for saproxylic species in boreal forests. Journal of Forestry Research, V. 35, № 1, P.34. (2024).
[2] Natali S. M. et al. Large loss of CO2 in winter observed across the northern permafrost region. Nature Climate Change, V. 9, № 11, P.852-857 (2019).
[3] Leavitt S. W. Tree-ring isotopic pooling without regard to mass: no difference from averaging δ13C values of each tree. Chemical Geology, V. 252, №1-2, P. 52-55 (2008).

Влияние кофейной кислоты и гиспидина на свечение базидиального гриба Neonothopanus nambi

Посохина Екатерина Дмитриевна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время известно более 100 видов базидиальных грибов, обладающих визуально наблюдаемым в темноте свечением – биолюминесценцией [1]. Установлено, что биолюминесценция базидиомицетов обеспечивается ферментативными реакциями, в ходе которых сначала происходит НАДФН-зависимое гидроксилирование предшественника субстрата – гиспидина с образованием люциферина, а затем – окисление люциферина с излучением кванта видимого света [2]. Показано, что после реакции светоизлучения оксилюциферин трансформируется в кофейную кислоту, из которой затем вновь может биосинтезироваться гиспидин [3].

Цель работы состояла в изучении влияния кофейной кислоты и гиспидина на свечение мицелия и люминесцентной системы базидиомицета *Neonothopanus nambi* в экспериментах *in vivo* и *in vitro*. В работе использовали штамм базидиального гриба *N. nambi* IBSO 2391 из Коллекции культур микроорганизмов CCIBSO 836 Института биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН (Красноярск). Для экспериментов *in vivo* использовали шарообразные пеллеты мицелия, которые получали при культивировании гриба в погруженных условиях [4]. В исследованиях *in vitro* использовали содержащие грибную люминесцентную систему «холодные» экстракты, которые получали из биомассы мицелия разработанным ранее методом [5]. Для оценки влияния изучаемых веществ на биолюминесценцию мицелия и люминесцентной системы использовали водные растворы коммерческих препаратов кофейной кислоты и гиспидина (Sigma-Aldrich, США). Интенсивность и динамику световой эмиссии регистрировали на люминометре Glomax® 20/20 (Promega BioSystems Sunnyvale, Inc, США) в режиме одно измерение в секунду.

В экспериментах *in vivo* было установлено, что добавки кофейной кислоты к пеллетам мицелия вызывают быстрое и значительное (на порядок и более) увеличение интенсивности их световой эмиссии. При этом добавление гиспидина к пеллетам мицелия не приводило к заметным изменениям уровня их свечения. В то же время, в исследованиях *in vitro* было установлено, что кофейная кислота не вызывает увеличения интенсивности световой эмиссии «холодного» экстракта с предварительно добавленным в него НАДФН. В свою очередь, добавки гиспидина в содержащий НАДФН «холодный» экстракт ожидаемо приводили к развитию люминесцентного сигнала. При этом было обнаружено, что кофейная кислота существенным образом подавляет интенсивность световой эмиссии люминесцентной системы, активированной НАДФН и гиспидином. Было показано, что ингибирующий свечение эффект является дозозависимым и нарастает с увеличением количества кофейной кислоты, вносимой в пробу. Совокупность полученных данных указывает на наличие в светоизлучающем базидиомицете *N. nambi* разных биохимических путей генерации квантов видимого света с участием разных ферментов и субстратов.

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

Литература:

[1] Ke H.-M., et al., Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry, V. 33, PP. 1-6 (2022).
[2] Purtov K.V., et al., Angewandte Chem. Inter. Ed., V. 54(28), PP. 8124-8128 (2015).
[3] Kotlobay A.A., et al., Proceed. of the Nat. Acad. of Sc., V. 115(50), PP. 12728-12732 (2018).
[4] Mogilnaya O.A., et al., Asian J. Mycol., V. 3, PP. 408-418 (2020).
[5] Bondar V.S., et al., Dokl. Biochem. Biophys., V. 455, PP. 56-58 (2014).

Изучение влияния трития на спектры биолюминесценции белка обелина

Райков Александр Валентинович
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Низкодозовая радиация способна активировать физиологические функции организмов (т.н. эффект радиационного гормезиса). Ранее на примере бактериальной биолюминесценции показано, что радионуклид тритий может активировать биолюминесценнцию как бактериальных клеток, так и сопряженных ферментативных систем. Возникает вопрос о том, проявляется ли эффект активации на уровне элементарных физико-химических процессов в простейших биологических процессах [1].

В качестве простейшей биологической системы выбрана биолюминесцентная реакция переноса протона в белке (обелине). Использование продукта биолюминесцентной реакции обелина в качестве простейшего «цветного» флуоресцентного биотеста на токсичность было предложено впервые в работе [2]. Принцип этого использования был основан на том, что токсичные вещества, включая радиоизотопы, способны влиять на функциональные группы белка, изменять его структуру, уменьшать эффективность фотохимического переноса протона и, следовательно, изменять вклады фотолюминесценции протонированной и депротонированной форм целентерамида, связанного с белком, влияя на цвет фотолюминесценции. Биолюминесценция обелина с этих позиций не исследована.

В данной работе мы проанализировали спектры биолюминесценции обелина в присутствии тритиевой воды. Изучен общий выход и вклады спектральных компонент в спектры биолюминесценции при трех концентрациях тритиевой воды (0,1, 1 и 10 МБк/л) условиях низкодозового воздействия трития (< 0.3 Грей). В результате экспериментов не обнаружено достоверных изменений спектрального состава и общего квантового выхода биолюминесценции. Таким образом, низкодозовое воздействие трития не влияет на биолюминесценцию обелина. Этот результат свидетельствует о стабильности характеристик биолюминесцентного биомаркера в биологических средах в условиях низкодозового воздействия трития. Вместе с тем, полученные ранее результаты [3.4] указывают на то, что фотолюминесценция разряженного обелина чувствительна к низкодозовой радиации трития (200 МБк/л); тритий изменяет как общий выход, так и спектральный состав (т.е. цвет) фотолюминесцеции этого белка. Этот результат свидетельствует о вариабельности характеристик флуоресцентного биомаркера на основе разряженного обелина в условиях низкодозового воздействия трития.

В результате эксперимента не было обнаружено активационных эффектов. Несмотря на изменение квантового выхода образцов, сложно утверждать о достоверности полученных данных, ввиду большого разброса значений. Изменения спектрального состава биолюминесценции не обнаружено.

Литература:

[1] Selivanova, M.A., Mogilnaya, *O*.A., Badun, G.A., et al., Journal of Environmental Radioactivity, V. 120, PP. 19–25 (2013)..
[2] Alieva R.R., Kudryasheva N.S., Talanta, V. 170, PP. 425-431 (2017)
[3] Rozhko T.V., Nemtseva E.V., Gardt M.V., et al., International Journal of Molecular Sciences, V. 21, PP. 8464-8479 (2020).
[4] Petrova A.S., Lukonina A.A., Badun G.A., Kudryasheva, N.S., Analytical and Bioanalytical Chemistry, V. 409, PP. 4377–4381 (2017).

Вызывают ли полигидроксиалканоаты негативные реакции in vitro при взаимодействии с клетками, участвующими в восстановлении повреждения тканей?

Рыльцева Галина Александровна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ,
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Процесс имплантации тканеинженерной конструкции приводит в первую очередь к повреждению ткани. Взаимодействия клеток с материалом изделия на всех этапах восстановления может повлиять на успех имлантации. Профиль поверхности биоматериалов способен влиять на активацию адгезированных клеток с последующей перестройкой цитоскелета и на синтез про- или противоспалительных цитокинов этими клетками. Используемый материал должен быть биоинертен, обладать гемо- и биосовместимостью.

Сразу после травмы происходит контакт материала с компонентами крови. Со стартом воспалительной реакции к месту повреждения мигрируют лейкоциты, для нейтрализации инородного тела. Моноциты адгезируются к поверхности имплантата, дифференцируясь в макрофаги, которые фагоцитируют материал, участвуют в заживлении ран, в том числе, за счет рекрутирования фибробластов к месту имплантации. Фибробласты синтезируют экстрацеллюлярный матрикс, создавая структурную опору для заживления в месте имплантации, за счет дифференцировки в миофибробласты [1].

Цель настоящей работы заключалась в проведении комплексного исследования биоматериалов из полигидроксиалканоатов, ПГА, по отношению к клеткам крови (эритроцитам), лейкоцитам (моноцитам-макрофагам) и фибробластам, участвующим в ремоделировании тканей во время воспалительной реакции при имплантации. В работе использовали пленочные образцы из четырех типов ПГА - поли-3-гидриксибутират и его сополимеры с 4- гидроксибутиратом, 3-гидроксивалератом или 3-гидроксигексаноатом.

Измерение активности спонтанного гемолиза эритроцитов *in vitro* использовалось в качестве предварительной оценки гемосовместимости биоматериала. Установлено, что образцы не проявляли гемолитической активности.

Производство макрофагами про- и противовоспалительных, репаративных (CCL18, PGE_2) медиаторов может индуцироваться рельефом поверхности биоматериала. Так с помощью ИФА не было установлено отличий в производстве провоспалительных молекул (TNFα, IL-6, LTB_4) и PGE_2 в культуральной среде макрофагов на ПГА-пленках. Количество CCL18 в образце П3ГБ3ГВ было в ~ 10 раз выше, чем на остальных исследуемых образцах.

Продукция *α*-актина гладкой мускулатуры (*α*-SMA, маркер миобластоподобной дифференцировки) фибробластами человека на ПГА-пленках исследовали с помощью ИЦХ окрашивания. На П3ГБ и П3ГБ4ГБ отмечались единичные *α*-SMA-положительные клетки. Количество жизнеспособных клеток было выше на П3ГБ3ГВ и П3ГБ3ГГ анализируемых с помощью окрашивания мертвых клеток EthD-II, а живых - Hoechst 33342.

Понимание поведения клеток во время заживления тканей и реакции на различные механические сигналы имеет решающее значение для применения биоматериалов. Не было установлено резко негативных последствий взаимодействия ПГА-пленок с клетками, но отличия в морфологии, адгезии и пролиферации клеток на различных образцах отмечались. Для успешного применения ПГА в качестве материалов для имплантации требуются дальнейшие изучения с перспективой программирования клеточного поведения за счет рельефа поверхности биоматериала.

Литература:

[1] Li J.J., Zreiqat H. Encyclopedia of Biomedical Engineering. Amsterdam: Elsevier, 2019.

Разработка иммобилизованного ферментного препарата на основе трипсина для ингибиторного анализа

Сасова Полина Юрьевна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Одним из основных пищеварительных ферментов является трипсин, вырабатываемый поджелудочной железой. Он осуществляет гидролиз пептидов, амидов и сложных эфиров. На протеолитическую активность трипсина влияют различные вещества, способные как стимулировать, так и ингибировать его действие, что позволяет считать перспективным его использование в ингибиторном анализе [1]. Цель работы состояла в получении иммобилизованного препарата трипсина, отличающегося длительным сроком хранения и пригодного для применения в ингибиторном анализе.

В качестве носителя для получения иммобилизованного препарата на основе трипсина был использован крахмальный гель. В предварительно подготовленный гель [2] с разным содержанием крахмала вносили раствор фермента, тщательно перемешивали, дозировали на гидрофобную подложку и высушивали при разной температуре (8 и 20°C). В результате получали одноразовый иммобилизованный препарат в виде небольших высушенных дисков. Также варьировали содержание фермента в одноразовых дисках. Было показано, что активность препарата не зависит от содержания крахмала (рис. 1); для обеспечения высокой активности и стабильности при хранении препарат должен содержать не менее 20 единиц активности трипсина; максимальная активность препарата достигается высушиванием при 20°C в течение 12 часов (Рис. 1).

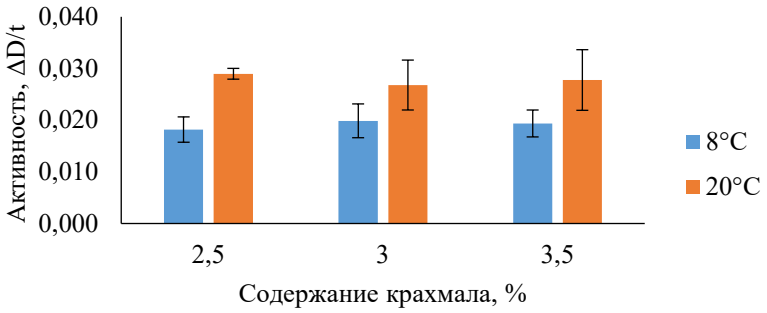


Рис. 1. Зависимость активности иммобилизованного реагента от процентного содержания крахмала и температуры высушивания.

Для обеспечения наибольшей активности рекомендуется инкубировать препарат в реакционной смеси при комнатной температуре в течение не менее двух минут. Показано, что чувствительность иммобилизованного трипсина к модельному токсиканту глифосату в составе коммерческого препарата «Торнадо» близка к чувствительности его растворимой формы: 2,4 г/л глифосата ингибирует активность растворимого и иммобилизованного трипсина на 50 и 40% соответственно [1].

Иммобилизация трипсина в крахмальный гель позволяет получить стабильный ферментный препарат, сохраняющий свою активность в течение не менее 50 дней хранения при 8°C и пригодный для использования в ингибиторном анализе.

Литература:

[1] Esimbekova E.N., et al., Chemosensors, V.11(4), P. 15 (2023).
[2] Esimbekova E.N., et al., Enzyme and Microbial Technology, V. 40, PP. 343-346 (2007).

Каталазная активность подзолистых почв хвойно-лиственного леса после сплошнолесосечной рубки

Севергина Дарья Андреевна, Дымов Алексей Александрович
Институт биологии ФИЦ Коми научного центра УрО РАН

Ферментативная активность почв является одним из важнейших показателей, характеризующим их биологическое состояние и экологические условия функционирования. В первую очередь активность почв оценивают по активности фермента каталазы, так как его параметры позволяют характеризовать как биологические свойства почв, так и оценить влияние различных антропогенных факторов на состояние почвенных систем, включая воздействие на лесные экосистемы лесозаготовительной деятельности [1, 2]. Поэтому цель данной работы заключалась в изучении каталазной активности почв в послерубочном хвойно-лиственном насаждении средней тайги.

Для оценки изменений почв был организован полевой эксперимент: был подобран участок в хвойно-лиственном лесу средней тайги Республики Коми, развивающимся на подзолистых почвах, на котором в дальнейшем произвели рубку леса. Более подробное описание участка исследования приведено нами ранее [3]. Отбор проб проводили в июле в течение четырёх лет (2020-2023 гг.). Каталазную активность измеряли в воздушно-сухих образцах газометрическим методом [4].

В целом, можно отметить флуктуации общей ферментативной активности на протяжении трёх лет после рубки, а именно: в первый год наблюдается незначительное увеличение каталитической активности, на второй год отмечается её незначительное понижение по сравнению с исходным лесом. На третий год средние показатели удваиваются, что можно объяснить стабилизацией микроклиматических условий (pH, влажность). В органогенных горизонтах наблюдается внутрипрофильное распределение активности фермента каталазы от верхней части подстилки к нижней. При этом между собой значения сравнительно близки. В верхнем минеральном и турбированном горизонтах основной вклад в величину суммарной каталитической активности вносят катализаторы неферментативной природы. Таким образом, в рассматриваемых почвах степень каталазная активность значительно изменяется в течение трёх лет после рубки.

Работа выполнена в рамках темы НИР № 122040600023-8 «Криогенез как фактор формирования и эволюции почв арктических и бореальных экосистем европейского Северо-Востока в условиях современных антропогенных воздействий, глобальных и региональных климатических трендов».

Литература:

[1] Казеев К. Ш., Колесников С. И. Биодиагностика почв: методология и методы исследований. Ростов: Изд-во Южного федерального института, 2012.
[2] Перминова Е. М., Лаптева Е. М. Каталазная активность подзолистых почв коренного ельника черничного и разновозрастных лиственно-хвойных сообществ. Аграрный вестник Урала, № 5, С. 44-53 (2018).
[3] Дымов А. А., Старцев В. В., Горбач Н. М., Севергина Д. А., Кутявин И. Н., Осипов А. Ф., Дубровский Ю. А. Изменения почв и растительности при разном числе проездов колесной лесозаготовительной техники (средняя тайга, Республика Коми). Почвоведение, № 11, С. 1426-1441 (2022).
[4] Хазиев Ф. Х. Методы почвенной энзимологии. Москва: Наука, 2005.

Фекальные станолы в донных отложениях озёр Средней Сибири как индикатор антропогенной нагрузки

Синнер Елизавета Константиновна
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

В донных отложениях озёр сохраняются восстановленные кишечной микрофлорой формы стеролов, которые являются индикаторами фекальных поступлений в водоём [1]. Человек вносит наибольший вклад в содержание одного из станолов - копростанола - в донных отложениях [2], поэтому по доле копростанола может быть реконструирована динамика населения берегов водоёмов [3]. С помощью данного метода было обнаружено увеличение доли копростанола в озере Шира на временных промежутках, соответствующих историческим событиям [4].

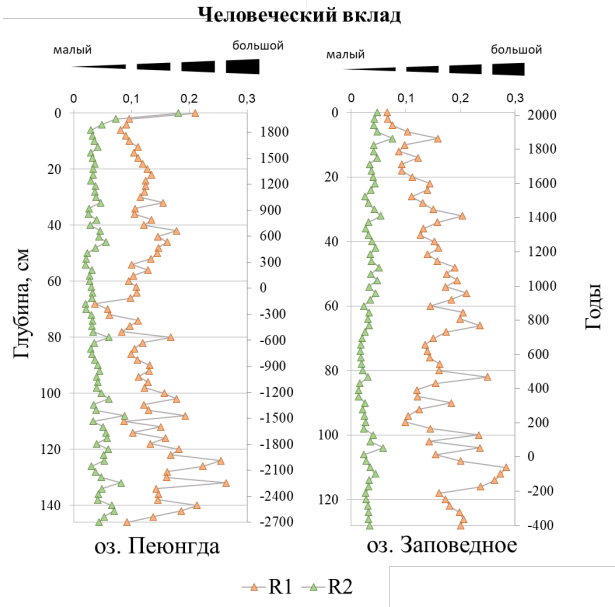


Рис. 1. Значение индексов R1 и R2 в керне донных отложений озёр Пеюнгда и Заповедное.

Методом газовой хроматографии в датированных слоях донных отложений озёр Пеюнгда и Заповедное (Эвенкийский район) были оценены индексы, отражающие человеческий вклад в фекальных поступлениях $R1 = \frac{\text{копростанол + эпикопростанол}}{\text{копростанол + эпикопростанол + холестанол}}$ и $R2 = \frac{\text{копростанол + эпикопростанол}}{\text{копростанол + эпикопростанол + холестерол}}$. Анализ полученных данных с помощью двух индексов (Рис. 1) не показал увеличения доли копростанола, что свидетельствует об отсутствии вклада человека в обоих озёрах. Вероятно, как и в современный период, в более ранние времена (около 5000 лет для Пеюнгды и 2500 лет для Заповедного) около озёр не было поселений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках проекта № 22-17-00185. Автор благодарен Рогозину Д.Ю. за научное руководство, а также Бояндину А.Н. и Зыкову В.В. за помощь в аналитической работе.

Литература:

[1] White, A.J. et al., Proc Natl Acad Sci USA, V. 116, PP. 5461–5466 (2019).
[2] Leeming R. et al., Water Research. V. 12(30). PP. 2893–2900 (1996).
[3] D'Anjou R.M. et al., Proc Natl Acad Sci USA, V. 109, PP. 20332–20337 (2012).
[4] Синнер Е.К., Бояндин А.Н., Рогозин Д.Ю. Сибирский экологический журнал. Т. 2, С. 200–207 (2024).

Оценка состояния трансформированных территорий севера Красноярского края по материалам дистанционного зондирования

Сыроежко Михаил Юрьевич
Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

Техногенное воздействие на экосистемы севера предопределяет необходимость проведения мониторинга за изменениями состояния территорий. Цель работы – на основе классификации спутниковых данных выявить экологическое состояние в районе исследования, а также оценить степень изменения теплового режима поверхности в условиях техногенной трансформации. Работа выполнена для территории Норильского промышленного района Красноярского края, расположенного в пределах Путоранской горной провинции северотаежных редкостойных лесов и горных тундр [1]. В результате обработки материалов Landsat-8 на территории исследования выделены 19 классов подстилающей поверхности (рисунок 1). Доля участков с признаками трансформации составила от 2,5 до 53% от общей территории. Общая площадь фрагментов 1314 км^2. Результат классификации позволяет констатировать, что точность варьируется в пределах 80–90% в зависимости от детализации классов. Точность проверялась методом реперных точек и матрицы ошибок.

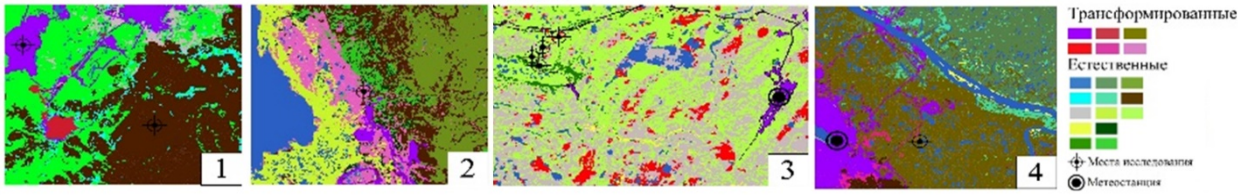


Рис. 1. Результат классификации снимка Landsat-8 на район исследования по состоянию на 05.08.2023 (1 – Кайеркан, 2– Талнах, 3 – Боганида, 4 – Оганер)

Для случайного набора точек (8 точек) в пределах зоны наземного обследования выполнен анализ вариации аномалий индекса LST с рядами данных с температурой воздуха в сопряженные временные интервалы. За период 2014 – 2019 и 2023 год среднее значение относительного отклонения на фоновых участках не превышало 3,9%, а на участках различной степени трансформации 20,4%. При этом между данными метеостанции и LST зафиксирована высокая корреляция (R^2=0,6–0,9). Степень трансформации в значительной степени определяет изменение альбедо участков и регистрируемых дистанционно спектральных характеристик. Следовательно, выявление аномалий LST можно использовать как дополнительный фактор в исследованиях, связанных с оценкой и долговременным контролем состояния трансформированных и естественных экосистем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-14-20007.

Литература:

[1] Пономарева Т. В., Трефилова О. В., Богородская О. А. Эколого-функциональная оценка состояния почв в зоне аэротехногенного воздействия Норильского промышленного комплекса // Сибирский экологический журнал, №6, С. 987-996 (2014).

Влияние регуляторов роста на развитие эмбриогенной ткани у лиственницы сибирской в культуре in vitro

Титова Диана Андреевна, Пак Мария Эдуардовна
Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

Исследовали влияние регуляторов роста на развитие пролиферирующих эмбриогенных культур лиственницы сибирской при длительном культивировании в культуре *in vitro*. Опыты проводили на двух клеточных линиях (КЛ); КЛ 21.20.6 (возраст культуры 1 год) и КЛ4 (возраст культуры 14лет) которые после субкультивирования помещались на среду АИ (патент,2012) с бензиламинопурином (6-БАП) в концентрации 0,5 мг/л и 2.4-дихлорфеноксиуксусной кислотой (2.4-Д) в концентрации 2 мг/д, 1 мг/л, 0,5 мг/л. Через 42 суток культивирования пролиферативная активность КЛ сохранялась. Число глобулярных зародышей у однолетних и длительно пролиферирующей КЛ составило высокую величину (2000-3700 зародышей 1гр эмбриогенной ткани). При уменьшении концентрации 2.4Д в среде прирост эмбриональной массы КЛ увеличивается.

Проведение иммуноферментного анализа эмбриогенных культур показало, что пролиферирующие КЛ содержат большое количество ИУК (495-2380 нг/г сухого веса). Содержание ИУК в эмбриогенных культурах увеличивалось в 100 раз по сравнению с эксплантами, а содержание цитокининов и АБК значительно уменьшилось по сравнению с эксплантами. При длительном культивировании (11-14 лет) в эмбриогенных культурах увеличивается содержание ИУК (до 3687 нг/сухого веса) и АБК (до 970 нг/г сухого веса), что негативно сказывается на регенерационной способности соматических зародышей.

Таким образом, можно заключить, что формирование эмбриогенных культур у лиственницы сибирской связано с содержанием фитогормонов и локализацией их в клетках. Наиболее информативным является ИУК: ее содержание и ассиметричная локализация. При этом эмбриогенные культуры характеризуются большим накоплением ИУК и низким содержанием цитокининов и АБК по сравнению с эксплантами. Обсуждается роль гормонов ауксиновой природы при длительной пролиферации эмбриогенных культур лиственницы сибирской. Делается вывод, что при длительной культивировании эмбриогенных клеточных линий лиственницы сибирской необходимо снижение концентрации регуляторов роста, в частности 2.4Д.

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.

Влияние солёности на реактивацию покоящихся яиц, параметры жизненного цикла и популяционные характеристики Moina macrocopa

Хорошко Ксения Валерьевна
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ,
Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН

Современные исследования показывают, что солёность является одним из ключевых факторов, определяющих структуру сообществ зоопланктона. В условиях глобального ускорения изменений солёности в водных объектах во всём мире, существует серьёзная опасность для возникновения нарушений в биоразнообразии и функционировании озёрных экосистем, в частности способности экосистем к самоочищению и поддержанию заданного качества воды [1]. Ключевую роль в функционировании водных экосистем играют планктонные ракообразные, многие из которых обладают характерной особенностью – переживание неблагоприятных условий среды благодаря наличию диапаузы и формированию покоящихся яиц [2]. Флуктуации солёности могут иметь серьёзное значение для экологически значимой способности рачков восстанавливать своё видовое и численное обилие после периодов физиологического покоя. Однако в немногих исследованиях оценивалось влияние повышенной солёности на покоящиеся яйца зоопланктона и связанные с этим последствия для активных животных и их популяций.

В настоящей работе мы изучили влияние солёности на реактивацию покоящихся яиц разного возраста, самок, реактивированных из яиц и популяции ветвистоусого рачка *Moina macrocopa* (Cladocera). Мы показали, что солёность в диапазоне 0,08-5,85 гл$^{-1}$не влияет на реактивацию покоящихся яиц *M. macrocopa*. Эффективность реактивации покоящихся яиц зависела от их возраста: для 4-летних покоящихся яиц она была на 50% ниже, чем для 1-летних [2]. Негативное влияние на параметры жизненного цикла особей наблюдалось при солёности 3,5 гл$^{-1}$ (ювенильная скорость соматического роста, продолжительность жизни, число образованных кладок и потомков были ниже, чем в контроле), в то время как негативное влияние на популяционные показатели наблюдалось при более низкой солёности (при солёности 1,0 гл$^{-1}$ популяция имела более низкие показатели численности и производила значительно меньше покоящихся яиц, чем в контроле). Таким образом, мы продемонстрировали, что солёность снижает показатели параметров жизненного цикла самок и способность популяций *M. macrocopa* производить достаточное количество покоящихся яиц для создания банка покоящихся яиц. Нарушения в формировании банков покоящихся яиц рачков могут иметь решающее значение для экологического успеха природных популяций и, как следствие, для поддержания стабильности и функционирования водных экосистем [3].

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда, Красноярского краевого фонда науки № 23-24-10044, https://rscf.ru/project/23-24-10044/. Автор выражает благодарность соавторам работы: Лопатиной Т.С. (Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН), Оськиной Н.А. (ФГБУ Государственный заповедник «Хакасский»), Коноваловой Д.А. (Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ, Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН) и научному руководителю Задерееву Е.С. (Институт биофизики, ФИЦ КНЦ СО РАН).

Литература:

[1] Alekseev V. R., de Stasio B. T., Gilbert J. J., Diapause in Aquatic Invertebrates. New York: Springer, 2007.
[2] Lopatina T., Anishchenko O., Oskina N., Zadereev E., Aquatic Ecology, V. 55, PP. 283-297 (2021).
[3] Huang J., Li Y., Sun Y., et al., Environmental Pollution, V. 296, P. 118770 (2022).

Семенная продуктивность лиственницы Гмелина (Larix gmelinii Rupr.) в Сибири

Шемберг Антон Михайлович
Институт леса им. В.Н Сукачева, ФИЦ КНЦ СО РАН

Лиственница Гмелина широко распространена в Восточной Сибири и на Дальнем Востоке, занимая территории от юга Приморья до северных границ распространения деревьев [1]. Цель данной работы заключалась в изучении семенной продуктивности и качества семян лиственницы Гмелина, произрастающих в естественных и искусственных насаждениях Сибири.

Генеративные органы лиственницы Гмелина были собраны на северной границе ареала в естественных древостоях на территории Эвенкийского ОЭП, Красноярский край, и на восточной границе ареала – в районе г. Бодайбо, Иркутская область, а также – в искусственных насаждениях дендрария Института леса им. В. Н. Сукачева СО РАН с середины июля по конец августа 2023 года. У шишек были измерены длина, и ширина, подсчитано количество развитых и неразвитых семенных чешуй, число развитых семян. На основе полученных данных была рассчитана семенная продуктивность по формуле [2]:

$$A = \left(\frac{n}{2N}\right) \times 100, \%;$$

где A – семенная продуктивность макростробила, %, n – число семян (всех или развитых), N – число всех семенных чешуй. Статистическая обработка проводилась при помощи пакета Microsoft Excel 2007.

Исследование структуры урожая лиственницы Гмелина показало более высокие показатели длины и ширины шишек в искусственных насаждениях дендрария Института леса, чем в естественных насаждениях. По соотношению длины и ширины наименьшие показатели зафиксированы у шишек из северной границы ареала. Большая часть семян повреждается конобионтами. Для создания лиственничных лесов необходимо применение новых технологий. Наиболее перспективной является биотехнология соматического эмбриогенеза *in vitro*.

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] Малиновская В. В. Морфологические и биологические особенности лиственницы даурской и их влияние на таксационные показатели в ГКУ Амурской области «Шимановское лесничество» // Международный журнал гуманитарных и естественных наук,. № 5-4, С. 19-22 (2023).
[2] Минина Е. Г., Третьякова И. Н. Геотропизм и пол у хвойных. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1983.

Секция «Математическое моделирование»

Конференция молодых учёных 2023 по математическому моделированию и информационным технологиям проводится при поддержке Красноярского математического центра, финансируемого Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение № 075-02-2024-1378).

Применение клеточных автоматов для моделирования движения амёб

Боков Адам Исрапилович
Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Клеточный автомат, по определению, является динамической моделью, в которой пространство и время рассматриваются дискретными. Клеточный автомат представляет собой совокупность (систему) отдельных элементов (клеток), которые в каждый из моментов дискретного времени могут находиться в каком-либо одном из возможных состояний. Обновление состояний элементов происходит синхронно на каждом шаге модельного времени в соответствии с локальными правилами перехода, т.е. подобно функционированию абстрактного автомата. Причем, новое состояние элемента определяется как его предыдущими состояниями, так и состояниями его ближайших соседей [1]. Версия клеточного автомата может быть использована, например, для моделирования динамики скопления микроорганизмов, таких как амёбы. Целью работы является разработка простейшего автомата и программирование данного алгоритма с визуальным представлением, используя язык объектно-ориентированного программирования C++.

Амёба — одноклеточный организм размером около десяти микрон. Динамика развития их сообщества — достаточно большого количества амёб, находящихся на небольшом расстоянии друг от друга, — бывает достаточно сложной. В зависимости от внешних условий амёбы могут собираться в огромные (до сотен тысяч штук) скопления, которые начинают двигаться как единое целое, хотя индивидуальность каждой амёбы сохраняется. Замечено, что это макроскопическое «организованное» движение происходит в направлении к более высокой концентрации некоторого химического вещества, вырабатываемого самими амёбами [2].

Данную модель скопления амёб применяем к разработке клеточного автомата. Амёбы и производимая ими жидкость являются объектами моделирования клеточного автомата: в каждой клетке может присутствовать скопление амёб какой-то концентрации, а также частица жидкости. Каждый из объектов за один шаг по времени Δt может переместиться только в соседний узел. На движение амёб и распространение жидкости могут действовать внешние факторы. Амёбы и жидкость не проходят через препятствия-стенки, которые можно расположить внутри моделируемой области. В узлах сетки возможно задать «вектор скорости», который будет влиять на движение частиц жидкости.

В работе наглядно показано, как клеточные автоматы могут быть использованы в математическом моделировании.

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Кучунова Елена Владимировна, доцент Института математики и фундаментальной информатики СФУ.

Литература:

[1] Бандман О.Л. Системная информатика. № 10. С. 59-113 (2006).
[2] Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. М.: Физматлит, 2002. С. 136−137.

Гибридный алгоритм распознавания строений на изображениях

Гилин Степан Валентинович
Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

В данной работе предложен новый метод распознавания строений на спутниковых снимках, являющийся модифицированным гибридом алгоритма исключения областей и метода жука. Решение задачи распознавания зданий выполняется в несколько этапов: предварительная обработка исходных изображений; сегментация изображения (группировка областей с одинаковыми визуальными характеристиками); обнаружение объектов и извлечение векторов признаков для обнаруженных объектов; классификация объектов на основании выделенных признаков. На этапе предобработки для устранения шумов изображения используется метод скалирования. Для сегментации применяется метод сдвига среднего значения, преобразование цветовых компонент изображения к модели HSV [1] и пороговая фильтрация. После этого выполняется работа предложенного гибридного алгоритма распознавания строений. Использование в работе алгоритма метода жука позволяет обнаруживать различные формы строений и выделять их из общего фона с помощью анализа текстурных характеристик и особенностей изображений. Затем используется метод исключения областей для устранения нежелательных элементов на изображении (растительность, водные поверхности и дороги), которые могут быть ложно распознаны как строения, и точно определяет местоположение и контуры строений. После обнаружения объектов, претендующих на отнесение к зданиям и строениям, выполняется проверка, являются ли они искусственными объектами — т.е. имеют ли они особенности формы [2]: малую постоянную кривизну (объекты круглой формы), либо несколько точек высокой кривизны (объекты прямоугольной формы) или вообще не имеют кривизны.

Этапы работы предлагаемого алгоритма демонстрируются на рис. 1.

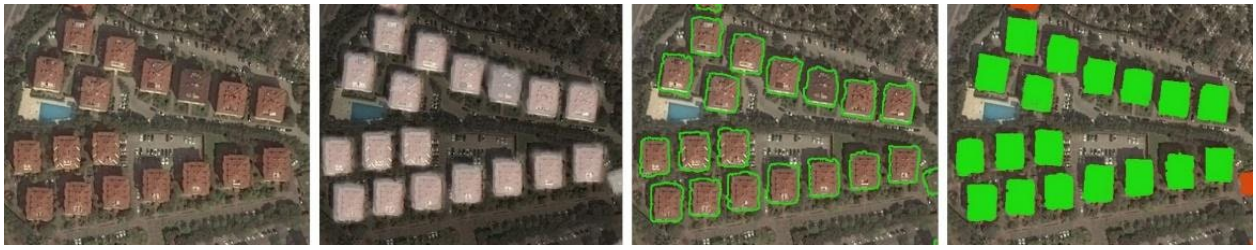


Рис. 1. — Последовательное выполнение алгоритма с фильтрацией.

В работе были проведены вычислительные эксперименты по оцениванию эффективности предложенного метода, а также его сравнению с тремя известными алгоритмами распознавания. В качестве алгоритмов для сравнения были выбраны классический метод исключения областей, метод активных контуров и свёрточная нейросеть (CNN) с архитектурой Mask R-CNN. Предложенный алгоритм показывает хорошую точность распознавания вне зависимости от качества изображения и высокую надежность. Также он не требует обучающей выборки.

Литература:

[1] Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. Москва: Наука, 2009.
[2] Чернов А.В., Чупшев Н.В. Автоматическое распознавание контуров зданий на картографических изображениях. Компьютерная оптика, Т. 31, № 4, С. 636–645 (2007).

Двумерная задача моделирования гидродинамического истечения атмосфер экзопланет

Горбунова Ксения Дмитриевна
Институт вычислительного моделирования СО РАН

По состоянию на начало марта 2024 года достоверно подтверждено существование 5640 экзопланет в 4155 планетных системах. В последние годы задача нестационарного истечения верхней атмосферы планеты в результате нагрева жестким УФ-излучением от Звезды стала особенно актуальной в связи с обнаружением такого большого количества экзопланет в различных звездных системах и изучением их эволюции. Эта задача активно решалась различными авторами в предположении сферической симметрии давления, плотности и радиальной скорости вокруг планеты [1, 2]. Однако, в реальности из-за особенностей распространения и поглощения УФ излучения и наличием теневой области сферическая симметрия нарушается. Подзвездная точка, которая находится на центральной оси получает максимальный УФ поток от звезды, с отклонением от этой оси поток уменьшается. При фиксированном расстоянии от планеты угловой градиент давления монотонно возрастает с увеличением сферического угла, что определяет меридиональное ускорение частиц. При заданном сферическом угле, этот градиент сначала возрастает при удалении от планеты, достигая максимума на расстоянии примерно порядка полутора радиусов планеты, и затем убывает. Так, помимо радиальной скорости появляется еще и меридиональная компонента, которая возрастает с увеличением угла отклонения от центральной оси, направленной к звезде.

Двумерные расчеты проводились на сферической сетке с использованием компактной схемы типа Мак-Кормака [3, 4]. Для расчета интенсивности излучения, распространяющегося в атмосфере вдоль прямолинейных лучей, применялся метод характеристик с интерполяцией на сферической сетке. В качестве данных для расчета были использованы характеристики теплого субнептуна TOI-421c и ее родительской звезды, приведенные в статье Carleo et al [5].

Сравнение с одномерными сферически симметричными моделями показывает, что они существенно переоценивают интегральный расход газа. Двумерная модель позволяет получить более реалистичную оценку расхода, что имеет важное значение для эволюционных задач.

Благодарности:

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2024-1378). Исследования также поддержаны грантом Российского научного фонда No RSF-NSFC 23-47-00084 в части использования компактных разностных схем применительно к астрофизическим задачам.

Автор выражает благодарность научному руководителю Еркаеву Н. В. (ИВМ СО РАН).

Литература:

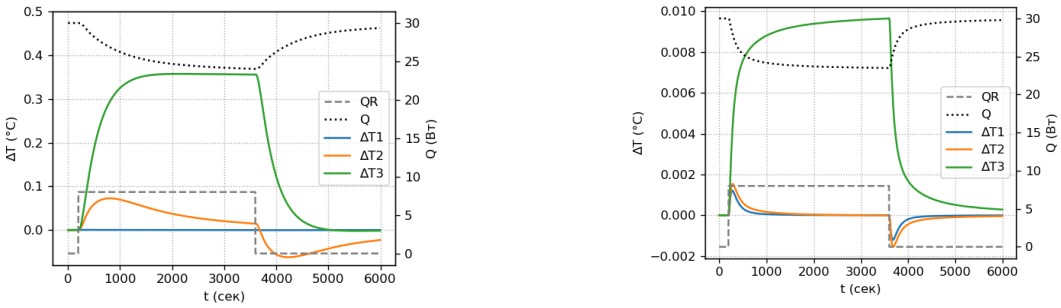
[1] Erkaev N.V., Lammer H., et al. Astrobiology V. 13, № 11, P. 1011-1029 (2013).
[2] Gorbunova K.D., Erkaev N.V. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. V. 15, № 4, P. 500-509 (2022).
[3] Еркаев Н.В., Горбунова К.Д., Вычислительные технологии Т. 29, № 1, С. 5-17 (2024).
[4] Erkaev N.V., Gorbunova K.D., Problems of Geocosmos — 2022, C. 251-265. Cham: Springer International Publishing, 2023.
[5] Carleo I., The Astronomical Journal, 160 (2020) 114.

Математическое моделирование системы термостабилизации бортовой аппаратуры космического аппарата

Гусейнов Вагиф Мамедрагим оглы
Институт вычислительного моделирования СО РАН

Приборы на борту космического аппарата (КА) требуют соблюдения теплового режима. Отвод тепла от приборов выполняется за счет излучения с внешних поверхностей панелей КА, на которые оказывают воздействие тепловые потоки от Земли и от нагретых солнечных батарей, а также потоки от соседних приборов [1]. Некоторые приборы требует высокой стабильности поддержания температуры во времени, которую должна обеспечивать система термостабилизация. В данной работе проводиться моделирование системы термостабилизации для стандарта частоты навигационного КА. Исследовалась идея использования гипертеплопроводящих (ГТП) структур [2] в конструкции основания СЧ, созданных по аддитивной технологии на 3D-принтере.

Математическая модель включает в себя трехмерную нестационарную теплофизическую модель объекта регулирования и алгоритм системы термостабилизации. Решается нестационарная трехмерная задача теплопередачи для фрагмента сотовой панели, являющейся излучающим радиатором, с установленным на ней прибором, выделяющим тепло. Моделирование выполняется в программе CAE Abaqus. Дополнительно созданные подпрограммы обеспечивают имитацию внешних условий, включая изменяющиеся тепловые потоки от Земли, соседних приборов и т.д., а также реализацию алгоритмов управления мощностью нагревателя системы термостабилизации.



а) термоплита из сплошного алюминия б) термоплита со встроенными ГТП-структурами

Рисунок 1 — Нестабильность температуры разных конструкций термоплиты

На рис. 1 показаны отклонения температур при возмущающем воздействии на радиатор внешних тепловых потоков мощностью QR=8 Вт в течение 1 часа. В точке измерения температуры системы термостабилизации T1 обеспечивается высокая стабильность температуры в пределах 0,003°C для обеих конструкций. На некотором расстоянии от точки установки температурного датчика (в точках T2, T3) отклонения температур существенно выше. Для стандартной термоплиты из сплошного алюминия (рис. 1а) отклонения превышают 0,3°C. Для ГТП термоплиты (рис. 1б) нестабильность лежит в пределах 0,01°C. ГТП термоплита позволяет значительно повысить стабильность температуры по всей площади основания прибора.

Литература:

[1] Чеботарев В. Е., Косенко В. Е. Основы проектирования космических аппаратов информационного обеспечения: учеб. пособие. Красноярск: СибГАУ, 2011.
[2] Сунцов С.Б, Нестеров Д.А., Соколов Н.Ю. Наукоемкие технологии, издательство «Радиотехника» (Москва), Т. 18, № 12, С.54-58 (2017).

Расчётное исследование применения вытесняющих агентов для повышения нефтеотдачи

Жигарев Владимир Алексеевич
Сибирский федеральный университет

В настоящее время большинство месторождений нефти находятся на такой стадии разработки, когда для поддержания пластового давления применяется схема закачки различных вытесняющих агентов. В качестве базовых агентов вытеснения применяется вода, которая добывается на месторождении, а также различные полимерные растворы и растворы поверхностно-активных веществ. В данной работе при помощи численного моделирования получены зависимости коэффициента вытеснения нефти от концентрации и типа вытесняющего агента.

Моделирование процесса вытеснения нефти из пористой среды производилось с помощью VOF-метода [1]. Метод позволяет моделировать несмешивающийся многокомпонентный поток жидкость-жидкость, решая ряд уравнений импульса и используя объёмную долю каждой фазы. В рассмотрение вводится объёмная доля вытесняющей жидкости α и объёмная доля нефти β. Поскольку $\alpha+\beta=1$, достаточно использовать только объёмную долю вытесняющей жидкости α. Проведено численное исследование процессов вытеснения нефти из моделей терригенной и трещиноватой среды с помощью различных растворов ПАВ, полиакриламидных полимеров и наносуспензии. В расчётах использовались экспериментально определённые значения краевого угла смачивания на границе ПАВ/нефть/твёрдая порода; коэффициента поверхностного натяжения и значение коэффициента вязкости ПАВ в зависимости от массовой концентрации.

На входе в расчётную область задавалось значение скорости вытесняющей жидкости. На стенках расчётной области задавалось условие прилипания. На твёрдых стенках задавалось значение контактного угла, определённого экспериментально. На выходе из расчётной области задавались условия Неймана.

В ходе расчёта определялись значения коэффициента вытеснения нефти и величина перепада давления при закачивании вытесняющей жидкости. Коэффициент вытеснения нефти определяется как отношение объёма вытесненной нефти к первоначальному объёму нефти в поровом/трещиноватом пространстве.

В ходе численного исследования процесса вытеснения нефти из пористой среды были получены картины распределения вытесняющих агентов воды и ПАВ в различные моменты времени. При использовании в качестве вытесняющего агента растворов ПАВ в отличие от воды происходит уменьшение областей, заполненных нефтью и с увеличением массовой концентрации ПАВ данный эффект усиливается. В расчётах были рассмотрены растворы ПАВ. Концентрации ПАВ были равны 0,01, 0,05 и 0,1 масс.%. В расчётах были рассмотрены наносуспензии оксида кремния со средним размером частиц 10 нм, массовая концентрация частиц варьировалась в диапазоне от 0,25 до 1 масс.%. Было проведено сопоставления влияния наносуспензии на процессы вытеснения нефти с растворами полимеров и ПАВ в терригенных и трещиноватых коллекторах.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (FSRZ-2020-0012).

Автор выражает благодарность соавторам работы: Минакову А.В., Гузей Д.В., Пряжникову М.И., Ивановой С.В.

Литература:

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

Исследование методов получения карты температуры поверхности Земли по спутниковым данным Landsat 8-9

Зайцев Николай Евгеньевич
Институт космических и информационных технологий СФУ

В научном сообществе существует некоторое количество методов получения температуры поверхности Земли. Основная разница между этими методами заключается в вычислении коэффициента излучения [1, 2]. Landsat в наборе данных OLI/TIRS уровня обработки 2 предлагает свой метод, основанный на использовании усредненных значений за период. Помимо этого значения коэффициента излучения, используемые Landsat, имеют артефакты на большой части территории восточной Европы и Азии. Артефакты были восстановлены с применением методики Landsat, но с актуальными исходными данными [3]. На основе этого, было разработано приложение для получения целой карты температуры поверхности Земли.

Последующие исследования карт температуры поверхности Земли в разные сезоны с использованием ранее полученных данных показали, что метод, используемый Landsat для уровня обработки 2, не учитывает сезонные особенности поверхности Земли, такие как озеленение, высохшая трава, частичный снежный покров, опавшие листья, не смотря на использование актуальных исходных данных. Также, заметно, что изменения городской застройки слабо влияют на значения коэффициента излучения поверхности.

Для оценки влияния коэффициента излучения на итоговое значение температуры, в приложение была добавлена возможность расчета температуры с заранее заданным значением коэффициента, константным по всей карте, и проделаны расчеты для разных сезонов, с применением граничных значений коэффициента излучения. Результаты показали значительную разницу температуры в одинаковых точках, особенно в городской застройке (иногда до 6°C).

Было найдено несколько других методов оценки коэффициента излучения: на основе классификации поверхности, на основе вегетационного индекса NDVI и на основе нормализованного разностного индекса влажности NDMI. Последний требует ручной калибровки, однако в будущем это может быть автоматизировано при помощи технологии компьютерного зрения. Новые методы были добавлены в ранее разработанное приложение, после чего были проведены сравнительные расчеты, которые показали, что в рамках города метод, используемый для вычисления температуры поверхности в уровне обработки 2 в данных Landsat, может быть неприменим в связи с высокой погрешностью, а метод, основанный на NDMI, выделяет несколько больше островов тепла в городе. В дальнейшем требуются эксперименты для выявления наиболее точного метода расчета температуры поверхности Земли.

Литература:

[1] Javed M., Chander L. S.,International journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, V.19, P. 348–358 (2012).
[2] Aliihsan S., Remote Sensing, V.12, P. 294 (2020).
[3] Гостева А.А., Матузко А.К., Якубайлик О.Э. Материалы Международной конференции «ИнтерКарто. ИнтерГИС», Т. 24, № 2, С. 195–205 (2018).

Прогнозирование величины концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе г. Красноярска с помощью моделей случайного леса и градиентного бустинга

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. Возникает необходимость не только в мониторинге, но и в прогнозировании значений концентрации вредных веществ в атмосфере города. Одними из наиболее эффективных моделей прогнозирования загрязняющих веществ являются ансамблевые модели: случайный лес и градиентный бустинг [1].

Для прогнозирования были взяты данные наземных станций оперативного мониторинга [2] по метеоусловиям и концентрациям твердых взвешенных частиц PM 2.5 в атмосферном воздухе г. Красноярска за 2019-2023 гг. К рассматриваемым признакам были добавлены температурные инверсии, так как они имеют сильную положительную корреляцию с величиной концентрации PM 2.5. Исходные данные были разделены на временные периоды, в зависимости от величины концентрации PM 2.5, приблизительно соответствующие сезонам года [3].

Модель случайного леса является ансамблевым подходом к построению моделей машинного обучения и использует ансамбль решающих деревьях: $\tilde{y}(x) = \frac{1}{k} * (b_1(x) + \cdots + b_n(x))$, где $\tilde{y}(x)$ — прогноз модели на выборке x, $b(x)$ — модель решающего дерева, k — количество решающих деревьев в лесу. В модели градиентного бустинга построение базовых моделей происходит последовательно, т.е. каждое решающее дерево стремится уменьшить ошибку предыдущего, что позволяет улучшить качество комбинации моделей. Для подбора гиперпараметров моделей использовался поиск по сетке с применением кросс-валидации. Согласно полученным результатам, лучшее качество прогнозирования в летний и осенний периоды приходится на градиентный бустинг: $R^2 = 0{,}54$ и $R^2 = 0{,}64$ соответственно. В зимний период разница в качестве прогнозирования двух моделей незначительна: $R^2 = 0{,}72$ для градиентного бустинга и $R^2 = 0{,}73$ для случайного леса, в весенний период: $R^2 = 0{,}6$ для обеих моделей.

Также было проведено сравнение лучших моделей градиентного бустинга с ранее полученными моделями прогнозирования временных рядов ARIMAX [4] с выбранными для каждого рассматриваемого временного периода экзогенными переменными (скорость и направления ветра, температуры воздуха, влажности воздуха, атмосферного давления) при прогнозировании на 3 дня вперёд. В этом случае, лучшее качество прогнозирования обеспечивает модель ARIMAX за исключением зимнего сезона, где наилучшее качество прогнозирования показывает градиентный бустинг.

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

Литература:

[1] Das R., Middya A. I., Roy S., High granular and short-term time series forecasting of PM2.5 air pollutant — a comparative review. Artif. Intell. Rev. V.55, P. 1253-1287 (2022).
[2] Геопортал — данные оперативного мониторинга [Электронный ресурс]. URL: http://sensor.krasn.ru/sc/ (дата обращения: 06.03.2024).
[3] Volodko O., Yakubailik O., Lapo T., Dergunov A. Influences of meteorological conditions in PM2. 5 levels in Krasnoyarsk city atmosphere. E3S Web of Conf. V. 392, P. 02022 (2023).
[4] Володько О. С., Лев Н. А. Методы прогнозирования временных рядов в задаче анализа уровня концентрации загрязняющих веществ в атмосфере г. Красноярска. Безопасность и мониторинг природных и техногенных систем. P. 205-208 (2023).

Моделирование концентрационной поляризации в установке тангенциальной фильтрации с радиальным течением раствора

Максимова Анна Алексеевна
Институт космических и информационных технологий СФУ

Для разделения, очистки и концентрирования растворов широко используются баромембранные процессы: микрофильтрация, ультрафильтрация, нанофильтрация и обратный осмос [1]. В данных процессах поток растворителя и растворенного вещества происходит за счет трансмембранной разности давлений. Явление концентрационной поляризации — это процесс, при котором растворенное вещество полностью или частично задерживается мембраной, в результате чего на ее поверхности возникает высококонцентрированный слой, оказывающий сопротивление массопереносу [2]. Для более глубокого понимания и предсказания эффектов концентрационной поляризации используется математическое моделирование. Ранее в работах были рассмотрены одномерные (пленочные) модели и двумерные модели концентрационной поляризации, которые показали хорошее согласие с экспериментальными данными [3].

Целью данной работы является разработка математической модели, описывающей явление концентрационной поляризации в установке тангенциальной фильтрации с радиальным течением раствора. В данной установке сырьевой поток подается в центр мембраны перпендикулярно к ее поверхности, движется в радиальном направлении от центра к краям мембраны, и удаляется через щелевой зазор, прилегающий к краю мембраны. Последняя характеризуется жидкостной проницаемостью и задержанием растворенного компонента (соли).

В работе была построена двумерная осесимметричная математическая модель течения растворителя и растворенного вещества (водный раствор хлорида калия) в фильтрационной ячейке с мембраной в виде плоского диска заданного диаметра. С помощью пакета гидродинамических расчетов Ansys Fluent R21 были рассчитаны зависимости концентрации растворенного компонента вблизи поверхности мембраны от его концентрации в сырьевом потоке, скорости сырьевого потока и скорости потока через мембрану.

Показано, что при фиксированной скорости сырьевого потока увеличение скорости через мембрану увеличивает концентрацию вблизи нее, а при фиксированной скорости потока через мембрану увеличение скорости сырьевого потока уменьшает среднюю концентрацию и влияние концентрационной поляризации. Полученные результаты могут быть использованы для совершенствования дизайна фильтрационной ячейки с радиальным течением раствора.

Благодарности:

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-19-00269. Автор выражает благодарность научному руководителю Рыжкову Илье Игоревичу.

Литература:

[1] Mulder M. Basic principles of membrane technology. Kluwer Academic publishers, Dodrecht / Boston / London, 1999.
[2] Zydney A. L. Journal of Membrane Science, V. 130, P. 275-281 (1997).
[3] Sablani S.S., Goosena M.F.A., Al-Belushi R., Wilf M. Desalination, V. 141, P. 269-289 (2001).

Регрессионные модели для прогноза величины концентрации загрязняющих веществ в атмосфере г. Красноярска

Полянчикова Дарья Витальевна
Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Уровень загрязнения атмосферного воздуха в г. Красноярске, в том числе по концентрации твёрдых взвешенных частиц PM 2.5, часто превышает допустимые нормы. Возникает необходимость не только в мониторинге, но в прогнозировании величины концентрации PM 2.5 в атмосфере города. Одним из способов прогнозирования является построение моделей регрессии главных компонент, что позволяет улучшить экстраполяционную способность моделей и тем самым повысить качество прогноза [1].

Данные метеоусловий и концентрации твердых взвешенных частиц PM2.5 за период с 2019 по 2023 гг. были получены из модели реанализа National Centers for Environmental Prediction Global Forecast System (NCEP GFS) [2] и наземных станций оперативного мониторинга [3].

В качестве моделей прогнозирования использовались модели линейной регрессии: множественная линейная регрессия, Lasso (L1-регуляризация), Ridge (L2-регуляризация), полиномиальные регрессии 2 и 3 степени. Каждая из моделей обучалась на пяти вариациях выборок: 8 главных компонент (80% дисперсии) с отбором по корреляции с PM 2.5 и без отбора; признаки, входящие с наибольшими весами в 8 главных компонент (с отбором по корреляции с PM 2.5 и без отбора); выбранные данные по метеоусловиям с модели реанализа NCEP GFS и с наземных станций мониторинга. Используемые данные в зависимости от значений концентрации PM 2.5 были разделены на временные периоды приблизительно соответствующие сезонам года. В ходе построения моделей были выявлены лучшие по качеству прогнозирования на каждом временном периоде (таблица 1).

Таблица 1. Лучшие модели регрессии на тестовой выборке.

Период	Тип модели	Вариация выборки	R^2	MSE
Зимний	Полиномиальная регрессия 2 степени	Исходные данные метеоусловий	0,76	346,76
Весенний	Ridge	Признаки, входящие с наибольшими весами в главные компоненты	0,36	32,29
Летний	Линейная регрессия	Исходные данные метеоусловий	0,51	24,08
Осенний	Ridge	Признаки, входящие с наибольшими весами в главные компоненты	0,51	15,61

Среди моделей бустинга регрессий лучшее качество прогнозирования показала модель, обученная на признаках, входящих с наибольшими весами в 8 главных компонент. В весенний период качество прогноза это модели выше, чем для всех рассмотренных регрессионных моделей: $R^2 = 0,55,\ MSE = 27,97$.

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

Литература:

[1] Abdullah S., Ismail M., Fong S. Y., Ahmed N., Evaluation for Long Term PM 10 Concentration Forecasting using Multi Linear Regression (MLR) and Principal Component Regression (PCR) Models. Environment Asia. V.9, № 2. P. 101-110 (2016).

[2] The Global Forecast System (GFS) [Электронный ресурс]. URL: https://www.emc.ncep.noaa.gov/emc/pages/numerical_forecast_systems/gfs.php (дата обращения: 21.06.2023).

[3] Геопортал — данные оперативного мониторинга [Электронный ресурс]. URL: http://sensor.krasn.ru/sc/ (дата обращения: 21.06.2023).

Проектирование оптимальной беспроводной внутренней сети для использования технологии интернета вещей

Сиротинин Анатолий Андреевич
Институт вычислительного моделирования СО РАН

В настоящее время существует проблема организации беспроводной сенсорной сети для технологии интернета вещей [1]. Беспроводная сенсорная сеть (БСС) является перспективным инструментом для создания безопасного и комфортного автоматизированного рабочего пространства. БСС — это распределенная система миниатюрных электронных устройств, таких как датчики дыма, открытия дверей, влажности, протечки, температуры и исполнительных устройств. Такая сеть собирает данные о параметрах среды и передает их на сервер с помощью беспроводного подключения. Так как большинство параметров от датчиков являются критически важными, необходимо обеспечить стабильную и надежную работу сети. В устройствах интернета вещей для обмена данными внутри помещений самыми распространёнными являются стандарты Wi-Fi, Bluetooth, Z-Wave, Thread и ZigBee [2]. Для функционирования БСС требуются точки доступа (хабы), поэтому при выборе их мест расположения должны учитываться конструктивные особенности здания, материалы конструкций и отделки.

Для решения задачи оптимального расположения точек доступа необходимо комбинировать радиоволновое моделирование с подходящими оптимизационными методами, например, такими как генетические алгоритмы [3].

Целью настоящей работы является проектирование оптимальной базовой сети для технологии интернета вещей. Построение сети рассматривается на примере здания научного института. Задача оптимизации заключается в оптимальной расстановке хабов с учётом максимально возможного уровня мощности сигнала и минимально возможных затрат на хабы и коммуникации.

$$\sum_{i=1}^{N_p} RSS_i \to max,\ \sum_{i=1}^{N_p} (C_i + H_i)x_i \to min,\ \ x_i \in \{0,1\}, \forall i \in [1; N_p],$$

где N_p — количество клеток, на которое разбивается исследуемое здание, RSS_i — уровень мощности сигнала в i-ой клетке, C_i, H_i — стоимость коммуникаций и хабов соответственно, $x_i = 1$ — хаб установлен в i-ой клетке, $x_i = 0$ — нет.

Поставленная задача оптимизации решается при помощи генетического алгоритма. В качестве хромосомы выбран вектор x_i, который описывает расстановку хабов во всём институте.

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

Литература:

[1] Арефьев А. В., Афанасьева О. В., Вешев Н. А. и др. Проблемы построения больших локальных сетей интернета вещей. Известия Тульского государственного университета. Технические науки, Т. 10, С. 261-267 (2022).
[2] Wang W., Capitaneanu S.L., Marinca D., Lohan E.S. Comparative analysis of channel models for industrial IoT wireless communication. IEEE Access, V.7, PP. 91627-91640 (2019).
[3] Singh A., Sharma S., Singh, J. Nature-inspired algorithms for wireless sensor networks: A comprehensive survey. Computer Science Review, V.39, P.100342 (2021).

Выделение локально-климатических зон города по спутниковым данным

Таныгин Кирилл Евгеньевич
Институт космических и информационных технологий СФУ

Города характеризуются высокими значениями показателей плотности и численности населения, и антропогенными поверхностями, созданными в результате активной деятельности человека. На урбанизированной территории формируется особый городской климат [2, 3]. Примером существования городского климата может служить явление городского острова тепла (*urban heat island — UHI*) [3] или образование смога в черте города. Для изучения городского климата выделяют урбанизированные территории и сельскохозяйственное окружение города. Такая классификация не дает однозначной информации о структуре, покрове поверхности и типе деятельности человека на рассматриваемой территории, поэтому с 2012 года существует система классификации локальных климатических зон (*Local Climate Zone — LCZ*) [2], которая стандартизирует обмен данными в сфере изучения климата городов.

Локальная климатическая зона (ЛКЗ) — область с однородным поверхностным покровом, структурой, материалами и особой деятельностью человека. В горизонтальном масштабе ЛКЗ обладает размером от ста метров до нескольких километров. Существует 17 ЛКЗ, каждая зона имеет свое название, номер и отличается высотой объектов и покровом [2]. Для выделения зон применяют данные дистанционного зондирования, картографические данные и пиксельную классификацию [1]. ЛКЗ можно выделить в любом городе. Рассмотрим ЛКЗ на территории города Красноярска.

Красноярск отличается перепадами высот, развитой промышленностью и наличием широкой реки в черте города. Эти факторы оказывают влияние на городской климат, и оценить воздействие этих факторов позволит система классификации ЛКЗ. Классификация была произведена с помощью веб-приложения *LCZ Generator* [1]. Для получения ЛКЗ была создана обучающая выборка. Создание обучающей выборки основывалось на высоте и плотности застройки, типе покрытия поверхности и на функциональном назначении территории. В городе было выделено 12 ЛКЗ. Было решено исключить зоны компактной застройки, зону облегченной малоэтажной застройки и земельный покров кустарников, так как они или не представлены в пределах города или занимают малую площадь. Для проведения классификации на основе обучающей выборки *LCZ Generator* использует данные *Landsat 8, Sentinel 1, Sentinel 2*, а также цифровые модели рельефа [1]. В результате была получена карта ЛКЗ на территорию г. Краснояска, с точностью 65%. Точность может быть повышена, если разработать более точную обучающую выборку.

С применением районирования на основе локальных климатических зон, возможно изучение городского климата. Результат может быть применим для исследования показателей микроклимата. Для каждой из зон можно рассчитать температуру воздуха, температуру поверхности, концентрацию загрязняющих веществ и другие показатели.

Литература:

[1] Demuzere M., Kittner J., Bechtel B. LCZ Generator: A Web Application to Create Local Climate Zone Maps // Front Environ Sci. Frontiers Media S.A., 2021. Vol. 9. P. 637455.
[2] Stewart I.D., Oke T.R. Local Climate Zones for Urban Temperature Studies // Bull Am Meteorol Soc. American Meteorological Society, 2012. Vol. 93, № 12. P. 1879–1900.
[3] Zhao H., Fang Y., Xu X. Quantifying morphology evolutions of urban heat islands and assessing their heat exposure in a metropolis // Sustain Cities Soc. Elsevier, 2024. Vol. 102. P. 105244.

Теория связанных мод для супер-связанных состояний в континууме, наблюдающихся в момент слияния резонансов

Шадрина Галина Владимировна
Институт вычислительного моделирования СО РАН

Связанные состояния в континууме (ССК) реализуются в бесконечных фотонных кристаллах (ФК) и представляют собой моды с теоретически бесконечной добротностью (Q) [1]. Однако, для конечных ФК они превращаются в квази-ССК с конечным Q фактором, асимптотическое поведение которого обычно подчиняется степенному закону $Q(N) \sim N^{\alpha}$. Где $\alpha = 2$ для защищенных по симметрии ССК, и $\alpha = 3$ для так называемых случайных ССК в Г-точке. Малые цепочки могут обладать высокой добротностью, если показатель α велик. Такая ситуация имеет место в случае дипольной цепочки, впервые предложенной Корнованом и др. [2], когда $\alpha > 6.88$ при гибридизации первой и третьей стоячих мод. Позднее, в статье [3] рассматривается механизм супер-ССК, приводящий к увеличению α от 2 до 3 на массиве коаксиальных дисков за счет пересечения частот двух симметрийно-защищенных (СЗ) ССК в Г-точке.

В этой работе мы исследовали пересечения частот двух симметрийно-защищенных ССК, которое сопровождается слиянием одного из СЗ ССК и ССК Фридриха-Винтгена в случае одномерной решетки диэлектрических стержней. Слияние ССК в Г-точке наблюдается как в импульсном пространстве блоховского вектора k_x , так и волнового вектора k_z , направленного вдоль стержней, образующих решетку.

Помимо этого, предложенная нами аналитическая теория показывает смену асимптотического поведения добротности от числа резонаторов от N^2 к N^3 при пересечении частот (avoided crossing). Наше рассмотрение конечной цепочки основывается на разделении вкладов в радиационные потери. Один вклад обусловлен потерями с концов и имеет универсальную зависимость $1/Q_{(end)} \sim 1/N^3$, другой вклад от излучения с поверхности со стандартным поведением $1/Q_{(aside)} \sim 1/N^2$, и по этой причине в обычной ситуации концевые потери не проявляются, поскольку доминирует всегда поверхностный вклад. Однако возможен случай, когда поверхностное затухание подавлено, благодаря механизму слияния ССК, как в нашем случае, то есть ведет себя как $1/Q_{(aside)} \sim 1/N^6$. Тогда главную роль в затухании играют именно концевые потери. Численный эксперимент подтверждает результат теории.

Таким образом, мы предлагаем способ реализации супер-квази-ССК в одномерных решетках за счет механизма avoided crossing СЗ ССК, который сопровождается слиянием СЗ и ФВ резонансов, при этом показатель α для конечной цепочки увеличивается с 2 до 3. Дополнительно, добротность может быть на два порядка повышена благодаря подавлению концевого затухания при оптимальном выборе закона растяжения.

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00070).

Автор выражает благодарность соавторам работы А.Ф. Садрееву и К.Н. Пичугину (ИФ СО РАН) и научному руководителю Е.Н. Булгакову.

Литература:

[1] C.W. Hsu et al, Nat. Rev. Mater, V.1, P. 16048 (2016).
[2] D.F. Kornovan et al., ACS Photonics, V.8, P. 3627 (2021).
[3] Z. Zhang et al., Phys. Rev. Appl., V.20, P. 2331 (2023).

Моделирование турбулентного течения неньютоновской жидкости с крупнодисперсными тяжёлыми частицами в круглой горизонтальной трубе

Шебелев Александр Валерьевич, Гаврилов Андрей Анатольевич, Минаков Андрей Викторович
Сибирский федеральный университет

В работе представлены результаты моделирования двухфазного турбулентного неньютоновского течения с крупными частицами, используя одножидкостную модель [1]. Модель включает уравнения для двухфазного течения с реологическими соотношениями и уравнение для переноса концентрации частиц с учётом межфазного скольжения. Модель турбулентности учитывает модуляцию турбулентности частицами. Реология жидкости описывалась моделью Гершеля — Балкли. Исследовалось влияние числа Рейнольдса и реологической параметров модели на характеристики течения. На основе сравнения с экспериментальными данными [2] и данными DNS-DEM моделирования [2] показано, что предложенная модель позволяет удовлетворительно предсказывать распределение концентрации частиц, скорости частиц и несущей жидкости и перепада давления в канале.

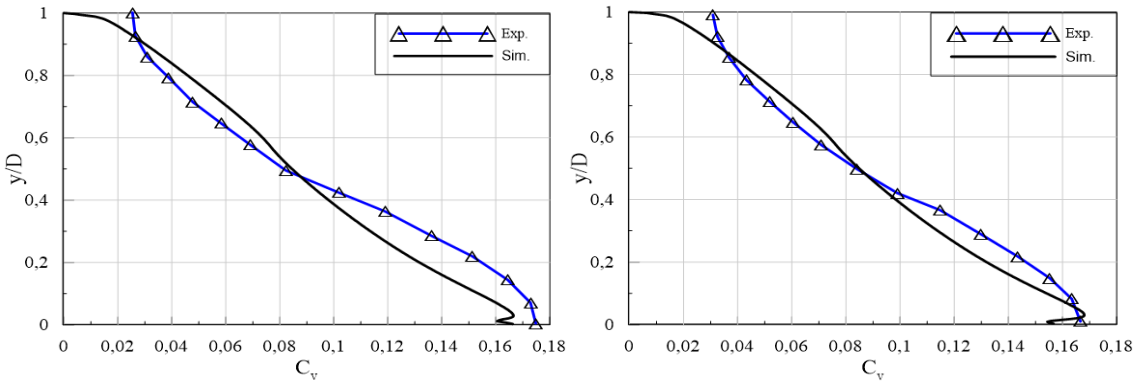


Рис. 1. Распределение концентрации частиц по высоте канала для чисел Рейнольдса Re=6000 (слева) и Re=8500 (справа).

На рисунке 1 показан график распределения концентрации частиц по высоте трубы. Наблюдается хорошее совпадение профилей концентрации по максимальной величине у нижней стенки. При этом профили распределения концентрации частиц в расчете оказываются более равномерными. В эксперименте слой частиц с концентрацией более 12% у нижней стенки имеет несколько большую высоту.

Благодарности:
Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-79-30022 https://rscf.ru/project/23-79-30022.

Литература:

[1] Гаврилов А.А., Шебелев А.В. Теплофизика и аэромеханика, Т. 27, № 3, С. 403-421 (2020).
[2] Enzu Zheng, Murray Rudman, Shibo Kuang, Andrew Chryss. International Journal of Multiphase Flow, V. 142, P. 17 (2021).

Численное исследование влияния вязкости жидкости на темп деформации в процессе разрушения капли в потоке за ударной волной

Шебелева Анна Андреевна, Округина Анастасия Константиновна
Сибирский федеральный университет

В последние десятилетия изучению аэродинамического диспергирования капель уделялось достаточно большое внимание, это связано с широким научным и прикладным значением рассматриваемой тематики. Воздействие аэродинамических сил на каплю жидкости приводит к ее деформации и дальнейшему разрушению. В настоящей работе представлены результаты численного моделирования влияния вязкости жидкости в диапазоне $0{,}001 \leq \mu \leq 0{,}1$ на вторичное разрушение капли. На каплю воздействует проходящая ударная волна, генерирующая воздушный поток со скоростью 78,3 м/с, коэффициент поверхностного натяжения был равен 0,073 Н/м. Задавались следующие физические свойства воздуха: плотность $\rho_g = 1{,}7$ кг/м^3, вязкость $\mu_g = 1{,}789 \cdot 10^{-5}$ Па·с. Для моделирования был использован пакет программ Ansys Fluent. Подробное описание численной методики расчета, а также верификация представлены в работе [1].

В таблице 1 представлены основные параметры и количественные результаты расчета. Как видно, с увеличением вязкости жидкости, время индукции разрушения, а также отношение темпа поперечной деформации капли в процессе разрушения увеличивается, d_{max} — это максимальный размер миделя капли в процессе разрушения, а d_0 — начальный размер капли, равный 2,8 мм.

Таблица 1. Результаты расчета.

Тип разрушения	Вязкость жидкости μ_1, Па·с	Время индукции разрушения t, мкс	Темп поперечной деформации d_{max}/d_0	Число Онезорге Oh
«Срыв жидкого погранслоя с экватора капли»	0,001	234	1,177	0,002
	0,01	331	1,308	0,022
«Парашютный режим со струйкой»	0,05	495	1,605	0,111
	0,1	660	2,008	0,221

Для количественной оценки деформации капли и полученных режимов разрушения, были рассмотрены следующие показатели: период индукции массоуноса $t_i = 0.36(d_0/\mu_g)(\rho_1/\rho_g)^{0.5} = 312$ мкс, а также время взаимодействия капли с потоком $t_0 = (d_0/\mu_g)(\rho_1/\rho_g)^{0.5} = 867$ мкс. Проведено сравнение полученного в расчетах периода индукции с экспериментальными данными из работы [2], судя по результатам, расхождение расчетов и экспериментов порядка ~5%, что говорит о хорошей разрешающей способности используемой численной методики и возможности ее использования для получения новых, недоступных для экспериментов данных.

Исследование осуществлено при поддержке КГАУ «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности» в рамках научного проекта «Исследование особенностей вторичного дробления капель органоводоугольного топлива с целью совершенствования технологий его сжигания в арктических условиях» № 20231113-06407.

Литература:

[1] Poplavski S. V., Minakov A. V., Shebeleva A. A., Boyko V. M., International journal of multiphase flow, V. 127, Art. 103273 (2020).
[2] Поплавский С. В., Параметрическое исследование разрушения капли за ударной волной по механизму срыва пограничного слоя, ПМТФ, Т. 63, N-◦3, С. 43-53 (2022).

Расчетно-экспериментальное исследование снарядного режима течения нефть — суспензия SiO_2 в Y-образном микроканале

Шебелева Анна Андреевна, Лобасов Александр Сергеевич
Сибирский федеральный университет

Проведено расчетно-экспериментальное исследование снарядного режима течения нефть-водная суспензия диоксида кремния различной концентрации 0 — 10 % со средним размером наночастиц 10 нм, где 0% концентрация наножидкости соответствует воде. Экспериментальное исследование проведено на чипе с Y-образным микроканалом, изготовленным из полимера (ПДМС) методами безмасковой литографии и анизотропного реактивно-ионного травления. Размеры входных каналов 40×40×3000 мкм, выходных каналов 40×80×10000 мкм, что соответствует гидравлическому диаметру 53,3 мкм. Физические свойства рассматриваемых жидкостей представлены в таблице 1. Эксперименты проводились в широком диапазоне расходов нефти $1 \leq Q_0 \leq 8$ мкл/мин, которая подавалась через один из входов в микроканал, и расходе суспензий $0{,}5 \leq Q_S \leq 50$ мкл/мин, которые подавались через другой вход. Жидкости закачивались в микрофлюидный чип с Y-микроканалом с помощью двух шприцевых насосов, для визуализации режимов течения к микроскопу была подключена высокоскоростная камера, частота съемки была постоянной на всем протяжении эксперимента и равной 1 мс.

Таблица 1. Физические свойства жидкостей

Параметр	Нефть	**0**% суспензия SiO_2 (Вода)	1% суспензия SiO_2	10 % суспензия SiO_2
ρ, кг/м^3	826	997	1002,5	1054.7
μ, мПа с	8,471	0,894	0,904	1,3411
σ, мН/м	30,81		21,26	17,88
θ, °	151,0		161,2	161,7

Для моделирования двухфазного течения несмешивающихся жидкостей в пористых средах использовался гидродинамический подход, в рамках которого микротечения моделировались посредством решения системы уравнений Навье-Стокса, подробное описание численной методики представлено в работе [1].

В результате расчетов и экспериментов было установлено, что снарядный режим течения, для данного микроканала и исследуемых наборов жидкостей, существует при расходах нефти $1 \leq Q_0 \leq 4$ мкл/мин. Важным для практики количественным параметром снарядного режима течения, является длина снаряда. Было выявлено, что добавление различных концентраций диоксида кремния 0 — 10 % влияет на размер снарядов и на изменение расстояния между ними. При увеличении концентрации SiO_2 длина снарядов увеличивается, расстояние между ними уменьшается. При увеличении расхода суспензии зависимость длины снаряда от концентрации наночастиц сохраняется. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных, было выявлено, что численная методика хорошо описывает процесс формирования снаряда и его движение по каналу в одни и те же моменты времени.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (номер FSRZ-2020-0012).

Литература:

[1] Minakov A. V., Lobasov A. S., Shebelev A. V., J. Appl. Ind. Math., V.16, P. 490–500 (2022).

Влияние расположения высотных зданий на аэрационный режим городского каньона

Шульженко Полина Дмитриевна, Дектерев Александр Анатольевич, Мешкова Виктория Дмитриевна.
Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ

Здания, являющиеся элементарными единицами городского пространства, искажают натуральный ландшафт местности, что приводит к изменению движения потоков ветра в пределах городского пространства, тем самым меняя естественный аэрационный режим территории. [1]. Чтобы уменьшить риски и обеспечить правильную продуваемость в городских/уличных каньонах, необходимо изучить, как различные виды зданий и геометрические особенности самого каньона влияют на скорость и направление воздушных масс внутри него. Одним из способов систематизации знаний и изучения различных особенностей задачи может стать численное моделирование [2].

Цель исследования заключалась в изучении ветровых условий, которые формируются в уличных каньонах в модели застройки, состоящей из высотных зданий. В качестве объекта исследования были выбраны два микрорайона, состоящих из 9 зданий, высотой 180 м. Первый вариант состоял из трех параллельно стоящих рядов зданий по три, во втором также использовались три ряда, но со сдвигом каждого ряда на 30 метров вправо.

Исследование проводилось с помощью метода вычислительной гидродинамики. В расчете использовалась микромасштабная численная модель атмосферы городской среды, основанная на нестационарных осредненных по Рейнольдсу уравнениях Навье-Стокса для несжимаемых течений с переменной плотностью, которая включает в себя уравнения неразрывности, движения и сохранения энергии. В качестве базовой модели турбулентности используется двухпараметрическая модель k-ω SST [3]. Профиль скорости на входе задавался согласно логарифмическому закону, равному $v_{h_{10}} = 2{,}5$ м/с (скорость на высоте 10 м). Численное моделирование осуществлялось с использованием программного комплекса SigmaEco [4].

Проведенный анализ показал, что данный морфотип района является неблагоприятным для проживания и ежедневной жизнедеятельности человека в его пределах. Скорости потока внутри небольших каньонов достигают предельных значений комфортности для человека (v=5 м/с). Ветровой поток в данных областях не имеет четкой симметричной структуры, приобретая пульсирующий характер, а также в них формируются большие вихревые структуры, не являющиеся комфортными для человека. Несмотря на это, хаотичность движения ветрового потока является хорошим фактором для аэрации пространства от различных веществ. Опасные для человека частички с самого низа постоянно поднимаются потоком, циркулирующем в верхней половине пространства, таким образом, медленно вытесняя их.

Литература:

[1] Мягков М.С. Алексеева Л.И., Особенности ветрового режима типовых форм городской застройки. AMIT 1, С. 29 (2014).
[2] Oke T. R., Mills G., Christen A., Voogt J., Urban Climates. Cambridge University Press, P. 542 (2017).
[3] Filimonov S. A., Meshkova V. D., Dekterev A.A. and et al., Analysis of vortex structures formed in the winter in the atmosphere of Krasnoyarsk city. Journal of Physics: Conference Series, V. 2088, P 1-8 (2021).
[4] F.R. Menter. Zonal two-equation k-ω turbulence models for aerody-namic flows. AIAA Paper, V. 93-2906, P. 21 (1993).

Секция «Школы РАН»

Получение нового (POCOP^{Ph}) пинцерного комплекса никеля с терминальным OH-содержащим лигандом

Авдей Яна, Литвяк Зоя
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

В настоящее время пинцерные комплексы являются одним из наиболее активно исследуемых классов металлических комплексов. Значительный прогресс достигнут в изучении противоопухолевой активности пинцерных комплексов, металлическим центром которых являются золото, медь, железо, никель и другие металлы [1]. Известно, что биологическую активность соединениям могут придавать гидроксильные и этинильные группы [2]. В контексте получения новых эффективных лекарственных препаратов актуальным является изучение возможности введения 2-метил-3-бутин-2-ола в пинцерный (POCOP^{Ph}) комплекс никеля.

Для синтеза целевого соединения использовали исходный реагент, полученный из йодсодержащего пинцерного комплекса никеля (рис. 1). В ходе экспериментов было установлено, что реакция между галогенидным комплексом никеля и терминальным лигандом не протекает.

Синтез пинцерного (POCOP^{Ph}) комплекса никеля, содержащего терминальный 2-метил-3-бутин-2-ол лиганд, проводили в атмосфере аргона, используя эквимолярное количество исходных реагентов. Контроль за реакцией осуществляли методом тонкослойной хроматографии. Продукт реакции перекристаллизовывали из смеси растворителей CH_2Cl_2:Et_2O в соотношении 1:2. В результате был получен новый пинцерный комплекс никеля в виде желтого мелкокристаллического порошка с выходом 98%.

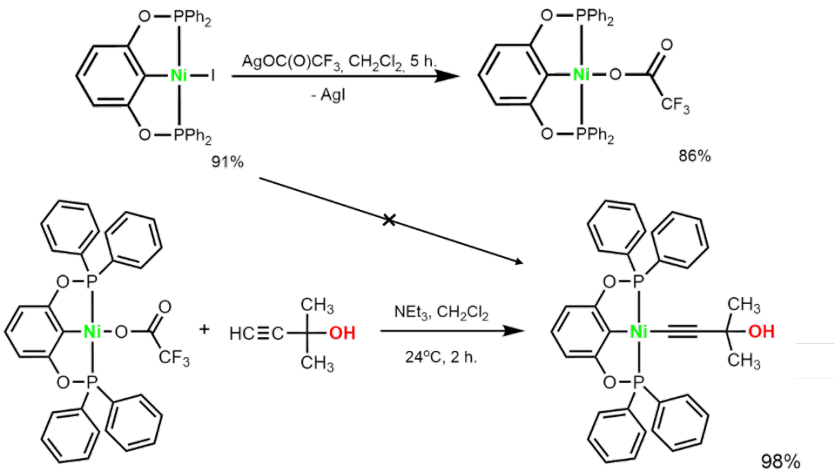


Рис. 8. Схема синтеза нового пинцерного (POCOP^{Ph}) комплекса никеля с терминальным OH-содержащим лигандом.

Таким образом, получен с количественным выходом новый пинцерный (POCOP^{Ph}) комплекс никеля, содержащий терминальный 2-метил-3-бутин-2-ол. Строение синтезированного соединения подтверждено методами ИК- и ЯМР-спектроскопии.

Авторы выражают благодарность соавторам работы: Волковой Д.С., Иваненко Т.Ю.

Литература:

[1] Wu S., Wu Z., Ge Q., Zheng X., Yang Z., Organic and Biomolecular Chemistry, V. 19, PP. 5254-5273 (2021).
[2] Yao H., Xie S., Ma X., Liu J., Wu H., Lin A., Yao H., Li D., Xu S., Yang D.-H., Chen Z.-S., Xu J., Journal of Medicinal Chemistry, V.63(15), PP. 8157–8178 (2020).

Синтез и изучение люминесцентных свойств комплексов меди(I) с куркумином

Афанасьева Ева, Новоселов Степан
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Важнейшим применением люминесценции является создание источников искусственного света, сигнальных устройств и других светотехнических приборов. Широкое применение на предприятиях, заводах и в быту нашли люминесцентные лампы с так называемым двухступенчатым преобразованием электрической энергии в видимый свет. На данный момент в России не так много производителей люминесцентных материалов. Заменить трудно синтезируемые органические соединения могли бы выделяемые из природного сырья дикетоны. Например, куркумин, который уже давно применяют в синтезе металлоорганических соединение. Однако до этого никто не изучал ни его самого, ни полученные комплексы на предмет люминесцентных свойств.

Целью данной работы является синтез и изучение свойств комплекса куркумина с медью(I) и PPh3 в качестве солиганда.

Для этого мы синтезировали комплекс по модифицированной методике представленной[1]. Чистый куркумин смешивали с хлоридом меди и PPh3 в равных пропорциях в дихлорметане при интенсивном перемешивании. По истечению 30 минут, дихлорметан упаривали и полученные кристаллы снимали на ИК-спектрометре(рис 2).

Как видно из смешения полосы поглощение карбонильной группы, координация произошла успешно[2]. В дальнейшем исходный дикетон и полученные комплекс изучали на флюорате. По увеличение интенсивности люминесценции можно сказать, что квантовый выход комплекса значительно выше исходного дикетона.

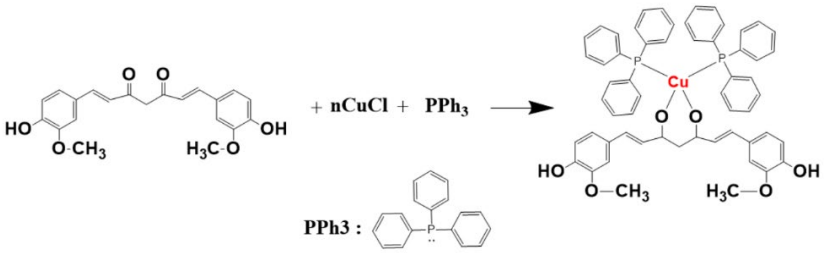


Рис 1. – Схема синтеза куркумина.

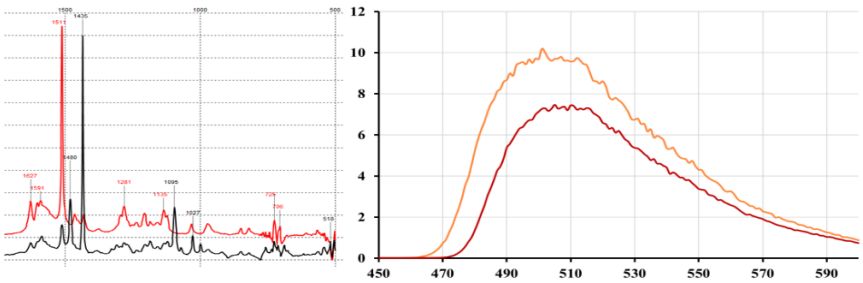


Рис 2. – ИК и люминесцентные спектры куркумина и комплекса.

Литература:
[1] Padhye, S., Yang, H., Jamadar, A. et al. New Difluoro Knoevenagel Condensates of Curcumin, Their Schiff Bases and Copper Complexes as Proteasome Inhibitors and Apoptosis Inducers in Cancer Cells. Pharm Res 26, 1874–1880 (2009).
[2] Saloutin, V.I.; Edilova, Y.O.; Kudyakova, Y.S.; Burgart, Y.V.; Bazhin, D.N. Heterometallic Molecular Architectures Based on Fluorinated β-Diketone Ligands. *Molecules* 2022, *27*, 7894.

Персонификация питания у школьников: биоимпедансный и антропометрический анализ

Ткавашвили А.И., Илларионова М.А., Деймунд Д.А., Михейлидзе З.Е., Катышев Д.Е., Зырянов В.О.
МАОУ "Гимназия №13 "Академ"

Питание играет решающую роль в профилактике некоторых заболеваний, все больше современных научных исследований нацелены на разработку персонализированного питания, учитывающего конкретные особенности человека (антропометрические параметры, тип метаболизма, генотип). Целью данного исследования было провести биоимпедансный и антропометрический анализ среди школьников 10-11 классов и выявить закономерности между типом метаболизма, составом и внешними параметрами тела.

Исследование проводилось на выборке учащихся 10-11 классов Гимназии №13 «Академ» г. Красноярск в возрасте от 16 до 17 лет (71 человек, 54% - девушки, 46% - юноши). От участников были получены информированные согласия. Биоимпедансные измерения (вес, процент жира в организме, индекс массы тела (ИМТ)) производили при помощи весов BC-731/732 (Tanita, Япония). Антропометрические показатели (рост, обхват груди и талии) измеряли при помощи сантиметровой ленты для измерения объема тела (портновских сантиметров). Определение типа метаболизма осуществлялось при помощи опросника «The metabolic type self-test» [1], рекомендованного и согласованного с к.м.н., диетологом Университетской клиники КрасГМУ им. Проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Чикуновым В.В. Анализ результатов и статистическая обработка проводились с помощью MS Excel и онлайн-калькулятора https://medstatistic.ru/. Статистически значимыми различия считали при $p<0,05$.

На основе распределения по ИМТ были выделены 3 группы: с нормальным весом (НВ) – 68%, с недостаточным весом (НДВ) – 20%, с избыточным весом (ИВ) – 12%. Наблюдалась связь между процентным содержанием жира в организме и ИМТ как в общей выборке ($p=0,017$), так и среди юношей ($p=0,019$) и девушек ($p=0,0049$). В группе ИВ до 33% обследованных имели повышенный процент жира, тогда как группе НДВ больше половины (57%) имели содержание жира в организме меньше нормы. При распределении по типу метаболизма у подавляющего большинства (90%) наблюдался смешанный тип метаболизма. Связи между группами по ИМТ и метаболическим типом не было установлено ($p=0,703$).

Показано, показатель «процент содержания жира» удобный для оценки состояния эффективности метаболических процессов в организме. Однако отсутствие статистически значимых различий между ИМТ и типом метаболизма на основе существующего опросника ограничивает возможности рекомендаций по питанию. Перспективным направлением в этом может являться нутригенетика – новый раздел генетики, изучающий влияние генетических особенностей человека на усвоение питательных веществ.

Выражаем благодарность кураторам исследования – младшему научному сотруднику НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Афоничевой Ксении Васильевне, студенту 3 курса ИФБиБТ СФУ Миронову Константину Вячеславовичу и научному руководителю – к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Смольниковой Марине Викторовне.

Литература:

[1] Uprightmovement - The Metabolic Type Self-Test. [Электронный ресурс]. URL: https://uprightmovement.com/wp-content/uploads/2014/06/The_Metabolic_Type_Self_Test.pdf [дата обращения 28.03.2024].

Этерификация левулиновой кислоты на твердом катализаторе

Варкентин Алена Владимировна, Утимишева Екатерина Сергеевна
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Растительная биомасса может сыграть решающую роль в качестве сырья для производства ценных химических продуктов и топлив, поскольку она является возобновляемым, распространённым по всему миру материалом. Исследование процессов переработки растительной биомассы в ценные химические вещества вызывает все больший интерес, а количество исследований, ориентированных на это направление, непреклонно растет [1-3]. Кожура апельсина является примером ЛЦБ, которая образуется в объеме 32 млн. тонн. в год. 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 [3]. 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.

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.

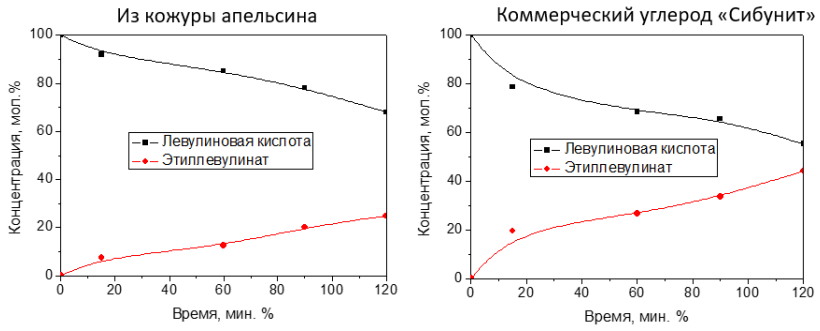


Рис. 1. Кинетика образования этиллевулината.

Катализатор на основе углеродного материала сибунит эффективнее примерно в два раза. Выход на 120 минутах – 44 %. Процесс требует дальнейшей оптимизации, из полученных 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).

Синтез аспирина на твердом кислотном катализаторе

Дружинина Виктория Васильевна, Добров Александр Филиппович
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Ацетилсалици́ловая кислота́ — лекарственное средство, оказывающее обезболивающее, жаропонижающее, противовоспалительное действие. Синтез аспирина классифицируется как реакция этерификации. Салициловую кислоту обрабатывают уксусным ангидридом, или уксусной кислотой, вызывая химическую реакцию, которая превращает гидроксильную группу салициловой кислоты в сложноэфирную группу (R-OH → R-$OCOCH_3$). Небольшие количества серной кислоты (и иногда фосфорной кислоты) почти всегда используются в качестве катализатора. Этот метод обычно демонстрируется в учебных лабораториях бакалавриата. Аспирин, ацетильное производное салициловой кислоты, представляет собой белое кристаллическое слабокислотное вещество с температурой плавления 136 °C (277 °F) и температурой кипения 140 °C (284 °F) [1,2].

В данной работе мы сообщаем о применении экологичного твердого кислотного катализатора, на основе углеродного материала Сибунит. По сравнению с жидким кислотами, твердые легко отделяются от реакционной смеси путем простой фильтрации. Данное преимущество приводит к уменьшению коррозии оборудования и снижению загрязнения [2]. В ходе работы были выполнены следующие задачи:

1. Синтезировать твердый кислотный катализатор окислив сибунит-4 влажным воздухом.
2. Провести синтез аспирина в объемной реакторе и реакторе проточного типа.

Методом высокоэффективной жидкостной хроматографии установлено:

В объемном реакторе выход аспирина составил 9.7 мол.%. В реакторе проточного типа выход аспирина составил 0.6 мол.%. Выход, полученный в объемном ректоре, соответствует известным в литературе, гораздо большие выходы можно получить, используя уксусный ангидрид вместо уксусной кислоты, однако уксусный ангидрид – прекурсор для наркотических веществ и оборот его строго ограничен.

Показана принципиальная возможность получения аспирина в реакторе проточного типа. Повысить выход можно уменьшив скорость потока и улучшив обогрев проточного реактора.

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] Kurniawansyah F. et al. Preparation of Solid Acid–Activated Carbon as Catalyst in Aspirin Synthesis //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1053. – №. 1. – С. 012059.
[2] Khatri C., Rani A. Synthesis of a nano-crystalline solid acid catalyst from fly ash and its catalytic performance //Fuel. – 2008. – Т. 87. – №. 13-14. – С. 2886-2892.

Механоактивация кератиносодержащего сырья для щелочного гидролиза

Задолинная Арина, Авулова Динара
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

На различных стадиях переработки продуктов животноводства около половины исходного сырья превращается в отходы. Их можно использовать эффективнее, получая продукты с добавленной стоимостью. Это касается, в частности, белоксодержащих отходов животноводства (перо, шерсть), основу которых составляет уникальный по своему составу, структуре и свойствам фибриллярный белок кератин. Кератин - это основа волос, шерсти, перьев, ногтей и т.д. Устойчивость кератина к химическим реагентам, внешним воздействиям, ферментам пищеварительных соков животных обусловлена главным образом наличием в структуре его дисульфидной (цистиновой) связи [1]. По этой причине большинство животных организмов усваивать этот белок в исходном состоянии не может. А вот личинки платяной моли благодаря ферменту кератиназе способны использовать шерсть в пищу. Чтобы перевести кератин в усваиваемое состояние, необходимо разрушить структуру белка. Подходящий для этого метод – щелочной гидролиз.

Однако, щелочной гидролиз кератинсодержащих отходов может быть не достаточно эффективным. Мы предположили, что механоактивация шерсти может быть подходящим способом подготовки сырья для интенсификации процесса. Целью исследования стало изучение влияния механоактивации шерсти на эффективность щелочного гидролиза.

В исследовании нами использовалась шерсть барана эдильбаевской породы. Подготавливали сырьё, тщательно промывая тёплой мыльной водой для удаления жиров и посторонних загрязнений, сушили при 70°C и нарезали на волокна длинной ~1 см. Помол проводили в планетарной микромельнице FRITSCH PULVERISETTE 7 premium line с размольным стаканом и шариками диаметром 10 мм из оксида циркония. Режим помола: первый цикл - 1 минута 200 оборотов в минуту; второй цикл - 5 минут 400 оборотов в минуту. Исследованы возможности сухого и влажного помола. Оказалось, что влажный способ неэффективен. Сухая щерсть успешно размалывается, при этом в выбранном режиме обработки образуется 2 фракции:

– крупный непромол, визуально изменившаяся шерсть, сбившаяся в плотные комки - 72 масс.%

– мелкая фракция с размером частиц < 0,25 мм - 28 масс.%

Гидролиз шерсти в выбранных условиях (70°C, 1 M NaOH, 2 ч) позволяет почти полностью растворить исходную и механоактивированную шерсть. Масса остатка 2 % в случае исходной шерсти и 0,8 % для механоактивированной. Подкислением соляной кислотой (HCl) до pH3 и фильтрацией удаётся выделить твёрдый продукт – вероятно, наиболее крупные молекулы кератина, связанные с чёрным пигментом, с выходом 11-12 мас.%. Около 85 мас.% кератина сохраняется в растворе в состоянии белковой дисперсии.

Получаемые продукты могут найти широкое применение в медицине и фармацевтике, косметологии, производстве пищевых добавок для животных.

Авторы выражают благодарность руководителю Голубкову В.А.

Литература:

[1] Голубков В. А., Бортников С. В. Вестник Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова. №. 1. С. 12-16. (2020).
[2] Сапожникова А. И., Есепенок К. В. Международный научно-исследовательский журнал. №. 11-1. С. 144-149. (2020).

Определение ионов свинца в снежных покровах Октябрьского района г. Красноярска спекрофотометрическим методом

Земцова А.В., Ладушкевич Д.В.
МАОУ Лицей №7
ИХХТ СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН

Свинец - это опасное вещество, которое может оказывать негативное влияние на организм человека. Каждый день вредные газы, выбрасываемые предприятиями, ТЭЦ и автомобилями, попадают в атмосферу и накапливаются в снежных покровах. В данной работе содержание железа определяли методом спектрофотометрии. Для оценки достоверности результатов использовали метод “введено-найдено”.

Цель работы: оценить уровень загрязнения свинцом снежных покровах Октябрьского района г. Красноярка спектрофотометрическим методом.

Методика обнаружения ионов свинца основана на реакции с дитизоном в щелочной среде, приводящей к образованию устойчивого окрашенного соединения красного цвета в четыреххлористом углероде [1]. На первом этапе работы определили максимум светопоглощения (λ =520 нм). Модельные растворы свинца использовали для построения градуировочного графика при этой длине волны и установления его концентрации в реальных образцах. Пробы снега отобрали в местах, отмеченных на карте (рис. 1). Погрешность спектрофотометических измерений составила 3-7 процентов. Найдено, что содержание свинца в исследуемых водах не превышает ПДК (1 мкг/л), но находится на достаточно высоком уровне в 0.6 мкг/л (образец 2) (рис. 2).

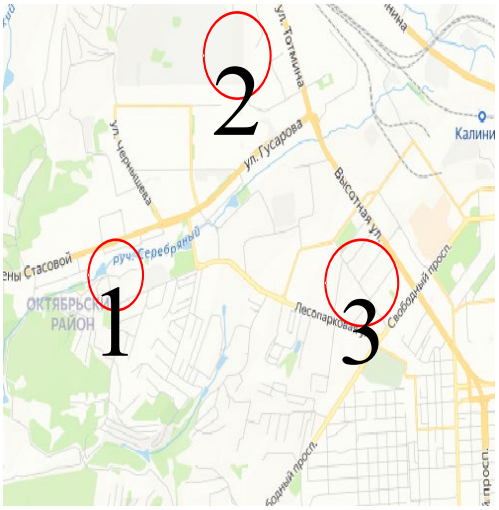


Рис. 1. Карта с местами пробоотбора.

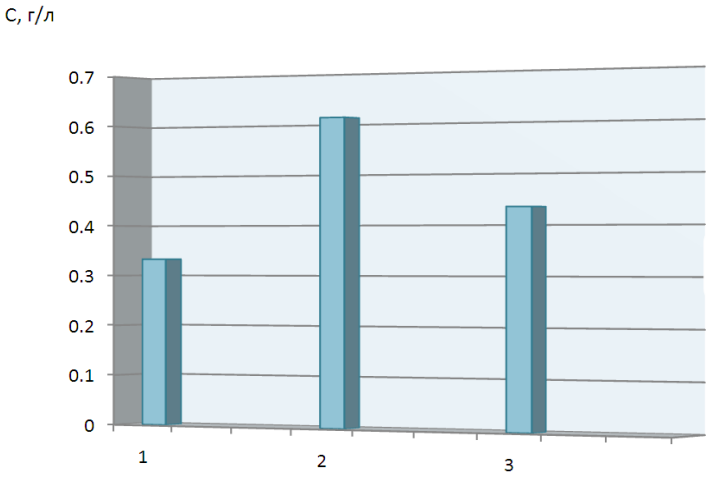


Рис. 2. Диаграммы с содержанием свинца в исследуемых образцах.

Таким образом, показано, что содержание свинца ниже ПДК, но достаточно высокое. Следовательно, необходимо периодически проводить работы по его мониторингу.

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

Литература:

[1] ГОСТ 12362-79. Фотометрический метод определения свинца (0,0005 - 0,01%). М: Госстандарт, 1985, 42 с.

Модификация природных полисахаридов с получением перспективных фармакологически активных водорастворимых полимеров

Капкан Софья, Минина Таисия, Хозяинов Вячеслав
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Полисахариды - жизненно важные биомакромолекулы, состоящие из гомо- гетеро-моносахаридов и уроновых кислот, связанных гликозидными связями. В настоящее время активно разрабатываются методы модификации полисахаридов растений различными методами. Так, модифицированные катионными и анионными группами полисахариды имеют значительные перспективы использования в различных областях, таких как очистка воды, производство бумаги, химическая, пищевая, косметическая и нефтяная промышленность [1]. Окисление первичных гидроксильных групп полисахаридов является одним из важных направлений их функционализации, приводящей к практически значимым полиуроновым кислотам, которые используются в качестве клеев, загустителей, добавок в пищевые и косметические продукты, красители и лекарственные препараты [2].

В данной работе разработан новый способ окисления галактоглюкоманнана ели (ГГМ) системой с 2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-ил-оксилом (ТЕМРО). Преимуществами такой системы является экологичность и высокая селективность окисления полисахаридов с сохранением полимерной структуры.

Проведено исследование зависимости доли уронидной составляющей ГГМ от продолжительности процесса окисления (рис. 1). Для образца ГГМ, окисленного ТЕМРО, доля уронидной составляющей значительно возрастала с 14,8 до 38,9 % и спустя 4 часа реакции изменялась незначительно.

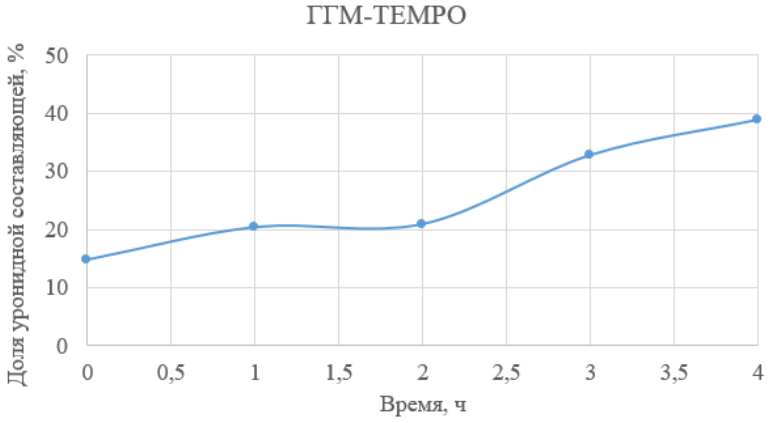


Рис. 1. Доля уроновых кислот в галактоглюкоманнане, окисленным ТЕМРО.

Структура окисленного ГГМ подтверждена методом ИК-спектроскопии: возрастает интенсивность области полос поглощения (п.п) карбоксильных групп 1650-1750 см$^{-1}$, что свидетельствует об увеличении количества карбоксильных групп в структуре ГГМ в ходе процесса окисления с ТЕМПО. Методом гель-проникающей хроматографии подтверждено сохранение полимерной структуры ГГМ в процессе окисления. Исследование антиоксидантной активности показало значительное увеличение восстановительной способности окисленного ГГМ, что открывает перспективы для дальнейшего применения.

Авторы выражают благодарность руководителю к.х.н., с.н.с. Маляру Ю.Н. и м.н.с. Ионину В.А. за помощь в исследовании.

Литература:

[1] Matsumura K., Rajan R. Current Organic Chemistry. Vol. 25 , N.13. (2021).
[2] Pierre G. et al. Carbohydrate polymers. Vol. 165. P. 71-85. (2017).

Количественный анализ минерального состава бентонитовых глин методом порошковой рентгеновской дифракции

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

Бентонитовые глины или бентониты – глинистые горные породы, это значимое для многих направлений народного хозяйства минеральное сырьё [1]. Основным компонентом является слоистый минерал группы смектита – монтмориллонит. Определение содержания монтмориллонита, или в более широком случае минерального состава, является важной задачей. В настоящее время наиболее корректным подходом для количественного анализа считается порошковая рентгеновская дифракция с применением метода Ритвельда [2]. Целью настоящей работы отработка методики количественного анализа минерального состава бентонитовых глин методом порошковой рентгеновской дифракции с моделированием по методу Ритвельда.

Материалом для нашего исследования послужили образцы бентонитовой глины месторождений «10-й Хутор» и «Кайбальское-2». Для обработки данных рентгеновской дифракции нами использовалась программа «Profex» [3]. Нами проведено моделирование дифрактограмм монтмориллонита по методу Ритвельда с использованием структурных моделей различной сложности – классической и учитывающей турбостатическую дизориентацию. Более сложная модель лучше описывает дифрактограмму. Химический анализ на карбонаты показал положительный результат для глины «10-й Хутор». Мы провели полнопрофильное моделирование дифрактограмм глины месторождений «10-й Хутор» и «Кайбальское-2» по методу Ритвельда, используя структурные модели минералов, выявленных на предшествующем этапе качественного анализа. Хорошие коэффициенты согласия и разностные дифрактограммы свидетельствуют об адекватности анализа (χ^2=1,27 и 2,07). Содержание монтмориллонита в глине «10-й Хутор» 70,2%, «Кайбальское-2» больше - 74%. Также в глине «Кайбальское-2» выше содержание кварца.

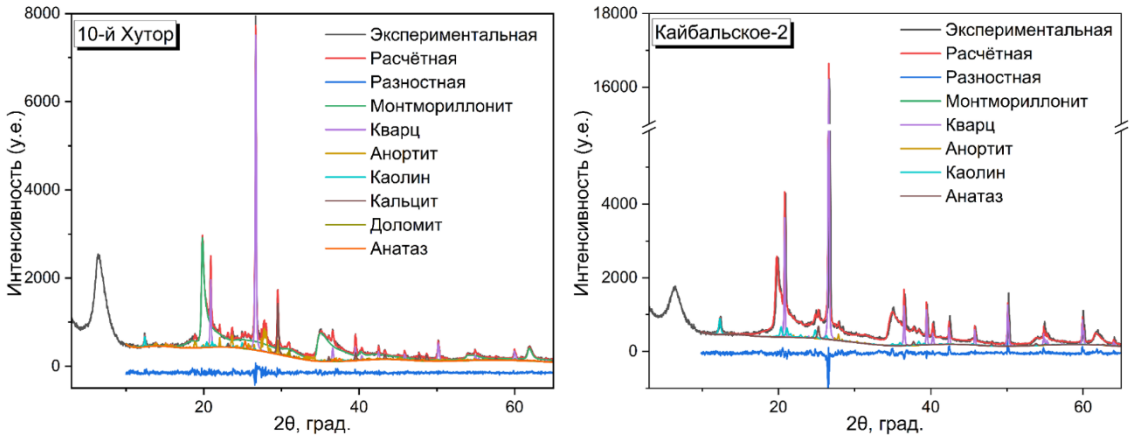


Рис. 1. Дифрактограммы образцов бентонитовой глины месторождений «10-й Хутор» и «Кайбальское-2».

Автор выражает благодарность руководителю Голубкову В.А. и д.х.н. Кирику С.Д. за помощь в исследовании.

Литература:

[1] Крупская В. В. Радиоактивные отходы, Т.2, С. 30-43. (2018).
[2] Белоусов П.Е. Георесурсы, Т. 22, №3, С. 38-47. (2020)
[3] Doebelin N., Kleeberg R. Journal of Applied Crystallography, T. 48, №5, PP. 1573-1580. (2015).

Сравнение протоколов криоконсервации клеток асцитной карциномы Эрлиха

Анушенков Платон, Бабичев Михаил, Вершинин Никита, Иванова Александра, Кузовков Владислав
[1]МАОУ Гимназия № 13 "Академ"

Совершенствование методов лечения онкологических заболеваний невозможно без экспериментальных исследований с использованием различных линий опухолевых клеток, в том числе перевиваемых моделей. Криоконсервация один из способов длительного сохранения клеточных линий для дальнейшего использования. Однако, значимой проблемой остается разработка протоколов криоконсервации опухолевых клеток, в результате которой будут сохранятся структурные и функциональные свойства клеток в том виде как до начала криовоздействия. [1, 2]. Асцитная карцинома Эрлиха (АКЭ) является распространенной моделью среди экспериментальных опухолей, которая позволяет в короткие сроки наблюдать классические стадии развития опухолевого процесса [3].

Цель работы – оценка жизнеспособности клеток АКЭ при различных протоколах криоконсервации.

Клетки АКЭ забирали у мышей (питомник Государственного научного центра вирусологии и биотехнологии «Вектор») на 9 сутки развития опухоли. Для криоконсервации АКЭ использовали 3 варианта сред, содержащих криоконсерватор, буферный раствор и сыворотку. Состав первой среды: раствор Хенкса, FBS и DMSO (10%). Вторая среда – среда DMEM, FBS и DMSO (10%). Третья среда – FBS, раствор глюкозы (40%) и DMSO (10%). Замораживание проводили в криопробирках (SSIbio, США) при -80° С. По истечении 1 месяца клетки АКЭ размораживали и определяли их жизнеспособность методом проточной цитометрии, Анализ полученных результатов проводили при помощи программного обеспечения CytExpert (Beckman Coulter, США).

В результате работы получено, что все среды, используемые в эксперименте, могут использоваться для криоконсервации клеток АКЭ, поскольку дают высокий (более 70%) выход живых клеток после размораживания. Наилучшим составом криосреды в описанных экспериментальных условиях можно считать комбинацию – DMEM, FBS и DMSO, поскольку содержание живых клеток в суспензии АКЭ статистически значимо отличается от среды 1. После введения размороженных клеток АКЭ мышам для классического способа поддержания линии – клетки АКЭ сохраняют высокую трансплантационную способность после замораживания. Было получено, что через 10 дней у животных всех групп в брюшной полости происходит образование асцита, в объеме равном накоплению аналогичного объема для нативной (не подвергавшейся заморозке) суспензии. На окрашенных цитологических препаратах показали наличие клеток АКЭ в суспензии, извлеченной у мышей на 10 сутки после трансплантации опухолевых клеток.

Авторы выражают благодарность научному руководителю к.б.н., с.н.с. ФИЦ КНЦ СО РАН Крюковой О.В. и консультанту к.б.н., руководителю группы молекулярно-генетических исследований *Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,* Смольниковой М.В.

Литература:

[1] Межевова И.В., Ситковская А.О., Кит О.И. Южно-российский онкологический журнал, №3, С. 36-49, (2020).
[2] Goltsev A.M.. Bondarovych M.O.. N. M. Babenko . Yu. O. Gaevska . T. G. Dubrava . M. V. Ostankov Effect of different cryopreservation regimens on Ehrlich carcinoma growth / // Cell Tissue Bank. 2019. Vol.20. P.411-421.
[3] Ozaslan M., Guldur M.E., Kilic I.H. Ehrlich ascites carcinoma. African journal of biotechnology, Vol.10, P.2375-2378 (2011).

Разработка метода определения аспартама (пищевая добавка Е951) в газированных напитках

Гельфанова Анастасия, Куц Сергей
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

До сих пор ученые не имеют единого мнения, насчет пользы или вреда аспаратма. Так институт Рамаззини (RI) сообщил в 2006 и 2007 годах, что аспартам вызывает дозозависимое увеличение злокачественных опухолей во многих органах у крыс и мышей. Повышенный риск развития рака наблюдался даже при низких уровнях воздействия, приближающихся к допустимой суточной дозе (ADI). (1)). Другие же исследователи пишут, что нет никакого негативного влияние на организм, наоборот аспартам снижает накопление липофусцина и улучшает мелкую моторику (2).

На данный момент, наилучшим методом определения наличия и содержания аспартама является высокоэффективная жидкостная хроматография. Однако, если посмотреть на строение аспратама, то можно заметить много функциональных групп, которые легко обнаружаются в ИК-спектре, на чем и строится наше исследование.

Целью данной работы является разработать метод определения аспартама в газированных напитках, используя ИК-спектрометр с приставкой НПВО. В качестве подтверждения будут использоваться ВЭЖХ спектры, снятые по ГОСТ Р ЕН 12856-2010.

Для разработки рабочей модели, нами были сняты ИК и ВЭЖХ спектры с заранее известной концентрацией Каждый из них показывал рост инстенсивности с ростом концентрации аспартама. Затем мы перешли к реальным объектам.

Нами были взяты 2 образца газировки разных известных брендов, производитель утверждает, что на 100 мл их продукции приходится 72 мг аспартама соответсвенно на 1 мл должно приходится 0.72 мг. Это важно понимать, потому что ИК-спектроскопия очень чувствительный метод, и для работы хватает 1-2 мл жидкости.

В результате было установлено, что на зафиксированных нами спектрах реальных образцов, при сравнении их с рабочей моделью можно сказать, что концентрация аспартама на 1 мл жидкости составляет 15-20 мг. ВЭЖХ это подтверждает.

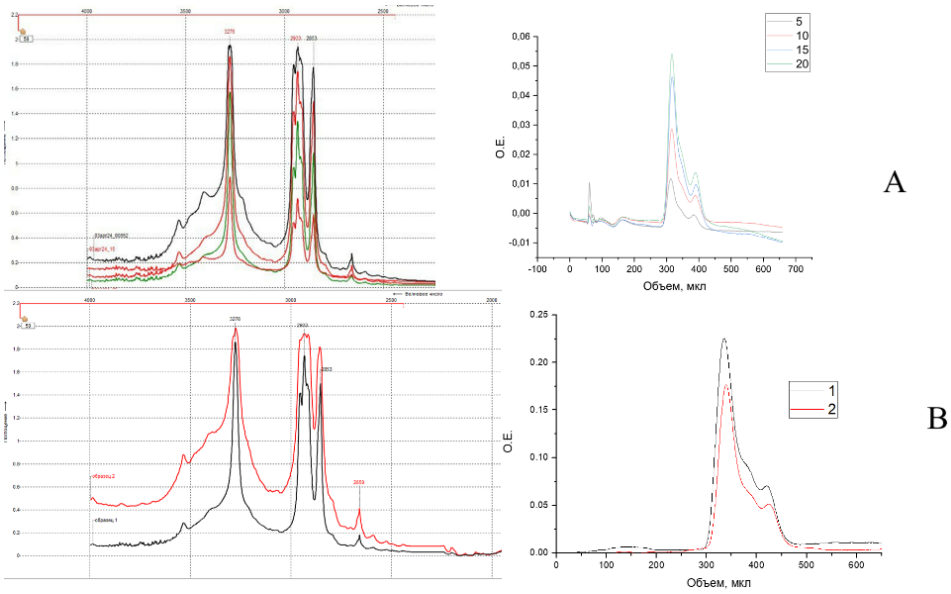


Рис 1 – Сравнение спектров рабочей модели А с реальными объектами В.

Литература:
[1] Soffritti M, et al. First experimental demonstration... Environ Health Perspect. 2006;14(3):379–85.
[2] Zhang M. Food Funct., 2021,12, 9912-9921.

Получение полисахаридов из древесины тополя

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

Тополь широко распространён в городах, и каждый год производят его санитарную обработку. В результате образуется большое количество древесинных отходов, которые практически никак не используются. Однако из древесины тополя можно получать востребованные химические продукты с добавленной стоимостью. Целлюлоза и гемицеллюлозы являются древесными полисахаридами, которые находят применение в получении целлюлозы, эфиров целлюлозы, моносахаридов, полиолов, биотоплив и других востребованных продуктов [1]. Традиционные технологии в основном направлены на получение целлюлозы, а гемицеллюлозная составляющая остается в виде отходов. Помимо этого традиционные технологии производства целлюлозы приводят к попаданию в окружающую среду миллионов тонн серы в виде сероводорода, органических сульфидов, сернистого ангидрида и других вредных соединений. В этой связи актуальна задача совершенствования методов фракционирования древесины с получением востребованных полисахаридов. В качестве исходного сырья использовали древесные опилки (фракция менее 2,5 мм) тополя, произрастающего в окрестностях г. Красноярск. Химический состав (мас. %): гемицеллюлозы – 24,1, целлюлоза - 42,0, лигнин - 23,3, экстрактивные вещества – 6,1, зола – 0,5. Фракционирование древесины тополя на полисахариды осуществляли по следующей схеме, изображенной на рис.1.Схема фракционирования включала следующие стадии: щелочная экстракция гемицеллюлоз из древесины тополя, получение целлюлозного продукта из лигноцеллюлозы пероксидной делигнификацией или пероксидная делигнификация исходной древесины тополя с получением целлюлозного продукта и осаждение этанолом гемицеллюлоз.

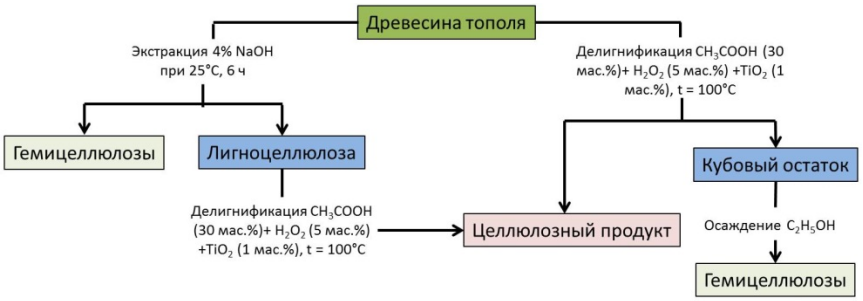


Рис. 1. Схема фракционирования древесины тополя на полисахариды.

В результате щелочной экстракцией и пероксидной делигнификацией в среде уксусная кислота в присутствии TiO_2 получены гемицеллюлозы и целлюлозные продукты. Установлено, что щелочной экстракцией древесины тополя выход гемицеллюлоз выше, чем при пероксидной делигнификации 16 мас. % и 9,8 мас. % соответственно. Моносахаридный состав полученных гемицеллюлоз идентичен. Преобладающим моносахаридом (до 89 мас.%) является ксилоза. Делигнификацией исходной древесины тополя был получен целлюлозный продукт с выходом 57 мас. %, с содержанием целлюлозы 78,1 мас. % и остаточным лигнином 0,8 мас.%. Содержание гемицеллюлоз составило 16,1 мас.%. Целлюлозный продукт, полученный после экстракции гемицеллюлоз, имеет меньший выход (38 мас. %), однако содержание целлюлозы составляет 91 мас. %. Содержиние остаточного лигнина не превышает 0,7 мас. %, а гемицеллюлоз – 5,9 мас. %.

Автор выражает благодарность руководителю Скрипникову А.М.

Литература:

[1]. Okolie J. A., Nanda S., Dalai A. K.Kozinski J. A., Chemistry and Specialty Industrial Applications of Lignocellulosic Biomass. Waste and Biomass Valorization, - 2021. - V. 12. - N. 5. - P. 2145-2169.

Получение и изучение новых функциональных материалов на основе галактоглюкоманнана ели Picea Abies

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

Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ) представляет собой возобновляемое экологичное сырье на основе углерода, являющееся перспективной альтернативой синтетическим полимерным материалам, которые пагубно влияют на окружающую среду. ЛЦБ состоит из углеводных полимеров (целлюлозы, гемицеллюлоз) и ароматического полимера (лигнина). Однако на сегодняшний день именно гемицеллюлозы (ГЦ) все больше привлекают внимание как у исследователей, так и на различных предприятиях благодаря комплексу ценных свойств и разнообразной структуре. Гемицеллюлозы состоят из различных моносахаридных единиц, связанных гликозидными связями, в различных количествах в зависимости от природного источника и процесса извлечения, что наделяет их различными физико-химическими свойствами. Кроме того, альтернативным способом для придания необходимых характеристик ГЦ используются различные методы химической модификации. Одним из перспективных таких методов является сшивка, которая основана на реакции этерификации [1].

Целью данной работы является получение и изучение новых функциональных материалов на основе галактоклюкоманнана ели, модифицированного многоосновными карбоновыми кислотами. В качестве сшивающих агентов использовались янтарная (ЯК) и лимонная (ЛК) кислоты, для увеличения эффективности протекания процесса сшивки были использованы глицерин (пластификатор) и NaH_2PO_2 (катализатор). Для завершения процесса полимеризации проводили постепенное выслушивание образцов при 50 °С в течение 12 ч с последующим увеличением температуры до 150 °С в сушильном шкафу.

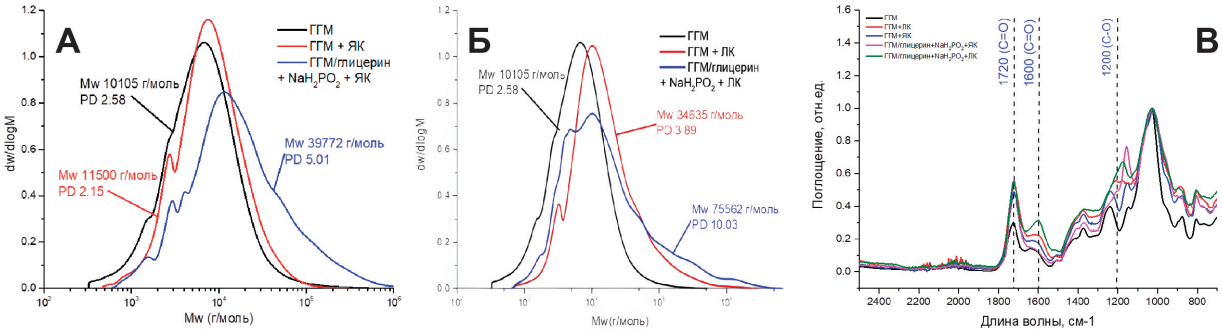


Рис. 9. Данные: молекулярно-массовых характеристик модифицированных образцов ГГМ: А – янтарной кислотой; Б – лимонной кислотой; В – ИК-спектроскопии.

При исследовании полученных образцов методом гель-проникающей хроматографии (ГПХ) было установлено, что цитраты ГГМ (Рис. 1Б) проявляют большую гидрофобность по сравнению с сукцинатами ГГМ (Рис. 1А), что свидетельствует о протекании процессов полимеризации. Кроме того, использование глицерина и гипофосфита натрия позволило добиться большей устойчивости к влаге в обоих случаях, что сказывается на данных ГПХ в виде увеличения молекулярных масс и полидисперстности. Методом ИК-спектроскопии установлены характерные полосы поглощения высокой интенсивности в областях ~1720 и ~1600 см$^{-1}$ (Рис.1В), соответствующие образованным сложноэфирным карбонильным связям (С=О) между карбоксильной группой кислоты и гидроксильными группами ГГМ.

Автор выражает благодарность научному руководителю Боровковой В.С.

Литература:

[1] Coma V., Sebti I., Pardon P., Pichavant F.H., Deschamps A. Carbohydrate Polymers, V.51(3), PP. 265-271 (2003).

Влияние напряжения анодирования на морфологию и фотокаталитическую активность нанотрубок диоксида титана

Пивоварова Арина, Лосев Захар, Иванова Ксения
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Диоксид титана (TiO2) находит широкое применение в различных областях науки и техники. В последние годы TiO2 широко исследуется и применяется, как полупроводник, благодаря его экологичности, низкой цене, не токсичности и высокой фотокаталитической активности [1]. TiO2 нанотрубки можно отнести к числу наиболее исследованных наноматериалов. Благодаря коррозионной стойкости, химической стабильности и развитой площади поверхности, нанотрубки являются наиболее востребованным материалом в процессах фотокатализа, фотоэлектролиза воды, процессов очистки воды и воздуха от вредных компонентов, а также в качестве анодов солнечных фотоэлементов [2]. Целью данной работы является синтез и исследование фотоэлектрокаталитических свойств высокоэффективных наноструктурированных плёнок диоксида титана, полученных методом анодного окисления Ti фольги.

Методом электрохимического окисления в водно-органическом электролите при различных напряжениях анодирования (30-90В) были синтезированы наноструктурированные TiO2 пленки. Установлено, что напряжение анодирования оказывает существенное влияние на морфологию поверхности пленок и фотоэлектрокаталитические свойства. Для анализа оптических свойств образцов и морфологии поверхности нанотрубок, были получены спектры диффузного отражения и SEM-изображения. Фотоэлектрокаталитическую активность образцов в реакции разложения воды исследовали по эффективности преобразования падающего фотона в электрон (IPCE), которая была получена на основе хроноамперометрических измерений в широком диапазоне видимого и UV спектров. Анализ SEM-изображений показал, длина линейно увеличиваются с ростом напряжения анодирования. На микрофотографиях бокового среза полученных наноплёнок видно, что с увеличением прикладываемого напряжения увеличивается толщина слоя с 7 мкм при 30 вольтах до 20 микрометров при 90 вольтах. Морфологию поверхности (толщину стенки нанотрубки и её диаметр) достоверно установить не удалось из-за того, что за 1 час анодирования не сформировался верхний срез нанотрубок и поверхность представляет собой пористый слой. На спектрах диффузного отражения небольшое увеличение отражательной способности в ультрафиолетовой области для всех образцов следует связывать с плохо сформировавшейся поверхностью вертикального среза нанотрубок. Волнообразный спектр диффузного отражения для образца, анодированного при 30 вольтах, связан в первую очередь с тонким слоем самих нанотрубок. Для остальных образцов критических отличий по отражающей способности не выявлено. В ходе электрохимических исследований было установлено, что фотокаталитическая активность синтезированных образцов увеличивается с ростом напряжения анодирования до определённого предела. Так, при облучении светом видимого диапазона, все образцы имеют крайне низкую фотоактивность (около 0,002%), которая возрастает при синем сдвиге волны облучения. При облучении ультрафиолетом (360нм), образцы, полученные при напряжениях анодирования от 50В до 90В, имеют близкие значения фотоактивности около 8%, а образцы, полученные при напряжениях анодирования от 30В до 40В, 5,6% и 6,2%, соответственно.

Литература:

[1] Koiki B., Orimolade B., Zwane B., Nkosi D., Mabuba N., Arotiba O., Electrochimica Acta 340 (2020) 135944.
[2] Wawrzyniaka J., Grochowskaa K., Karczewskib J., Kupracza P., Rylc J., Dołęgad A., Siuzdaka K., Surface & Coatings Technology 389 (2020) 125628.

Влияние гуминовых удобрений на фотосинтетические характеристики растений подверженных стрессу

Меньшикова Б.Д.[1], Щирба Е.И.[1], Перевалова Д.А.[1], Садыков Р.Т.[2]
[1]МАОУ Гимназия №13 «Академ», [2]ИЛ ФИЦ КНЦ СО РАН

Ежегодно в окрестностях города Красноярска при оттаивании снега в почву попадает большое количество воды и присутствующих в ней примесей. Это может изменять свойства плодородного слоя почвы, особенно в зоне постоянных техногенных нагрузок [1]. Самые первые посевы больше всего подвержены стрессовым факторам, вследствие чего их фотосинтетическая функциональность может изменяться [2]. Гуминовые удобрения, применяемые для стимуляции роста растений, могут сыграть корректирующую роль.

Цель работы: выявить влияние гуминовых удобрений на фотосинтетические характеристики растений подверженных стрессу.

Материалы и методы. В качестве растений-биоиндикаторов были выбраны кресс-салат и овёс посевной. Эксперимент проводился с 14.02.2024 по 20.03.2024, температурный режим составлял 21-24 градуса, при естественном освещении. Для каждого вида выделено 4 группы обработки в трёх повторностях: 1-контрольная группа (К) с поливом питьевой водой, 2-полив осуществлялся снеготалой водой (С), 3-полив снеготалой водой с добавлением гуминовых удобрений (СГ), 4-контрольная группа с добавлением гуминовых удобрений (КГ). Отбор снега проводился на территории СНТ «Алюминий», в зоне охвата «Красноярского алюминиевого завода». Показатели фотосинтетических характеристик регистрировались мини-спектрометром CI-710S, CID Bio-Science. Статистическая обработка данных проводилась в Microsoft Excel.

Результаты. Значения нормализованного вегетационного индекса (NDVI) во всех группах соответствует норме (табл. 1). Самые высокие значения индекса отражения каротиноидов (CRI) отмечаются у кресс-салата группы С в 6.59, а самые низкие у овса группы СГ – 2.80. Показатели NDVI, CRI и хлорофилла β для овса гуминовой обработки достоверно отличаются от других групп овса при p=0,05.

Таблица 1. Показатели фотосинтетических характеристик в исследуемых группах.

Объект исследования		Хлорофилл α	Хлорофилл β	NDVI	CRI
Контроль (К)	Кресс-салат	9,78 ± 1,71	14,32 ± 2,32	0,64	4,66
	Овёс	10,58 ± 2,32	16,35 ± 3,29	0,70	5,62
Снеготалая вода (С)	Кресс-салат	10,03 ± 2,51	15,15 ± 3,06	0,72	6,59
	Овёс	9,71 ± 1,36	14,74 ± 2,13	0,66	4,36
Снеготалая вода с гуминовыми удобрениями	Кресс-салат	-	-	-	-
	Овёс	8,46 ± 1,37	13,04 ± 2,42	0,58	2,80

Примечание: Значения для хлорофилла α и хлорофилла β указаны в мкг/см^3, диапозон для здоровой зелёной растительности индекса NDVI от 0.2 до 0.9 [2], для индекса CRI от 0 до 15.

Заключение: Текущий уровень и продолжительность исследования не позволяет выявить статистически значимое влияние стресса и удобрений на растения.

Авторы выражают благодарность научному руководителю аспиранту, ст. лаборанту ИЛ ФИЦ КНЦ СО РАН Садыкову Р. Т. и консультанту к.б.н., руководителю группы молекулярно-генетических исследований *Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,* Смольниковой М.В.

Литература:

[1] Скрипальщикова Л. Н. и др. Аккумулирующая способность и стабильность развития березняков разнотравных в зоне влияния промышленных выбросов //Вестник Красноярского государственного аграрного университета. – 2016. – №. 7. – С. 41-47.
[2] Richardson A. D., et. al. An evaluation of noninvasive methods to estimate foliar chlorophyll content //New phytologist. – 2002. – Т. 153. – №. 1. – С. 185-194.

Взаимосвязь между уровнем физического состояния человека и неспецифической резистентности организма на примере лизоцима

Казанцева С.[1], Коршунова А.[1], Кряжев К.[1], Писарев Д.[1], Полуян Р.[1], Смолянинов И.[1], Успешный Я.[1], Сапожникова К.Ю.[2]
[1]МАОУ "Гимназия №13 "Академ", Красноярск, Россия;
[2]Институт Биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

Группа острых кишечных инфекций – одна из наиболее актуальных проблем инфекционной патологии, где регистрируется до 4 млрд случаев заболеваний в год [1]. Лизоцим (муромидаза) содержится практически во всех биологических жидкостях организма, оказывая бактериолитическое действие за счет гидролиза структурных компонентов пептидогликана бактерий [2], и выступает первичным барьером на пути инфекций. Цель настоящей работы заключается в определении взаимосвязи между уровнем физического состояния (УФС) подростков 13-14 лет и лизоцимной активностью слюны.

Определяли индекс физического состояния испытуемых (ИФС) по методу Пироговой [3]. Для большинства испытуемых показан средний уровень физического состояния или близкий к нему – от 0,53 до 0,85. Далее оценивали активность лизоцима в слюне испытуемых в отношении тестовой культуры бактерий *Micrococcus luteus* диско-диффузионным методом [4]. Активность лизоцима у большинства испытуемых (зона задержки роста 9,2-14,7 мм) сопоставима с данными, полученными в контроле с коммерческим препаратом лизоцима, за исключением испытуемых №3, 6 и 7, где активность фермента была несколько снижена (5,6-7,4 мм) независимо от ИФС.

Для определения групп микроорганизмов, неподверженных действию лизоцима были проведены посевы смывов с кожи рук испытуемых. В контрольном варианте обнаружено большее количество колоний, чем при использовании дисков, нагруженных слюной испытуемых, но различия не были статистически значимыми. Вероятно, в отношении естественной и транзиторной микрофлоры кожи рук испытуемых эффективность лизоцима слюны выше. Для оценки избирательности действия лизоцима были изучены морфо-тинкториальные свойства микроорганизмов [5], обнаруженных в зоне действия лизоцима. Показано, что действие лизоцима не распространяется на грамположительные кокки, расположенные одиночно, попарно или группами. В контрольном варианте обнаружены грамотрицательные микроорганизмы, что говорит о более широком спектре действия лизоцима слюны.

Таким образом, в настоящей работе показано, что уровень физического состояния не оказывает значимого влияния на подверженность инфекционным заболеванием путем модулирования активности лизоцима. Выявлено, что, в отличие от коммерческого ферментного препарата, активность ест естественного лизоцима слюны распространяется на грамотрицательную микрофлору независимо от особенностей питания.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному консультанту: к.б.н., Смольниковой Марине Викторовне (НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН).

Литература:

[1] Тагирова З. Г., [и др.]. Мед. вестник Башкортостана. №. 4 (64), С. 45-50 (2016).
[2] Дорофейчук В. Г. Нижегородский медицинский журнал, № 2., С. 9-13 (1996).
[3] Pirogova, E. A., [et al.]. Health, Kiev. (1986).
[4] Решедько, Г. К., [и др.]. Клиническая микробиология и антимикробная химиотерапия. №. 3(4), С. 348-354 (2001).
[5] Прудникова С.В. [и др.]. Микробиология: учебно-методическое пособие для лабораторного практикума (2018).

Разработка солнцезащитного крема с фотоактивным компонентом на основе лигнина

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

Вред ультрафиолетового излучения широко известен. Предотвратить негативное влияние на кожу человека можно, используя солнцезащитные средства. Не все они стабильны и безопасны, эффективность и стоимость бывает разная. Целью нашего исследования стала разработка нового состава солнцезащитного крема на основе доступных кремовых основ с применением лигнина и его модификаций в качестве фотоактивного компонента.

Лигнин – это сложный, нерегулярный полимер ароматической природы. К его полезным свойствам можно отнести устойчивость к свету, нагреванию, воде; сильное поглощение света в УФ-диапазоне; низкую проникающую способностью по отношению к коже. При этом лигнин как компонент солнцезащитных средств изучен очень ограничено, а продукты его химической модификации не изучены вовсе. Разработка нового состава солнцезащитного крема на основе доступных кремовых основ с применением лигнина и его модификаций в качестве фотоактивного компонента является актуальной и интересной задачей.

Сосна обыкновенная – перспективный для Сибири ресурс. Лигнин выделяли из опилок варкой в 60% этаноле при 190°C. Выход лигнина составил 5,5 мас.% на субстрат. Для получения модифицированного лигнина готовили диазониевую соль п-нитроанилина и добавляли её к щелочному раствору лигнина при перемешивании и температуре ~0 °C, затем отфильтровывали осадок и сушили.

Для того, чтобы получить сам крем мы использовали простое ручное смешение при помощи шпателей. Крем получился однородный, но цвет не слишком приятный. Методом электронной спектроскопии мы получили спектры отражения наших кремов, которые позволяют рассчитать SPF - коэффициент защиты от Солнца - показатель того, какая эффективная доля ультрафиолетовых лучей, вызывающих солнечные ожоги, достигает кожи при дозировке 2 мг/см^2. Кремовая основа рассеивает, а значит и пропускает, почти весь свет и неэффективна для защиты. Коммерческий крем близок к заявленному значению. Полученные нами образцы имеют эффективность ниже – SPF 5-6, но превосходят литературные данные. Крема с добавкой 2% щелочного лигнина имели SPF 1,7-2,7. Для достижения SPF 5-6 требовалось 10% лигнина [1].

Таблица 1. SPF кремов, рассчитанный из данных электронной спектроскопии.

SPF, рассчитанный из данных электронной спектроскопии			
Коммерческий крем (SPF10)	Кремовая основа	2% этаноллигнин	2% этаноллигнин модифицированный
11,2	0,3	5,7	5,4

Исследование выполнено при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта № 20231211-07330. Автор выражает благодарность руководителю Голубкову В.А.

Литература:

[1] Qian Y., Qiu X., Zhu S. Green Chemistry. T. 17, №. 1, PP. 320-324. (2015).

Продукты щелочного каталитического окисления древесины сосны

Черепанова Софья, Шульга Яна
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Растительная биомасса является возобновляемым источником органического сырья. Состоящая из 3 полимеров: лигнина, целлюлозы и гемицеллюлозы, она может быть превращена в фенолы и углеводы. Современная концепция переработки растительной биомассы получила название «Lignin first», одним из направлений которого является каталитическое окисление лигнина молекулярным кислородом. Получаемые таким способом основные продукты - ванилин и сиреневый альдегид, являются ценным сырьем для фармацевтической, пищевой и парфюмерной промышленности. Кроме того, образуются и побочные продукты, которые можно использовать –целлюлоза, окисленный водорастворимый лигнин (лигнокислоты), низкомолекулярные алифатические кислоты.

Цель нашей работы – исследование щелочного каталитического окисления древесины сосны, его основных и некоторых побочных продуктов. Для экспериментов использовались древесные опилки сосны обыкновенной (*Pinus silvestris*), собранные в районе г. Красноярска. Их измельчали, просеивали, экстрагировали и сушили. Каталитическое щелочное окисление проводили в водно-щелочной среде в автоклаве.

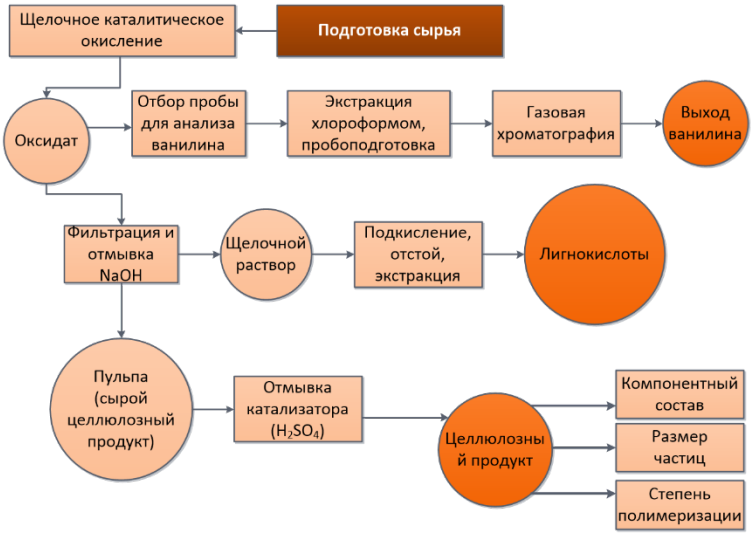


Рис. 10. Концептуальная схема процесса щелочного каталитического окисления сосны и выделение его продуктов.

Выход ванилина – основного продукта, достигает 18,7 мас.% на лигнин, 5,05 мас.% на субстрат, что выше, чем в случае травянистого сырья [1]. Важным является целлюлозный продукт – нами получена порошковая целлюлоза со средними размерами частиц ~115 мкм, содержанием целлюлозы 87 мас.% и лигнина 9,9 мас.%. Выделены лигнокислоты при pH 4, их выход составил 6,95 %мас. от субстрата, или 25,7 % от лигнина, впервые использована экстракция тетрагидрофураном для их получения.

Авторы выражают благодарность руководителю Голубкову В.А. и сотрудникам ИХХТ СО РАН (Кайгородов К.Л., Смирнова М.А., Тарабанько В.Е., Воробьев С.А.) за помощь в исследовании.

Литература:

[1] Golubkov V.A., Tarabanko V.E., Kaygorodov K.L., Shestakov S.L., Chelbina Y.V. et al., Khimiya Rastitel'nogo Syr'ya, V.4, PP. 137-145 (2023).

Спектрофотометрическое исследования кето-енольных форм теллурофен-трифторацетона

Елизавета Шишкина, Маргарита Харитонова
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Гетероциклические перфторированные β-дикетоны являются хелатирующими дикарбонильными лигандами которые способны селективно взаимодействовать в растворе с ионами редкоземельных металлов. Яркий представитель такого рода лигандов - теноил-трифторацетон – производное гексафторацетилацетона с тиофеновым кольцом. До недавнего времени, аналоги содержащие более тяжелые атомы халькогенов небыли известны, однако, в течении нескольких последних лет были синтезированы [1,2]. В данной работы был изучен теллурофен-трифторацетон а именно его равновесные процессы происходящие в средах с различной диэлектрической проницаемостью – кето-енольное равновесие. Проблема таких равновесий заключается в том, что на их протекания влияют не только электростатические параметры среды, но и межмолекулярные взаимодействия между лигандом и молекулами растворителя.

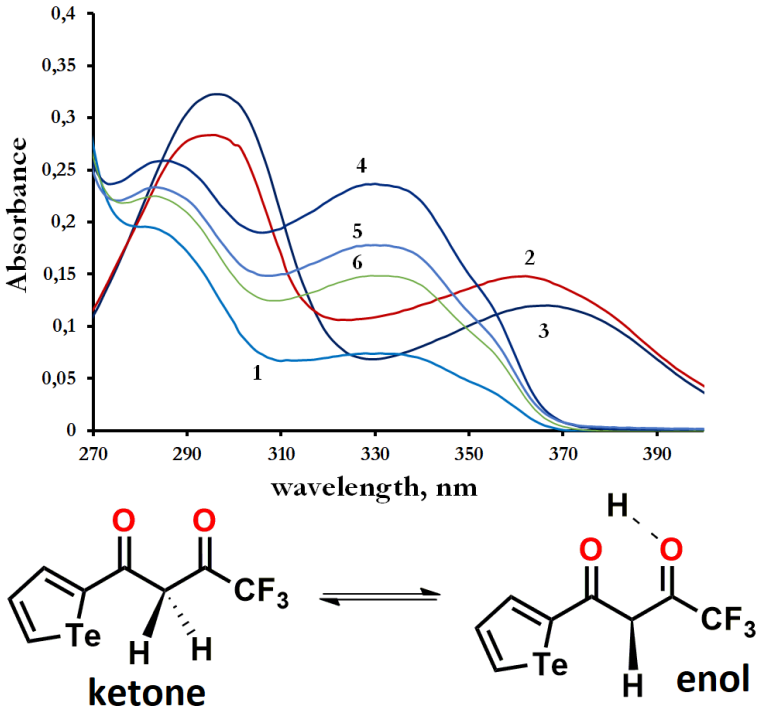


Рис. 1. Спектры изучаемого дикетона в различных средах (1 – Вода; 2 – Диоксан; 3 – Этиловый спирт; 4 – $CHCl_3$; 5 –DMSO; 6 – Этилацетат) а также схема его кето-енольного равнововесия.

Были получены спектры нового лиганда в различных полярных и неполярных средах. Поученные спектральные данные были интерпретированы, в том числе, с использованием квантовохимического моделирования на уровне TD-DFT/cc-pVDZ/PBE0/SMD.

Литература:

[1] Lutoshkin M.A., Taydakov I. V., Plyhedron, V.207, PP. 115383 (2021).
[2] Lutoshkin M.A., Taydakov I. V., Plyhedron, V.237, PP. 116395 (2023).

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVII)
г. Красноярск, 18 апреля 2024 г.

ISBN 978-5-6045249-8-5

Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 18.04.2024 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