



Координационный совет по делам молодежи в научной и образовательной сферах при Совете при Президенте Российской Федерации по науке и образованию



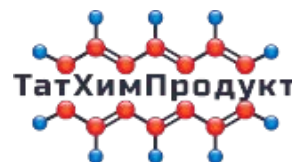
# СБОРНИК ТЕЗИСОВ

IV ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-  
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ  
УЧЕНЫХ

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Научный центр мирового уровня (НЦМУ)  
“Рациональное освоение запасов жидких  
углеводородов планеты”



Казань, 8-10 ноября 2021 года

# СБОРНИК ТЕЗИСОВ

IV ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-  
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ  
УЧЕНЫХ

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Сборник Тезисов IV Всероссийской с международным участием школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: КФУ, 2021. – 1 USB-flash-накопитель. – Систем. требования: ПК с процессором с тактовой частотой не менее 1 ГГц; Windows 7; USB 2.0; Adobe Acrobat Reader.

**Казань, 8-10 ноября 2021 года**

## Организатор

Казанский (Приволжский) федеральный университет

## Организационный комитет

### ***Председатель организационного комитета:***

Таюрский Д.А., проректор по научной деятельности КФУ.

### ***Заместители председателя организационного комитета:***

Киясов А.П., директор Института фундаментальной медицины и биологии КФУ, проректор по биомедицинскому направлению;

Нургалиев Д.К., директор Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ, проректор по направлениям нефтегазовых технологий, природопользования и наук о Земле;

Зиганшин М.А., исполняющий обязанности директора Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ;

Варфоломеев М.А., заведующий кафедрой разработки и эксплуатации месторождений трудноизвлекаемых углеводородов Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ;

Каюмов А.Р., доцент кафедры генетики Института фундаментальной медицины и биологии КФУ.

### ***Члены организационного комитета:***

Абрамский М.М.

Вахитов И.Р.

Зиннатуллин А.Л.

Галиханова У.А.

Билялов А.И.

Челнокова И.А.

Гедмина А.В.

Стойков И.И.

Герасимов А.В.

Ильин А.В.

Кольчугин А.Н.

Мухаматдинов И.И.

Ситнов С.А.

Сагиров Р.Н.

Кузина Д.М.

Зиганшин Э.Р.

Харисов А.Г.

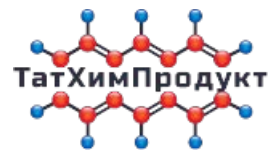
Валиева Л.Р.

Хайдаров А.А.

## Партнеры конференции



Научный центр мирового уровня  
“Рациональное освоение запасов  
углеводородов планеты”



Координационный совет по делам молодежи в  
научной и образовательной сферах при Совете  
при Президенте Российской Федерации по  
науке и образованию

## СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1 МЕДИЦИНА 21 ВЕКА.....	5
СЕКЦИЯ 2 БИОТЕХНОЛОГИЯ 21 ВЕКА.....	68
СЕКЦИЯ 3 ХИМИЯ 21 ВЕКА .....	91
СЕКЦИЯ 4 ЭНЕРГЕТИКА 21 ВЕКА .....	167
СЕКЦИЯ 5 СПЕЦИАЛЬНАЯ СЕКЦИЯ НАУЧНОГО ЦЕНТРА МИРОВОГО УРОВНЯ (НЦМУ) – «РАЦИОНАЛЬНОЕ ОСВОЕНИЕ ЗАПАСОВ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ПЛАНЕТЫ» .....	191
СЕКЦИЯ 6 СОВРЕМЕННЫЕ IT-ТЕХНОЛОГИИ, РОБОТОТЕХНИКА И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ 21 ВЕКА.....	221
СЕКЦИЯ 7 ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МЕЗО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ .....	234

## **СЕКЦИЯ 1 МЕДИЦИНА 21 ВЕКА**

## STUDY OF THE EFFECTS OF SALICYLIC ACID DERIVATIVES ON GLIOBLASTOMA AND NEUROBLASTOMA CELLS

A. Raghad, R.A. Ishkaeva, T.I. Salikhova, T.I. Abdullin, O.V. Tsepaeva, D.V. Ponomaryov, L.R. Grigor'eva, A.V. Nemtarev, V.F. Mironov

*Казанский федеральный университет, Казань, Россия.*

*rag.rsh997@gmail.com*

Acetyl salicylic acid (ASA) is widely reported for its preventive and therapeutic antitumor effects [1]. Due to the involvement of mitochondria in the pathogenesis of various diseases, chemical modification of bioactive compounds to enhance their accumulation in mitochondria has been increasingly investigated. Triphenylphosphonium (TTP) compounds are delocalized lipophilic cations, which are extensively studied as a mitochondrial targeting system. A series of ASA conjugates linked with the TPP group via alkyl chain linker (C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) has been synthesized and proposed as antitumor agents [1]. In this study, we investigated the effects of ASA conjugates on several glioblastoma and neuroblastoma cell lines.

Our results showed that the conjugates exhibit enhanced TPP-mediated cytotoxicity towards LN-229, U-87 MG, SH-SY5Y and SNB-19 cells in proportion to the linker length with IC<sub>50</sub> = 0.6–38 μM. Further experiments showed that conjugates induced early linker length-dependent mitochondria depolarization. The relationship between cytotoxic activity of the conjugates and their ability to depolarize mitochondria was established. The TPP conjugates of ASA are promising compounds to kill nervous system-derived tumor cells, however, further investigation is required to characterize their anticancer potential and mechanisms of action.

*This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation within the framework of scientific project No. 20-33-70194 and Russian Science Foundation (project 20-73-10105).*

1. O.V. Tsepaeva, T.I. Salikhova, L.R. Grigor'eva, et. al. Ж. Med Chem Res, 2021, 30, 925–939.

## МОНО- И ДИКАТИОННЫЕ ИМИДАЗОЛИЕВЫЕ ПОВЕРХНОСТНО АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ АГЕНТЫ

С.К. Амерханова<sup>а</sup>, А.Д. Волошина<sup>а</sup>, Д.А. Кузнецова, А.А. Тырышкина<sup>а</sup>, В.А. Михайлов<sup>б</sup>,  
А.Б. Миргородская<sup>а</sup>, Л.Я. Захарова<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова - Обособленное структурное подразделение ФГБУН "Федеральный исследовательский центр "Казанский научный центр РАН" 420088, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8;*

<sup>б</sup> *Институт физико-органической химии и углекислотной химии им. Л.М. Литвиненко, 83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 70.*

*syumbelya07@mail.ru*

Моно- и дикатионные поверхностно-активные вещества (ПАВ), содержащие в структуре молекулы имидазолиевый фрагмент, известны в области химиотерапии высокой антимикробной активностью и низкими цитотоксическими свойствами в отношении здоровых клеток.

В работе впервые были исследованы антимикробные, мембранотропные и цитотоксические свойства новых имидазолиевых моно- и дикатионных ПАВ с варьируемой длиной гидрофобного радикала и спейсерного фрагмента.

Соединения проявляют высокую антимикробную активность в отношении бактериальных и грибных патогенов. Среди исследованных соединений наибольшим антимикробным действием обладают ПАВ с децильным радикалом, тогда как среди монокатионных производных максимум активности проявляется для соединений с тетрадецильным заместителем. Соединения-лидеры по своей активности значительно превышают действие эталонных антибиотиков и оказываются эффективными против метициллин-резистентных штаммов *Staphylococcus aureus*. Кроме того, они обладают высокой селективностью в отношении клеток микроорганизмов по сравнению с клетками человека.

Полученные результаты позволяют рассматривать протестированные соединения в качестве основы для создания новых биоактивных поверхностно-активных соединений, используемых в разработке новых потенциальных антимикробных агентов.

*Работа выполнялась при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-73-30012.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ МИКРОГЛИИ ПРИ ТРАВМЕ СПИННОГО МОЗГА РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ ТЯЖЕСТИ

Э.Р. Ахметзянова<sup>a</sup>, А.В. Тимофеева<sup>a</sup>, Я.О. Мухамедшина<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Научно-клинический центр прецизионной и регенеративной медицины ИФМиБ КФУ,  
Казань;

<sup>b</sup> Кафедра гистологии, цитологии и эмбриологии КГМУ, Казань.

*elyaelya18@gmail.com*

Клетки микроглии, являясь резидентными макрофагами центральной нервной системы (ЦНС), первыми реагируют на патологическое изменение своего микроокружения. По этой причине, в последние десятилетия идет активное изучение поведения клеток микроглии при травмах ЦНС. В частности, актуальным является исследование поляризации микроглии при травме спинного мозга (ТСМ). Понимание данного процесса открывает широкие перспективы для терапии больных с ТСМ. В связи с этим, нами была изучена M1/M2a поляризация микроглии на фоне травмы спинного мозга крысы различной степени тяжести.

Крысам породы Wistar наносили контузионную ТСМ легкой (1,5 м/с), средней (2,5 м/с) и тяжелой (4 м/с) степени тяжести. Оценку количества M1 и M2a микроглии на фоне ТСМ различной степени тяжести проводили путем иммуногистохимического анализа популяций Iba1+/TGF-β+(M2a микроглия) и Iba1+/CD40+(M1 микроглия)-клеток, соответственно. Iba1+/TGF-β+-клетки, в отличие от Iba1+/CD40+-клеток, были распределены в травмированном спинном мозге более равномерно и значимых количественных различий в зонах вентральный канатиков (VF), вентральных рогов (VH) и кортикоспинального тракта (CST) обнаружено не было. На 60 сутки после травмы как количество Iba1+/TGF-β+-, так и TGF-β+-клеток на расстоянии 5 мм каудально от эпицентра повреждения не претерпевало значимых изменений, в том числе на фоне ТСМ различной степени тяжести. Количество Iba1+/CD40+-клеток было минимальным в области VH, в то время как на фоне ТСМ данный показатель значительно возрастал в CST и VF с максимальным значением в группе SCI 2.5. Тем не менее, мы вновь не обнаружили достоверных изменений в исследуемых зонах по количеству Iba1+/CD40+-клеток между группами с ТСМ различной степени тяжести.

Таким образом, после ТСМ различной степени тяжести в исследуемых нами зонах не найдено достоверных различий в распределении M1 и M2a популяций микроглии.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-34-90060.*



## СОЗДАНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИАПАТИТА

В.Т. Бадретдинова, Т.А. Серых

*Университет ИТМО, Санкт-Петербург.*

*Vlada765@gmail.com*

Ежедневно проводятся процедуры восстановления костных дефектов, вызванных болезнями и травмами, следовательно в настоящее время стремительно развивается область создания материалов для регенеративной медицины. На сегодняшний день существует большое количество материалов и процедур по восстановлению костных дефектов. Остеомиелит, вызванный инфекционными заболеваниями, считается одним из самых сложных заболеваний, для систематического лечения которого требуется применение антибиотиков около 4–6 недель. Чтобы избежать длительного лечения антибиотиками, к которым развивается привыкание, используют локальную доставку лекарственных средств [1].

В связи с этим целью данного исследования являлось создание новой антибактериальной системы на основе гидроксиапатита. В качестве модельных антибиотиков использовали гентамицин и тетрациклин. Фосфаты кальция выращивали методом диффузии в агаре, содержащем гидрофосфат натрия. В результате реакции получили паттерны фосфатов кальция в виде колец Лизеганга. Антибактериальное действие полученных образцов изучали на примере золотистого стафилококка (*Staphylococcus aureus*).

Было выявлено, что образцы с загруженными антибиотиками в концентрациях 0,01 мг/мл и 0,001 мг/мл обладают антибактериальной активностью. В то время как клетки С2С12 на этих образцах с данной концентрацией продолжают расти. Таким образом, система может быть рекомендована для дальнейшего изучения в качестве покрытий на имплантаты.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ номер 19-79-10244.*

1. Dorozhkin S. V. Biological and medical significance of calcium phosphates // *Angew. Chem. Int.* – 2002. – V. 41. – P. 3130–3146.

## РАНОЗАЖИВЛЯЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ РАСТВОРИМОГО И ИММОБИЛИЗОВАННОГО НА ХИТОЗАНЕ ФИЦИНА

Д.Р. Байдамшина<sup>а</sup>, М.Г. Холявка<sup>б</sup>, М.Н. Агафонова<sup>а</sup>, О.А. Саченков<sup>а</sup>, А.Р. Каюмов<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Медико-биологический факультет ВГУ, Воронеж.*

*prosto-di@mail.ru*

Биопленка является важным фактором вирулентности при мастите, в результате чего очаговое инфекционное начало становится более сложным для лечения и искоренения, что делает эту проблему более актуальной [1, 2].

Ранее нами было показано разрушение биопленок золотистого стафилококка при помощи растительного фермента фицина [3]. Следующим этапом в нашей работе было исследование ранозаживления и микробной деконтаминации поверхности ран у крыс при обработке фицином в растворимой и иммобилизованной формах. Для создания модели инфицированной раны, сразу после нанесения раны на раневую поверхность разово инокулировали культуру бактерий *Staphylococcus aureus*. В течение 24 часов получали конечное микробное обсеменение. Микробиологический смыв раневой поверхности брали на 0 сутки (до обработки) и на 1 сутки (после обработки) и на 2-15 сутки с дальнейшей обработкой раны. На 15 сутки проводили анализ: микробной обсемененности; скорости заживления раны и восстановление структуры ткани.

Значительное улучшение скорости заживления ран было в группах, получавших обработку растворимым либо иммобилизованным фицином, химотрипсином и хитозаном по сравнению с контролем. Таким образом, у крыс, получавших какое-либо лечение, 50% закрытие раны наблюдалось на 4-е сутки после начала лечения, в то время как в контрольной группе аналогичный эффект был достигнут только на 6-е сутки. Очищение ран наблюдали на 6-й день у крыс, обработанных растворимым или иммобилизованным фицином, в то время, как только на 10-й день у крыс, обработанных хитозаном или химотрипсином. В контрольной группе подобный эффект можно было наблюдать только на 15-е сутки.

*Работа выполнена при поддержке стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов СП-2164.2019.4.*

1. C. Ma, J. Zhao, X. Xi, J. Ding, H. Wang, L.Y. Kwok. Beneficial Microbes, 2016, 7, 95-102.
2. J.K. Wallis, V. Krömker, J.H. Paduch. AIMS Microbiology, 2018, 4: 209-224.
3. D.R. Baidamshina, E.Y. Trizna, M.G.Holyavka, M.I. Bogachev, V.G. Artyukhov, F.S. Akhatova, E.V. Rozhina, R.F. Fakhrullin, A.R. Kayumov. Scientific Reports, 2017, 7, P.46068.

## СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ МЕТИЛПИРИДИНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА

М.А. Белова<sup>a</sup>, С.В. Сапожников<sup>b</sup>, Н.В. Штырлин<sup>b</sup>, Е.С. Булатова<sup>b</sup>, А.Д. Стрельник<sup>b</sup>,  
Ю.Г. Штырлин<sup>b</sup>

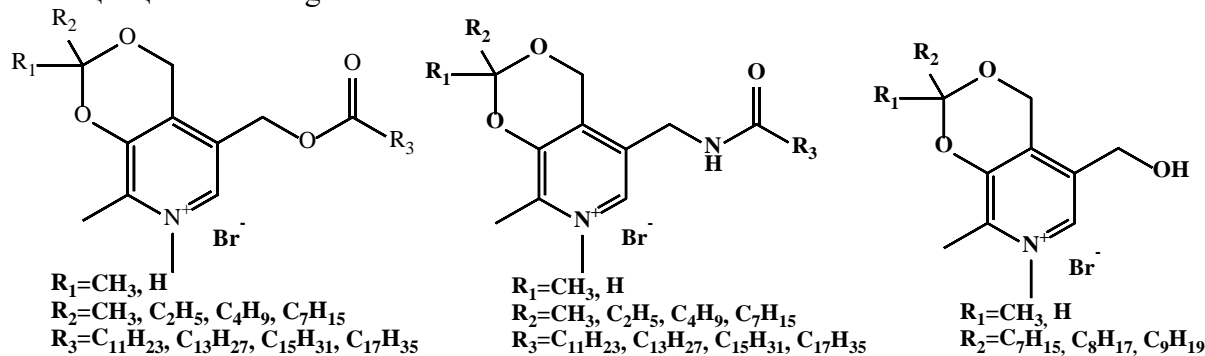
<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> НОЦ фармацевтики КФУ, Казань.

*margarita\_belova00@mail.ru*

Несмотря на активные исследования в области разработки новых антисептических средств, бактериальные инфекции, в том числе и послеоперационные, остаются одной из серьезнейших проблем современного здравоохранения.

Ранее в нашей исследовательской группе было показано, что четвертичные аммониевые соединения на основе производных пиридоксина обладают высокой антибактериальной активностью и представляют интерес для разработки новых антисептических средств. В продолжение этих исследований в настоящей работе синтезирован ряд метилпиридиниевых солей на основе производных пиридоксина, молекулярный дизайн которых был разработан в рамках концепции "soft drug":



Первичный скрининг антибактериальной активности *in vitro* на шести музейных штаммах бактерий показал высокую активность некоторых из полученных соединений. Шесть "соединений лидеров" были протестированы *in vitro* на клинических штаммах микроорганизмов и проявили активность на уровне современных лекарственных препаратов - мирамистин, хлоргексидин, что подтверждает перспективность этого класса соединений для разработки новых антисептиков.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности №0671-2020-0053.

## ВЛИЯНИЕ ЧРЕСКОЖНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СТИМУЛЯЦИИ СПИННОГО МОЗГА С ЧАСТОТОЙ 20 ГЦ НА ПОСТУРАЛЬНУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ ЧЕЛОВЕКА

Л.М. Бикчентаева, А.Ф. Желтухина, Г.Г. Яфарова, Т.В. Балтина

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*leysanbm@mail.ru*

Спинальный мозг после травмы демонстрирует высокую степень автоматизма и пластичности [1]. В связи с травмами спинного мозга утрачивается возможность поддерживать тело в вертикальном положении. Одним из методов реабилитации пациентов с травмами спинного мозга является метод чрескожной электрической стимуляции спинного мозга (ЧЭССМ).

В исследовании приняли участие 11 здоровых испытуемых в возрасте от 18 до 27 лет с их информированного добровольного согласия. Оценку постуральной устойчивости проводили с помощью метода стабилотрии с использованием компьютерного стабиланализатора «Стабилан – 01 - 2». Для ЧЭССМ использовали пятиканальный стимулятор БиоСтим-5. Стимуляция проводилась на уровне С5-6 позвонков с помощью круглого стимулирующего электрода (катод) в течение 3 мин; индифферентные электроды (анод) располагались симметрично на ключицах. Длительность стимула составляла 1 мс, частота – 20 Гц, сила стимула – 90 % от порога возникновения ответов с мышц верхних конечностей на ЧЭССМ. До, во время и после ЧЭССМ регистрировалась стабилограмма в стандартной европейской стойке.

Стимуляция в 20 Гц приводила к улучшению ряда классических и векторных стабилографических показателей ( $p < 0,05$ ): во время стимуляции увеличивалось качество функции равновесия (КФР), уменьшалась средняя линейная скорость (ЛСС); после стимуляции уменьшалась площадь, длина статокинезиограммы по фронтالي, ЛСС по фронтали. Спектральные показатели: во время стимуляции увеличивалась мощность 1 зоны спектра ( $Pw1$ ) по фронтали, уменьшался параметр мощности 3 зоны ( $Pw3$ ) спектра по фронтали, увеличивалась  $Pw1$  по сагиттали, уменьшалась  $Pw3$  по сагиттали ( $p < 0,05$ ). Таким образом, в результате проведенного исследования ЧЭССМ шейного отдела позвоночника улучшила постуральную устойчивость. Вероятно, в основе положительного эффекта ЧЭССМ лежит нисходящий облегчающий эффект на постуральные мышцы нижних конечностей.

1. Edgerton V. R. et al. Plasticity of the spinal neural circuitry after injury //Annu. Rev. Neurosci. – 2004. – Т. 27. – С. 145-167.

## ВЛИЯНИЕ АЛЛОКСАНА НА СОКРАТИМОСТЬ СКЕЛЕТНЫХ МЫШЦ МЫШИ

А.С. Блохина, А.Р. Гусамова, О.В. Яковлева

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*Lifanova40@gmail.com*

Аллоксановый диабет, как и сахарный диабет, развивается вследствие недостаточности инсулина [1], что приводит к нарушению работы сердечной и скелетных мышц [2]. Для исключения возможности собственного влияния аллоксана на состояние мышц был проведен анализ сократимости мышцы в контроле и в условиях аппликации аллоксана.

Эксперименты по исследованию сократимости проводились в изометрических условиях на камбаловидной мышце лабораторной мыши. Аллоксан был использован в концентрации 100 мкМ (Sigma-Aldrich).

В данной работе мы сравнивали показатели силы сокращения камбаловидных мышц мыши в контрольных условиях и на фоне аппликации аллоксана. Достоверных отличий в значениях силы сокращения камбаловидной мышцы при величине стимула 5, 10, 20, 30, 40 В в контрольных условиях (сила сокращения составила  $0.42 \pm 0.18$ ;  $0.55 \pm 0.18$ ;  $0.59 \pm 0.16$ ;  $0.59 \pm 0.14$ ;  $0.61 \pm 0.14$  г., соответственно,  $n=8$ ) и на фоне действия аллоксана (сила сокращения составила  $0.30 \pm 0.11$ ;  $0.40 \pm 0.14$ ;  $0.44 \pm 0.14$ ;  $0.43 \pm 0.14$ ;  $0.43 \pm 0.13$  г., соответственно,  $n=4$ ) не выявлено. Также сравнивали силу сокращения при разной частоте. Использовались следующие частоты стимуляции: 1, 10, 20, 30, 50 Гц. Сила сокращения камбаловидной мышцы контрольных условиях составила  $0.34 \pm 0.09$ ;  $0.56 \pm 0.15$ ;  $0.40 \pm 0.07$ ;  $0.66 \pm 0.18$ ;  $0.60 \pm 0.17$  г., соответственно ( $n=10$ ) и на фоне аппликации аллоксана составила  $0.30 \pm 0.10$ ;  $0.97 \pm 0.42$ ;  $1.19 \pm 0.48$ ;  $1.38 \pm 0.57$ ;  $1.36 \pm 0.55$  г., соответственно ( $n=6$ ). Достоверные отличия между данными выборками не обнаружены. Наиболее информативными показателями кинетики скелетной мышцы являются время укорочения и время половины расслабления, для контроля данные параметры составили  $0,091 \pm 0,005$  с. и  $0,071 \pm 0,006$  с. ( $n=10$ ) соответственно, тогда как при аппликации аллоксана  $0,086 \pm 0,006$  с. и  $0,083 \pm 0,010$  с. ( $n=6$ ) соответственно, что не отличается от контроля.

Таким образом, аллоксан не оказывал прямого влияния на параметры сократимости камбаловидной мышцы.

1. Vincent A. M. et al Nature Reviews Neurology. 2011; 7(10): 573-83.
2. Paulus S.F., Grossie J. Diabetes. 1983; 32(11):.1035-9.

## ОСОБЕННОСТИ РАСПОЗНАВАНИЯ МОНОКЛОНАЛЬНЫМИ АНТИТЕЛАМИ НАТРИЙ-ЗАВИСИМОГО ФОСФАТНОГО ТРАНСПОРТЕРА NaPi2b В ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТКАХ

Л.Ф. Булатова<sup>a</sup>, А.А. Тимонина<sup>a</sup>, А.Б. Анапина<sup>a</sup>, Д.Д. Решетникова<sup>a</sup>, Д.В. Савенкова<sup>a</sup>,  
А.В. Коротаева<sup>a</sup>, А.К. Нурғалиева<sup>a</sup>, В.С. Скрипова<sup>a</sup>, М.В. Богданов<sup>b</sup>, Р.Г. Киямова<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Кафедра биохимии, биотехнологии и фармакологии, НИЛ Биомаркер, Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия;

<sup>b</sup> Кафедра биохимии и молекулярной биологии, Научно-медицинский центр Техасского университета в Хьюстоне, Медицинская школа МакГоверна, Хьюстон, США.

*minigulovalf@gmail.com*

Поиск уникальных мишеней для лечения злокачественных новообразований терапевтическими антителами является важной задачей персонализированной медицины. Одной из таких мишеней может быть натрий-зависимый фосфатный транспортер NaPi2b – интегральный гликопротеин, отвечающий за поддержание гомеостаза неорганического фосфата в организме человека. В составе большого внеклеточного домена (ЭМД) NaPi2b расположен эпитоп для терапевтических антител ХМТ-1536 и ХМТ-1592, которые находятся на этапе клинических испытаний для лечения рака яичника и легкого. Доступность эпитопа, как мы предполагаем, обусловлена дисульфидными связями между цистеинами в положениях 303, 322, 328 и 350, а также гликозилированием аспарагинов в положениях 295, 308, 313, 321, 335 и 340. Целью данного исследования стало изучение особенностей распознавания эпитопа в районе ЭМД NaPi2b антителами L2 (20/3) мутантных форм NaPi2b. Плазмиды с мутантными формами NaPi2b, полученные с помощью сайт-направленного мутагенеза с заменой цистеина и/или аспарагина на аланин, трансфицировали в клетки рака яичника OVCAR-8. Клетки с мутантным NaPi2b использовали для анализа распознавания эпитопа антителами L2 (20/3) с помощью вестерн-блота и проточной цитометрии. Мы выявили, что мутация в каждом из 4 цистеинов в области ЭМД4 NaPi2b существенно снижает распознавания эпитопа, а замена аспарагинов в положения 308, 313 и 335-340 увеличивает доступность эпитопа для антител L2(20/3). Полученные данные приближают нас к пониманию механизмов образования потенциальных опухоль-специфических эпитопов мембранных белков и открывают широкие перспективы для разработки новых, более специфичных противоопухолевых препаратов.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета, а также при поддержке гранта Российского научного фонда № 20-14-00166.*

## THE ADAPTIVE AND COMPENSATORY MECHANISMS OF THE CARDIOVASCULAR SYSTEM IN YOUNG PEOPLE

T.I. Vlasova, B.A. Marzoog, E.V. Arsenteva, N.A. Melnikova

*National Research Mordovia State University*

*vlasova-t.i@mrsu.ru*

**Background:** Cardiovascular disease (CVD) is dramatically increasing in young people and has the leading cause of death in our era.

**Aims:** Sought to assess the adaptive and compensatory mechanisms of the cardiovascular system (CVS) in young.

**Methods:** A retrospective cohort investigation examined 29 volunteers, divided into two groups according to the adaptation potential value (AP). Group 1 (n=16), AP values were less 2,6, group 2 (n=13) AP values were 2,6. The participants' age was 18-25 years (median 21,0). All the participants, non-invasively, measured their heart rate (HR), blood pressure (SBP/DBP), height, weight, waist, and hip. We calculated the AP of the CVS (R.M. Baevsky et al., 1987), body mass index, and waist/hip ratio. We collected information through specially created and standardized in-person interviews using paper questionnaires. Pearson  $\chi^2$  test was chosen ("Statistica 13") for statistical analysis.

**Results:** The AP perturbation in young people was revealed in 44.8%. The hemodynamic analysis and adaptation abilities of CVS showed, group1 participants, with normal AP of CVS, had lower levels of the SBP, DBP, and HR than persons of Group 2. The AP perturbation in young people was revealed in 44.8%. The descriptive analysis of the hemodynamic state of the adaptation abilities of CVS showed, group1 participants with normal AP of CVS, had lower levels of the SBP, DBP, and HR than persons of Group 2. Moreover, the sympathetic influence was observed in 31.25% of the first group and 69.23% of the second group. BMI was in the normal range in the first group. Conversely, in the second group, 46 % and 8 % were preobese and first-degree obesity, respectively. Interestingly, 10 (62.5%) (I) and 3 (23.2%) (II) participants had a severe degree of anxiety.

**Conclusion:** AP abnormalities in youngs are accompanied by the prevalence of sympathetic influences in the regulation of CVS functions in 44.8%. In reducing the adaptive-compensatory potential of CVS and the development of CVD in young people, the factors of gender, overweight, and anxiety are the most significant.

## ОЦЕНКА РОЛИ ИММУНОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ В ДИАГНОСТИКЕ РАКА ЭНДОМЕТРИЯ

Д.У. Гафурбаева<sup>a</sup>, А.В. Ахметзянова<sup>b</sup>, А.Р. Рахматуллина<sup>a</sup>, С.О. Генинг<sup>c</sup>,  
А.А. Ризванов<sup>a</sup>, Р.Р. Мифтахова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ИФМиБ КФУ, Казань;

<sup>b</sup> ГАУЗ РКОД МЗ РТ, Казань;

<sup>c</sup> ФГОУ ВО УлГУ, Ульяновск.

*dinagafurbaeva@gmail.com*

**Актуальность.** На данный момент не обнаружено сывороточных биомаркеров, обладающих достаточной чувствительностью и специфичностью для диагностики рака эндометрия (РЭ). Прогностическая и диагностическая роль уровня сывороточных цитокинов и хемокинов показана при злокачественных образованиях женской репродуктивной системы, включая рак яичников (РЯ), рак шейки матки и рак молочной железы. Исследование было направлено на изучение диагностической значимости уровней 61 белковых анализов сыворотки крови для диагностики рака эндометрия.

**Материалы и методы.** Концентрация 61 белкового анализа была определена в сыворотке 35 пациенток первичным РЭ, 23 больных РЯ и 24 здоровых женщин. Измерение проводилось при помощи наборов для мультиплексного анализа по технологии хMAP (Human Circulating Cancer Biomarker Panel 1 и 41 Plex Human Cytokine/Chemokine Magnetic Bead Panel, Merck, США).

**Результаты и обсуждение.** Выявлено повышение СА-125 у 96% пациенток с РЯ (специфичность 96%) и у 6% пациенток с РЭ (специфичность 42%). Достоверные отличия были выявлены для 27 анализов при РЯ и 16 анализов при РЭ (тест Краскела-Уоллиса,  $p=0,001$ ). Для оценки диагностической эффективности маркеров при РЭ были построены ROC-кривые (англ. receiver operating characteristic) для анализов, отличающихся в группах. Обнаружено, что среди исследованных маркеров наибольшей диагностической значимостью для РЭ обладает уровень ИЛ-8, для которого чувствительность составила 97,14%, но показатель и специфичности не превысил 59,62% (площадь под кривой 0,7761, доверительный интервал (ДИ): 0,6782-0,8740).

Для поиска более специфичных маркеров были исследованы комбинации анализов. Наибольшую чувствительность (97,14%) показала панель ИЛ-6, ИЛ-8, sCD40L и TRAIL со специфичностью 71,11%, площадь под кривой составила 0,8844 (ДИ: 0,8112-0,9577). Наибольшую специфичность при РЭ (84,21%) показала комбинация ИЛ-6, ИЛ-8, IP-10 и TRAIL с чувствительностью 85,71%, (площадь под кривой - 0,9034; ДИ: 0,8328-0,9739).

**Заключение.** Комбинация ИЛ-6, ИЛ-8, TRAIL и IP-10 в сыворотке крови может использоваться как чувствительный и специфичный маркер для диагностики РЭ.



## ПОЛУЧЕНИЕ ОБРАЗЦОВ МИНЕРАЛЬНОГО КОСТНОГО КОМПОНЕНТА ИЗ ДЕНТАЛЬНЫХ ТКАНЕЙ ЧЕЛОВЕКА И ЖИВОТНЫХ

А.А. Гнедова, Д.Е. Мухдина, Е.В. Писарева, М.Ю. Власов

*Самарский национальный исследовательский университет, Самара, Россия.*

*pellal@rambler.ru*

В костной ткани содержится значительное количество минерального компонента, а значит в настоящее время большое значение имеет получение различных биоматериалов, материалов из опорных соединительных тканей и биоматериалов, которые способны обеспечить контруктивные и остеоиндуктивные свойства природного матрикса является достаточно актуальной в наше время.

До настоящего момента дентальные ткани не использовались для получения биоматериалов по технологии «ЛИОПЛАСТ» [1]. Их можно использовать для коррекции нарушения костного метаболизма и минерального гомеостаза, для восстановления структуры и объема костной ткани при повреждениях и резорбции кости, как компонент зубных паст для профилактики кариеса и деструктивных процессов в эмали зуба. В связи с этим, целью исследования стало изучение динамики деминерализации дентальных тканей человека и крупного рогатого скота (КРС) для разработки модификации метода получения минерального компонента из этих тканей.

В работе исследована динамика деминерализации дентальных тканей крупного рогатого скота и человека в зависимости от вида животного, типа зуба (резцы, моляры, премоляры), концентрации деминерализующих растворов кислот (соляная кислота 1,8Н и 2,4Н) и соотношения массы и объема раствора (1:5 и 1:10).

В ходе исследования было установлено, что максимальный выход кальция во всех типах исследованных образцов при всех видах обработки обнаруживается при первой смене раствора на третьи сутки деминерализации. При исследовании динамики деминерализации премоляров у КРС установлено, что максимальный выход кальция приходится при первой смене растворов на третьи сутки. Содержание  $\text{Ca}^{2+}$  на шестые и последующие сутки достоверно отличается от первоначальной точки и составляет следовые кол-ва от исходного уровня. К 12 суткам деминерализации процесс закончен полностью. При исследовании деминерализации моляров коровы получены аналогичные изменения. При деминерализации резцов коровы тенденция сохранилась, но выявились особенности: при использовании максимальной концентрации объема кислоты и максимального объемно-массового соотношения процесс заканчивается на шестые сутки.

При деминерализации премоляров человека при использовании концентрации 1,8Н процесс заканчивается быстрее при использовании объемно-массового соотношения 1:10, чем 1:5. Моляры человека деминерализуются дольше, процесс заканчивается на двенадцатые сутки. Исходя из полученных результатов, можно прийти к выводу, что наиболее эффективна деминерализация при использовании концентрации соляной кислоты 2,4Н и объемно-массового соотношения 1:10.

1. Патент №2372892 РФ. *Биоимплантат для восстановления структуры и объема костной ткани.* Оpubл. 20.11.2009 / Л.Т. Волова, В.Г. Подковкин, Е.В. Писарева, М.Ю. Власов – 5 с.

## ЭКСПРЕССИЯ NG2 ПРОТЕОГЛИКАНА ПРИ РАССЕЯННОМ СКЛЕРОЗЕ И МСК ТЕРАПИИ

Голубенко М.А., Архипова С.С.

*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань.*

*golubenckomasha@yandex.ru*

Рассеянный склероз (РС) и его экспериментальная модель - экспериментальный аутоиммунный энцефаломиелит (ЕАЕ), — хроническое аутоиммунное заболевание, характеризующееся появлением очагов демиелинизации в головном и спинном мозге, дегенерацией нервных клеток, гибелью олигодендроцитов. Клетки NG2 – прекурсоры олигодендроцитов, - вызывают особый интерес при РС и ЕАЕ в качестве источников для ремиелинизации [1]. Мезенхимальные стволовые клетки (МСК) перспективны для терапии РС и ЕАЕ [2]. Влияние терапии МСК на ремиелинизацию, количество NG2-клеток, экспрессию NG2-протеогликана в тканях мозга представляет немалый интерес.

МСК выделяли из подкожной жировой ткани и инкубировали в среде DMEM. Индуцированные цитохалазином В микровезикулы были выделены из МСК путём вортексирования. Мыши с индуцированным ЕАЕ (путем введения MOG+PTX) в возрасте 6 недель использовали в качестве моделей РС. В качестве контроля использовали интактных мышей того же возраста. МСК-микровезикулы трансплантировали путем однократной инъекции в хвостовую вену на 7 день после индукции ЕАЕ. Количество NG2-позитивных клеток считали на полутонких срезах спинного и головного мозга толщиной 1 мкм, окрашенных иммуногистохимически с антителами к NG2-протеогликану (Sigma, США) с использованием конфокальной микроскопии. Локализацию и распределение NG2 исследовали методом иммуноэлектронного мечения и трансмиссионной электронной микроскопии.

В тканях животных с индуцированным ЕАЕ наблюдался повышенный уровень экспрессии NG2 по сравнению с интактными животными. У животных, получивших лечение МСК, наблюдалось снижение уровня экспрессии NG2 относительно контрольных животных с индуцированным ЕАЕ, не получивших лечение. Была проанализирована локализация NG2 в НС и внутриклеточная локализация NG2. Увеличение экспрессии NG2 в очагах поражения у животных с индуцированным ЕАЕ является результатом усиленной пролиферации NG2-клеток и их миграции к очагам поражения. Уменьшение экспрессии NG2 у животных, получивших лечение, связано с иммуносупрессивной функцией МСК, а так же может быть связано с дифференцировкой клеток NG2-глии в олигодендроциты, что необходимо для процессов ремиелинизации и сохранении функций НС при РС [3].

1. J. Eugeni-von Bernhardt, L. Dimou. NG2-glia, More Than Progenitor Cells. *Advances in experimental medicine and biology*, 2016, 949, 27–45.
2. P. Lai, J. Weng, L. Guo, X. Chen, X. Du, X. Novel insights into MSC-EVs therapy for immune diseases. *Biomarker research*, 2019, 7, 6.
3. S. Barriola, F. Perez-Cerda, C. Matute, A. Bribian, Lopez-Mascaraque, L. A Clonal NG2-Glia Cell Response in a Mouse Model of Multiple Sclerosis. *Cells*, 2020, 9(5), 1279.

## ХАРАКТЕРИСТИКА УСТОЙЧИВОСТИ КОММЕРЧЕСКИХ ПРОБИОТИЧЕСКИХ ШТАММОВ ЛАКТОБАЦИЛЛ

И.В. Горохова, Е.А. Анисимова, Г.Р. Каримуллина, Д.Р. Яруллина

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань.*

*Ujhbc@mail.ru*

Положительные эффекты лактобацилл нормофлоры кишечника на здоровье человека обусловили их применение как пробиотиков. Важным требованием к пробиотическим штаммам является антибиотикорезистентность (АР): можно использовать только штаммы с природной устойчивостью, а применение штаммов, несущих приобретенные гены АР, может привести к распространению лекарственной устойчивости. Данная работа выполнена с целью охарактеризовать жизнеспособность лактобацилл в составе пробиотических препаратов и их устойчивость к клинически распространенным антибиотикам.

Жизнеспособность лактобацилл в составе восьми пробиотических препаратов и пищевых добавок определяли путем посева на MRS-агар, а видовую идентификацию изолятов – с помощью MALDI Biotyper (Bruker, Германия). В двух препаратах количество жизнеспособных бактерий было ниже рекомендованного минимального количества  $10^6$  КОЕ, а в шести препаратах видовой состав лактобацилл отличался от заявленного производителем. С помощью диско-диффузионного метода (ДДМ) для 22 изолятов *Lactobacillus* выявили уровни устойчивости к 21 антибиотику. Большинство изолятов были устойчивы к ванкомицину, амикацину, ципрофлоксацину, норфлоксацину и чувствительны к антибиотикам пенициллинового ряда, карбапенемам и ингибиторам синтеза белка. Тем не менее, на основании значений МПК шесть штаммов были отнесены к устойчивым к тетрациклину. ПЦР-анализ генетических детерминант устойчивости к антибиотикам выявил широкое распространение гена  $\beta$ -лактамазы расширенного спектра *bla*TEM (84%), гена устойчивости к ванкомицину *vanX* (68%), гена устойчивости к ципрофлоксацину *parC* (63%) у исследуемых лактобацилл. Потенциально мобильный ген устойчивости к тетрациклину *tetK* обнаружен у одного чувствительного к тетрациклину штамма *L. paracasei* Ea-1.

Результаты данного исследования способствуют созданию пробиотических препаратов нового поколения, безопасных с позиций распространения генов АР и эффективных при совмещении с антимикробной терапией.

## СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА РЕГЕНЕРАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ КРИОГЕЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ПЕРЕХОДНЫЕ МЕТАЛЛЫ

А.А. Ергешов<sup>а</sup>, М. Зухайб<sup>а</sup>, И. Савина<sup>б</sup>, Т.И. Абдуллин<sup>а</sup>

<sup>а</sup> ФГАОУ ВО Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия;

<sup>б</sup> Университет Брайтона, Брайтон, Великобритания.

tabdulli@gmail.com

В работе получены и охарактеризованы криогелевые биоматериалы, модифицированные соединениями переходных металлов в качестве биоактивного компонента. Проведено сравнительное исследование регенеративной активности криогелей различного состава *in vitro* и при подкожной имплантации. Результаты могут быть использованы для создания новых тканеинженерных биоматериалов.

Макропористые гидрогели, получаемые методом криожелирования (криогели), являются перспективными биоматериалами для тканевой инженерии и доставки лекарств благодаря высокой доступности для клеток и нутриентов [1]. Актуальной задачей является создание криогелей, модифицированных биоактивными агентами с усиленными регенеративными свойствами в отношении поврежденных тканей [2]. Для её решения в работе использованы соединения переходных металлов, играющих важную роль в процессах обновления и регенерации различных тканей организма [2, 3].

Получен ряд криогелей, допированных кобальтом, медью, цинком и их композициями. Методом конфокальной микроскопии и ротационной реометрии установлен модулирующий эффект металлических компонентов на пористую структуру и вязкоупругие свойства криогелей. Исследовано поведение фибробластов кожи человека и клеток HUVEC в модифицированных криогелях, определены условия, способствующие пролиферации клеток в составе криогелевой матрицы, а также биосинтеза цитокинов и факторов роста.

Оптимизирована *in vivo* модель у крыс, основанная на подкожной имплантации криогелей, содержащих переходные металлы. Проведено гистологическое исследование, позволяющее оценить и сопоставить регенеративные эффекты криогелей различного состава в отношении тканей и придатков кожи. Результаты представляют интерес для создания улучшенных биоматериалов на основе криогелей, активированных переходными металлами, и поиска их новых приложений в тканевой инженерии и регенеративной медицине.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Вьетнамской академии наук и технологий в рамках научного проекта 21-515-54003, а также в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

1. Savina IN, Zoughaib M, Yergeshov AA. Design and Assessment of Biodegradable Macroporous Cryogels as Advanced Tissue Engineering and Drug Carrying Materials. *Gels*. 2021; 7(3):79. <https://doi.org/10.3390/gels7030079>
2. D. Luong, A.A. Yergeshov, M.H. Zoughaib, F.R. Sadykova, B.I. Gareev, I.N. Savina, T.I. Abdullin. Transition metal-doped cryogels as bioactive materials for wound healing applications. *Material Science and Engineering: C*. – 2019. – Vol. 103 (109759). – P.1-13. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.109759>
3. M. Zoughaib, D. Luong, R. Garifullin, D. Z. Gatina, S. V. Fedosimova, T. I. Abdullin. Enhanced angiogenic effects of RGD, GHK peptides and copper (II) compositions in synthetic cryogel ECM model. *Material Science and Engineering: C*. – 2021. – Vol. 120 (111660). – P.1-12 <https://doi.org/10.1016/j.msec.2020.111660>

# СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ БЕТАИНОВ – СОЕДИНЕНИЙ, ОБЛАДАЮЩИХ ШИРОКИМ СПЕКТРОМ ПРАКТИЧЕСКИ ПОЛЕЗНЫХ СВОЙСТВ

Е.А. Ермакова, Р.Р. Давлетшин, Д.Р. Долгова, Н.В. Давлетшина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

ermak-k99@mail.ru

Широкое применение антимикробных препаратов привело к возникновению резистентных штаммов болезнетворных микроорганизмов. В современной медицине в качестве антибактериальных и антисептических препаратов широко используются четвертичные аммониевые соли (ЧАС). Фосфорилированные бетаины можно назвать аналогами ЧАС, в которых одна алкильная группа заменена на фосфонат-анион.

По представленной ниже схеме получена серия фосфорилированных бетаинов (рисунок 1).

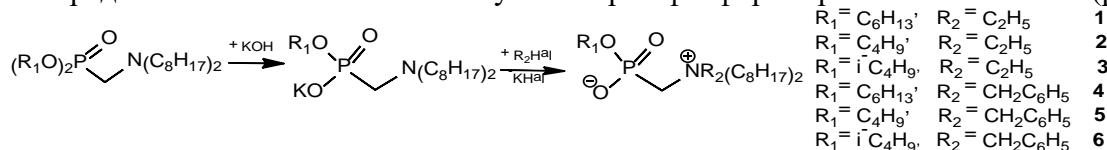


Рисунок 1 – Общая схема синтеза фосфорилированных бетаинов 1-6.

Некоторые из полученных соединений были исследованы на наличие антимикробной активности по отношению к патогенным штаммам микроорганизмов: *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida albicans* и *Bacillus cereus*.

Фосфорилированные бетаины также представляют интерес как комплексообразующие агенты. Нами были изучены мембранно-транспортные и комплексообразующие свойства фосфорилированного бетаина **4** по отношению органическим субстратам. С использованием метода ИК-спектроскопии установлены основные центры координации переносчика (рисунок 2).

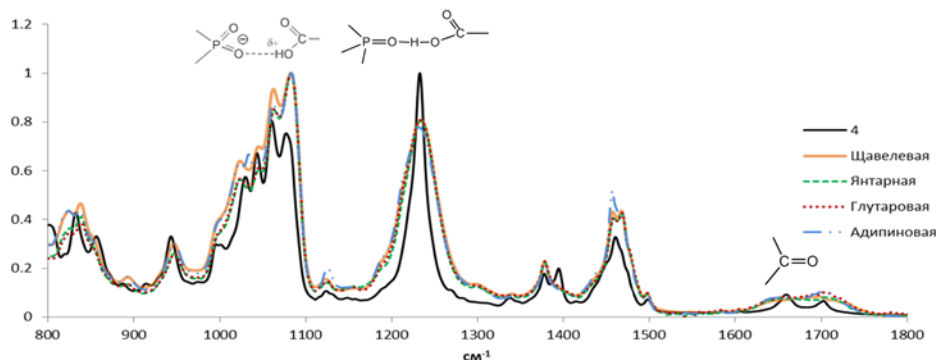


Рисунок 2 – Фрагменты нормализованных ИК-спектров переносчика **4** и его комплексов с кислотами.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (№ 0671-2020-0063).

## НЕКОТОРЫЕ ГЕНЕТИЧЕСКИ ОПОСРЕДОВАННЫЕ НАРУШЕНИЯ ГЕМОСТАЗА В ПАТОГЕНЕЗЕ ПРЕЭКЛАМПСИИ

Т.И. Власова, Д.А. Зобова, Е.В. Иванова, О.Д. Худайберенова, Т.И. Шишканова

*ФГБОУ ВО "МГУ им. Н.П. Огарёва", г. Саранск, Россия.*

*vlasova-t.i@mrsu.ru*

**Цель исследования:** Определить значение генетически (полиморфизм гена фибриногена FGB) опосредованных нарушений гемостаза в патогенезе гипоксии плода при тяжелой преэклампсии (ПЭ).

**Материалы и методы:** Для проведения исследования были отобраны 110 пациенток, наблюдавшихся и родоразрешенных в отделениях перинатального центра ГБУЗ Республики Мордовия «МРЦКБ» в период с 2016-2020 гг. В соответствии с целью и задачами исследования все беременные были разделены на 2 группы. Первую группу (I) – контроль составили 52 беременных с физиологическим течением процесса гестации, вторую группу (II) – 58 пациенток с тяжелой ПЭ. Генотипирование полиморфизма гена фибриногена FGB (G(-455) A) определено методом Real-time ПЦР с применением аппарата CFX96 Touch™ Real-Time PCR Detection System (США); тромбоэластография (ТЭГ) крови беременных (TEG® 5000 Thrombelastograph®(USA)).

**Результаты и их обсуждение:** По данным ТЭГ зарегистрированы существенные изменения гемостатических показателей, характеризующиеся явлениями гиперкоагулемии: R(I) -  $4,12 \pm 0,23$ , R(II) -  $2,92 \pm 0,16$ ; K(I) -  $1,73 \pm 0,11$ , K(II) -  $0,95 \pm 0,08$ ,  $\alpha$ (I) -  $57,8 \pm 3,28$ ,  $\alpha$ (II) -  $86,1 \pm 4,73$ ; G(I) -  $7,13 \pm 0,42$ , G(II) -  $13,43 \pm 0,70$ ; MA(I) -  $61,3 \pm 4,09$ , MA(II) -  $81,4 \pm 4,39$ . При тяжелой преэклампсии в выборке пациенток регистрировалось достоверное ( $p < 0,001$ ) увеличение частоты встречаемости патологического аллеля A гена FGB (G(-455)A): A(I) – 4 (7,7%), G(I) – 48 (92,3%); A(II) – 35 (60,3%), G(II) – 23 (39,7%). Указанные изменения были сопряжены с выраженностью асфиксии и гипоксии новорожденных.

**Заключение:** На основе ТЭГ и генетических исследований нами установлено, что у женщин, течение беременности которых осложнилось ПЭ, установлено увеличение частоты встречаемости патологического аллеля гена фибриногена FGB (на 52,6 % ( $p < 0,001$ )) в сопряженности с явлениями гиперкоагулемии, которые коррелировали с выраженностью асфиксии и гипоксии новорожденного. Применение полученных результатов позволит прогнозировать вероятность развития и тяжесть гипоксии плода.

## ПРИМЕНЕНИЕ ТЕСТ-СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗНОГО НОСИТЕЛЯ ДЛЯ ЭКСПРЕСС ДИАГНОСТИКИ НАЛИЧИЯ НЕДЕРЖАНИЯ МОЧИ У ЖЕНЩИН

В.О. Золотухин, Ю.Ю. Мадыкин, В.О. Миттова, Н.В. Хороших

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет им Н.Н.Бурденко».

*zolutuxin\_v@bk.ru*

**Актуальность:** Недержание мочи – патологическое состояние, которое встречается примерно у 200 миллионов человек во всем мире. Симптомы недержания мочи проявляют себя хотя бы один раз в год у 5–69% женщин, частота встречаемости недержания мочи у женщин в два раза выше, чем у мужчин [1]. На сегодняшний день недержание мочи является одной из часто встречающихся и трудных проблем в урогинекологии. Согласно данным зарубежных авторов, частота распространения НМ среди женщин составляет 15,7–67% [2,3]. В старшей возрастной группе у женщин – старше 50 лет – распространенность НМ оценивается в 40–45%. По данным опроса, проведенного в Российской Федерации среди женщин от 35 до 75 лет, недержание мочи отмечают 38,6% из опрошенных, а при сочетании с пролапсом гениталий частота встречаемости достигает 75% [2-4]. Согласно данным в Российской Федерации, НМ страдает каждая третья женщина в старшей возрастной группе, однако только около 4% обращаются за медицинской помощью, что связано с интимностью вопроса и убежденностью женщин в том, что данная проблема неизбежно связана с естественными возрастными изменениями [2]. Ранняя диагностика данного заболевания позволяет вовремя выявить изменения и нарушения в организме женщины, лежащие в основе развития различных форм недержания мочи, что делает возможным с успехом использовать консервативные и малоинвазивные методы лечения данных нарушений, и ряде случаев отказаться от выполнения сложного оперативного вмешательства.

**Цель:** Целью данного исследования является оценка эффективности применения тест-системы на основе целлюлозного носителя для экспресс диагностики наличия недержания мочи у женщин.

**Материалы и методы:** В исследовании приняли участие 50 женщин в возрасте от 18 до 60 лет, средний возраст пациенток составил  $42,8 \pm 2,4$  года, не предъявляющие жалобы на заболевания мочеполовой системы. При прохождении медицинского осмотра у уролога, им было предложено носить предлагаемую тест-систему для определения наличия бессимптомных заболеваний мочеполовой системы. Предлагаемую тест-систему необходимо носить в течение суток, поскольку при латентном течении заболеваний мочеполовой системы количество выделений достаточно мало, а для точного анализа необходимо минимум 1 мл секрета, лицевая сторона тест-системы должна быть обращена к области уретры, необходимо избегать случайного попадания посторонних жидкой на тест систему, для избегания ложноположительного результата. Анализ эффективности предложенной тест-системы проводили по выявлению изменения цвета индикатора после использования тест системы в течение дня. В данном исследовании использовалась тест-система, разработанная на базе ВГМУ им Н.Н.Бурденко состоящая из целлюлозного носителя – прокладка женская гигиеническая, модифицированная индикатором бромтимоловым синим (Патент РФ: «Прокладка-индикатор для диагностики заболеваний репродуктивной системы человека» Номер патента: RU 200701 U1 от 6.11.2020 г).

**Результаты исследования:** Положительный результат, а именно изменение окраски прокладки-индикатора, зарегистрирован у 6 женщин (12%) У 2-х женщин (4%), после сбора анамнеза о способе применения предлагаемой тест-системы были выявлены нарушения в ее использовании, что потребовало еще одного дня применения предложенной методики, после которого был получен положительный результат – изменения цвета индикатора.

После проведенного обследования у 5 пациенток (62,5%) было диагностировано стрессовое недержание мочи, при этом у 3 (60%) пациенток было диагностировано стрессовое недержание

мочи тип 0 по J.G. Blaivas и E.J. McGuire, средний возраст пациенток составил  $22,4 \pm 1,8$  года. У 2 пациенток (40%) тип 1 по G. Blaivas и E.J. McGuire, средний возраст  $30,8 \pm 2,6$  лет. У всех пациенток после проведенной консервативной терапии все симптомы недержания мочи полностью регрессировали. В качестве методики консервативной терапии была применена лазерная терапия с применением эрбиевого лазера, при этом для исчезновения симптомов потребовалось проведения четырех-пяти сеансов лазерной терапии.

У 1 (12,5%) пациентки диагностировано недержание мочи после многократных родов через естественные родовые пути, возраст пациентки составил – 54 года, количество родов через естественные родовые пути – 5. В данном случае потребовалось проведение оперативного вмешательства, после которого удалось достичь регресса заболевания.

У 1 (12,5%) пациенток подтекание мочи появилось после проведенного оперативного вмешательства на органах малого таза, возраст пациентки – 63 года.

У 1 (12,5%) пациентки отмечено недержание мочи вследствие травмы дна мочевого пузыря фрагментами сломанных в результате ДТП лобковых костей.

**Обсуждения и выводы:** Предложенная тест система является высокоэффективным методом экспресс диагностики наличия начальных проявлений недержания мочи, основанная на изменении цвета индикатора, находящегося на поверхности тест-системы – разработанной прокладки.

Применение предложенной тест системы позволяет диагностировать недержание мочи всех типов на ранних стадиях заболевания, что позволяет добиться ремиссии заболевания на ранних стадиях его развития.

1. Мехтиева Э.Р., Ящук А.Г., Зайнуллина Р.М., Мусин И.И. Роль полиморфизма генов коллагена 1-го и 3-го типов, гена рецепторов витамина Д в возникновении несостоятельности тазового дна у женщин. Практическая медицина '7 (108) сентябрь 2017 г.
2. Короткевич О.С., Эйзенх И.А., Мозес В.Г., Захаров И.С. Клиническая эффективность вагинального тренажера в лечении несостоятельности мышц тазового дна у женщин пожилого возраста // Фундаментальная и клиническая медицина . 2018. №4.
3. Аполихина И.А., Соколова А.В., Саидова А.С., Горбунова Е.А. Аутологичная плазма, обогащенная тромбоцитами, в сочетании с гиалуроновой кислотой – новый метод малоинвазивного лечения стрессового недержания мочи у женщин. Медицинский Совет. 2018;(13):16-20. <https://doi.org/10.21518/2079-701X-2018-13-16-20>
4. Zhou S., Zhang K., Atala A., Khoury O., Murphy S.V., Zhao W., Fu Q. Stem cell therapy for treatment of stress urinary incontinence: the current status and challenges. Stem Cells. International. 2016; Article ID 7060975, 7 p.



## ТВЕРДЫЕ ДИСПЕРСИИ ПАРА-АМИНОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ВОЗМОЖНОСТЬЮ ИНГАЛЯЦИОННОЙ ДОСТАВКИ

Л.С. Зубайдуллина, Р.Ф. Биктимирова, А.В. Герасимов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*lian-usman@mail.ru, Alexander.Gerasimov@kpfu.ru*

В настоящее время уделяется большое внимание получению и применению твердых дисперсий лекарственных веществ на основе биосовместимых полимеров, с целью увеличения их биодоступности. Твердые дисперсии сочетают в себе пролонгированность действия и необходимую гидрофильность, что позволяет уменьшить дозировку, сократить число побочных эффектов и повысить эффективность препарата.

Одним из экспрессных способов введения лекарственных препаратов в организм человека является ингаляционная терапия в форме аэрозоля с контролируемыми параметрами, которая в ближайшем будущем может служить перспективной неинвазивной альтернативой инъекционному введению лекарств. Благодаря обильной сети капилляров и большой поверхности альвеол легких лекарственные вещества могут всасываться легкими очень быстро, при этом, не утрачивая своей активности при попадании в печень.

В данном исследовании с помощью методов дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской порошковой дифрактометрии и вискозиметрии были оптимизированы параметры проведения распылительной сушки для получения микросферических частиц твердых дисперсий пара-аминосалициловой кислоты с поливинилпирролидоном K29-32.

Полученные микрочастицы были охарактеризованы набором физических и физико-химических методов, включающих в себя дифференциальную сканирующую калориметрию, термогравиметрию, рентгеновскую порошковую дифрактометрию, УФ-спектрофотометрию, сканирующую электронную микроскопию и ИК-спектроскопию.

## АНАЛИЗ BECLIN-1, BCL2, LC3 И CASPASE 3 В МОНОЦИТАХ БОЛЬНЫХ ТЯЖЕЛОЙ ФОРМОЙ АТОПИЧЕСКОЙ БРОНХИАЛЬНОЙ АСТМЫ

Б.Р. Ибрагимов, Ю.В. Скибо

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*Ibragimov94@inbox.ru*

Нарушение регуляции аутофагии связано с многочисленными аутоиммунными заболеваниями. Существует все больше доказательств того, что аутофагия также может влиять на патогенез и / или прогрессирование многих заболеваний человека [1], включая иммунные расстройства (астму) и хроническую обструктивную болезнь легких (ХОБЛ). Целью данного исследования является анализ экспрессии ключевых белков аутофагии в моноцитах больных тяжелой формы атопической бронхиальной астмой.

Моноциты были выделены методом центрифугирования в оптимизированном градиенте плотности Перколла. Вестерн-блоттинг был использован для анализа содержания белка.

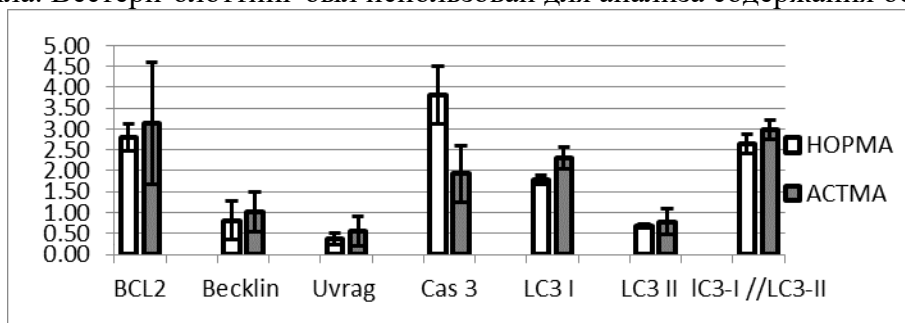


Рисунок 1 – Анализ содержания апоптотических - Casp-3 и Bcl-2 и аутофагических -Beclin 1, LC3 белков в лизатах моноцитах.

На первом этапе был проведен анализ апоптотического белка Bcl-2, ответственного за подавление апоптоза и ингибирование Caspase 3. В группе с астмой установлено повышение Bcl-2 по отношению к контролю, а также снижение белка Caspase 3. Далее был проведен анализ Beclin-1, ответственного за иницирование аутофагии. В группе с астмой имеется тенденция к повышению содержания этого белка.

На следующем этапе определяли содержание LC3 белка. Уровни LC3-I и LC3-II при астме были выше, чем у здоровых доноров и их соотношение при астме также было выше.

Помимо апоптоза и аутофагии, в моноцитах за клеточную деградацию апоптотического груза отвечает процесс LC3 ассоциированного фагоцитоза. LAP имеет решающее значение для управления перевариванием захваченных клеточных остатков и предотвращения воспалительных и иммунных реакций. По данным литературы, дефекты в LAP, а не канонической аутофагии, могут вызывать СКВ-подобные явления и могут способствовать патогенезу астмы. Поскольку в работе было установлено повышение Beclin-1, Uvrag и LC3, которые являются компонентами LAP пути, то мы предполагаем, что в моноцитах больных тяжелой формой астмы развивается неканоническая аутофагия, что является предметом дальнейшего изучения.

1. E.L. Eskelinen, P. Saftig. Autophagy: a lysosomal degradation pathway with a central role in health and disease. 2009, 664-673.

## УЛУЧШЕННЫЕ КЛЕТОЧНЫЕ АНТИОКСИДАНТЫ НА ОСНОВЕ АМФИПАТИЧЕСКИХ КАТИОННЫХ ОЛИГОПЕПТИДОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТРИФЕНИЛФОСФОНИЕВОЙ ГРУППОЙ

Р.А. Ишкаева, А. Рагад, Р.И. Гарифуллин, Д.В. Салахиева, Т.И. Абдуллин

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*r.a.ishkaeva@gmail.com*

Окислительный стресс, возникающий в клетках в результате дисбаланса между производством активных форм кислорода (АФК) и антиоксидантной (АО) защитой, является одной из главных причин возникновения дегенеративных, воспалительных и опухолевых заболеваний. АО терапия является одним из основных подходов в лечении и профилактике этих заболеваний, однако, клинические исследования традиционных АО не подтвердили их терапевтическую активность. Перспективной основой для создания АО нового поколения являются пептидные соединения благодаря специфичности их действия.

Нами исследованы амфипатические тетрапептиды Tyr-Arg-Phe-Lys на основе чередующихся ароматических и катионных аминокислот – митохондриально-направленные АО, обладающие цитопротекторными и антиапоптотическими эффектами. Для улучшения фармакокинетических и фармакологических свойств предложены и синтезированы конъюгаты мотива Tyr-Arg-Phe-Lys с модулирующей трифенилфосфониевой группой (ТФФ).

В докладе рассмотрены результаты сравнительного исследования конъюгатов с различной структурой на предмет их протеолитической стабильности, АО активности, способности модулировать активность митохондрий и ингибировать уровень окислительного стресса в клетках с различным редокс-метаболизмом. Оценено влияние ТФФ групп на внутриклеточное накопление конъюгатов. Идентифицированы препараты, представляющие интерес в качестве улучшенных безопасных клеточных АО для лечения заболеваний, ассоциированных с окислительным стрессом. Результаты также могут быть использованы в создании различных терапевтических пептидов, конъюгированных с ТФФ группой, с повышенной протеолитической стабильностью и специфической активностью.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10105) и в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

1. Akhmadishina R. *et al.*, Front. Pharmacol., 2018, **9**, 1–13.
2. Garifullin R. *et al.*, Eur. Biophys. J., 2019, **48**(1), 25–34.

## ПОЛУЧЕНИЕ И НЕКОТОРЫЕ РЕДОКС-МОДУЛИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА КОНЬЮГАТОВ ОЛИГОПЕПТИДОВ НА ОСНОВЕ ГИСТИДИНА С ТАРГЕТНЫМИ ГРУППАМИ

М.И. Камалов, Р.А. Смирнов, Д.В. Салахиева, В.В. Часов, Р.И. Гарифуллин, Т.И. Абдуллин

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*kamalovmi@gmail.com*

Большинство видов активности, проявляемых олигопептидами в живых организмах, относятся к регуляторной и протекторной (в т.ч. антиоксидантной) функциям. Антиоксидантные свойства представляют значительный интерес в регуляции патологической продукции АФК и лечении ассоциированных с окислительным стрессом заболеваний.

В работе получен и охарактеризован ряд гистидин-содержащих пептидов (ГСП) и их конъюгатов с трифенилфосфониевыми и жирнокислотными группами. Структуры полученных соединений подтверждены методом ВЭЖХ/МС.

По данным МТТ-теста на культурах клеток млекопитающих исследуемые пептиды не обладали значительной цитотоксичностью. Методом изотермической титрационной калориметрии охарактеризованы взаимодействия пептидов с дивалентными марганцем и медью, выявлены структуры, образующие высокоаффинные комплексы. С использованием тетразолиевого индикатора установлено, что ГСП в комплексе с металлами проявляют супероксиддисмутазаподобную активность, а их модификация липофильными группами модулирует проявляемую активность. Установлено, что некоторые пептиды и их комплексы при действии на клетки индуцируют различный по степени прооксидантный эффект, предположительно, обусловленный фентоновскими реакциями.

Полученные результаты представляют интерес в улучшении структуры биологически активных гистидин-содержащих пептидов и их фармакологических свойств посредством модификации трифенилфосфониевыми и жирнокислотными группами.

*Исследования выполнены при поддержке гранта РНФ № 20-73-10105 и Программы стратегического академического лидерства КФУ.*

## ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЭКСТРАКТОВ НЕКОТОРЫХ РАСТЕНИЙ СЕМ. *ASPARAGACEAE* НА БАКТЕРИИ *P. LACTOBACILLUS*

Я.Н. Камалова, М.Н. Егорова, Карамова Н.С., Д.Р. Яруллина

Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань

yazgulen@mail.ru

Известно, что лактобациллы, являющиеся симбионтами организма человека, оказывают благотворное влияние на здоровье макроорганизма. Однако побочным действием химиотерапии является нарушение нормальной микрофлоры кишечника и гибель лактобактерий [1]. Таким образом, целью работы явилась оценка антимикробного потенциала экстрактов некоторых лекарственных растений сем. *Asparagaceae*, проявляющих цитотоксичность к различным опухолям, в отношении бактерий р. *Lactobacillus*.

Для приготовления водных растворов метанольных экстрактов использовали материал растений: листья и луковицы *Polianthes tuberosa*, листья *Yucca filamentosa* и *Furcraea gigantea*. Их антибактериальное действие проверяли по отношению к изолятам *Lactobacillus fermentum* Ga («Гастрофарм»); *L. plantarum* Na (БАД «Наринэ»); *L. plantarum* RiaF-8 (БАД «РиоФлора Баланс Нео»); *Lactobacillus* sp. HF-A4; *Lactobacillus* sp. HF-D1, *Lactobacillus* sp. HF-E1 (фекалии, кишечник клинически здоровых людей).

Для определения антибактериального эффекта экстрактов применяли диско-диффузионный метод. В 20 мл стерильной агаризованной среды MRS, растопленной и остуженной до 45°C, вносили 1 мл суспензии лактобацилл с плотностью  $1.5 \times 10^8$  КОЕ/мл, тщательно перемешивали, после чего наслаивали ровным слоем на чашку Петри. После застывания среды стерильным пинцетом раскладывали на поверхность агара диски, пропитанные растворами экстрактов (1, 0.5, 0.25 мг/диск). В качестве негативного контроля использовали стерильную дистиллированную воду. Чашки инкубировали при 37°C в течение 24 ч. Чувствительность лактобацилл к экстрактам оценивали по зонам задержки роста бактерий (мм) вокруг дисков.

Установлено, что все 4 экстракта в исследованном диапазоне концентраций (250-1000 мкг/диск) не угнетают жизнеспособность бактерий шести изолятов р. *Lactobacillus*, выделенных как из кишечника относительно здоровых людей, так и из пробиотических препаратов, что свидетельствует об их безопасности в отношении кишечной микрофлоры в случае потенциального применения препаратов на их основе в качестве цитостатиков.

1. J. Behnsen, E. Deriu, M. Sassone-Corsi, M. Raffatellu. *Chemother. and Pharmacol.*, 2013, **71**, 153–163.

## ОСОБЕННОСТИ БИОХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА МАТРИКСА БАКТЕРИАЛЬНЫХ БИОПЛЕНОК И ИХ ВЛИЯНИЕ НА УСТОЙЧИВОСТЬ К АНТИМИКРОБНЫМ ПРЕПАРАТАМ

А.В. Каримова, Е.Ю. Тризна, А.Р. Каюмов

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*karimovaagnia20@gmail.com*

Главным отличием планктонных форм микроорганизмов и бактериальных биопленок является присутствие в структуре последних внеклеточного матрикса, позволяющего бактериям выживать в неблагоприятных для них условиях. Архитектура и защитные свойства матрикса зависят от особенностей его биохимического состава, поэтому устойчивость биопленок, образованных разными видами микроорганизмов, к негативным факторам неодинакова.

В результате анализа состава внеклеточного матрикса мономикробных биопленок *E. coli*, *K. pneumoniae*, *P. aeruginosa* и *S. aureus*, а также их димикробных сообществ было выявлено достоверное различие в соотношении компонентов матрикса между биопленками *P. aeruginosa* – *S. aureus*, *K. pneumoniae* – *S. aureus* и биопленками, сформированными одним видом. В частности, отмечалось повышение количества  $\alpha$ - и  $\beta$ -полисахаридов в матриксе *S. aureus* – *K. pneumoniae* и уменьшение  $\beta$ -полисахаридов, белков и внеклеточной ДНК в биопленках *P. aeruginosa* – *S. aureus*.

Исследование чувствительности микроорганизмов к антибиотикам широкого и узкого спектра действия в составе моно- и полимикробных биопленок *S. aureus* и *K. pneumoniae* показало, что в составе смешанной биопленки понижается устойчивость обоих видов бактерий к ванкомицину, амикацину и ципрофлоксацину по сравнению с мономикробными биопленками тех же видов. Помимо этого, при определении степени проницаемости бактериальных биопленок для антимикробных веществ было обнаружено, что ципрофлоксацин имеет наибольшую способность к миграции сквозь матрикс биопленок. В то время как проницаемость для амикацина, ампициллина и ванкомицина была значительно ниже.

## СТИМУЛ-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ЗВЕЗДООБРАЗНЫЕ ПОЛИ-2-АЛКИЛ-2-ОКСАЗОЛИНЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, САМООРГАНИЗАЦИЯ В ВОДНО-СОЛЕВЫХ РАСТВОРАХ И ПОЛУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Т.Ю. Кирилэ, А.В. Смирнова, А.П. Филиппов

*Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург.*

*tatyana\_pux@mail.ru*

Получение новых функциональных полимерных материалов для использования их в медицинских приложениях является актуальной задачей современной науки о высокомолекулярных соединениях. Перспективным классом полимеров, используемых для адресной доставки лекарственных веществ, являются поли-2-алкил-2-оксазолины (ПАОЗ). Перспективы практического применения термочувствительных полимеров сложной архитектуры стимулировали исследования в области синтеза и изучения многолучевых звездообразных полимеров, в частности звезд с ПАОЗ лучами.

В данной работе исследованы новые звездообразные стимул-чувствительные полимеры с гексаазоциклофановым ядром, лучами которых являлись поли-2-изопропил-2-оксазолин и поли-2-этил-2-оксазолин.

Методами молекулярной гидродинамики и оптики получены молекулярные массы образцов, их гидродинамические радиусы, константы седиментации и характеристические вязкости в органических растворителях. Процессы самоорганизации в водно-солевых растворах изучены методами светорассеяния и турбидиметрии. Определены температуры фазового разделения и получены характеристики растворов.

На основе полученных звездообразных полимеров получены комплексы с куркумином. Свойства комплексов изучены методами УФ-спектроскопии, атомно-силовой микроскопии и люминисцентного анализа. Для полученных комплексов определены критические константы мицеллообразования и константы связывания.

Полученные результаты показывают, что звездообразные ПАОЗ образуют устойчивые комплексы с куркумином. Соответственно, можно ожидать, что данные звездообразные полимеры могут служить молекулярными контейнерами для широкого круга гидрофобных лекарственных веществ. Данные наноконтейнеры могут использоваться для адресной доставки лекарств.

## АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ НА ПРИМЕРЕ ЦИКЛОСПОРИНОВ

П.П. Кобчикова, С.В. Ефимов, В.В. Клочков

*Институт физики КФУ, Казань.*

*pollymoon@ya.ru*

Различные аналоги семейства циклоспоринов являются объектами исследований уже довольно долгое время. Изначально был открыт циклоспорин А, который по сей день используется в иммунотерапии. Интерес к другим циклоспорином возник, так как циклоспорин А обладает нефротоксичностью, а остальные варианты похожи на него с точностью до одной или двух аминокислот, что привело к идее, что другие циклоспорины могут обладать теми же свойствами, но без побочных эффектов. Циклоспорины состоят из 11 аминокислот, из которых первая Bmt является уникальной. Наиболее часто варьирующимся остатком является второй остаток [1].

Так как информация о пространственной структуре является одной из важнейших характеристик, влияющих на биологическую активность молекулы, данная работа сосредоточена на методах анализа, с помощью которых мы можем получать необходимые знания о структуре и подвижности молекулы, что позволит углубить понимание принципов, влияющих на свойства молекулы [2]. Для этих целей с помощью двумерной спектроскопии были расшифрованы спектры ряда циклоспоринов, которые затем использовались для извлечения информации о расстояниях между атомами. На основе этих данных было проведено моделирование в пакете Gromacs. По данным молекулярной динамики был проведен анализ подвижности молекулы.

1. Borel, J.F. Biological effects of cyclosporin A: a new antilymphocytic agent/ J.F. Borel, C. Feurer, H.U. Gubler// AgentsAction. – 1976. – P. 468-475
2. Kobchikova P.P. Features of spatial structures of cyclosporins D, E and G revealed by NMR and MD simulations/ P.P. Kobchikova, S.V. Efimov, I.A. Khodov, V.V. Klochkov // Journal of Molecular Liquids. – 2021. – Vol.336.



## ХОЛИНЕРГИЧЕСКАЯ РЕГУЛЯЦИЯ СОКРАТИМОСТИ МИОКАРДА ПРЕДСЕРДИЙ МЫШИ В УСЛОВИЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИПЕРГОМОЦИСТЕИНЕМИИ

Е.С. Кунцевич, А.А. Гиляева, Н.Н. Хаертдинов, Р.Г. Каримова, А.С. Блохина

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*e-kuntsevich@bk.ru*

Гипергомоцистеинемия (ГГЦ), выступает предиктором развития сердечно-сосудистых заболеваний [1]. В свою очередь, активация М-холинергических рецепторов оказывает кардиопротективное действие [2,3]. В связи с этим была поставлена цель исследовать холинергическую регуляцию сократимости предсердного миокарда мышцы в условиях моделирования ГГЦ.

Исследования сократимости миокарда предсердий белых нелинейных мышцей проводились в изометрических условиях. Группу мышцей с моделированием ГГЦ в течение 10 недель содержали на диете с повышенным содержанием метионина. В качестве агониста мускариновых ацетилхолиновых рецепторов был использован карбахол (Sigma-Aldrich).

При кумулятивном добавлении карбахола в концентрациях от 1 нМ, до 10 мкМ наблюдался достоверный отрицательный инотропный эффект начиная с концентрации 100 нМ, с максимальным эффектом начиная с концентрации 1 мкМ. Наблюдалось существенное различие в полуэффективной концентрации карбахола, которая в контрольной группе составила  $354,8 \pm 131$  нМ ( $n=6$ ;  $p < 0,05$ ), тогда как в гомоцистеиновой группе  $88,6 \pm 8$  нМ ( $n=7$ ;  $p < 0,05$ ).

Для определения влияния гомоцистеина была использована гомоцистеиновая кислота (ГЦК) в концентрации 300 мкМ, которая оказывала отрицательный инотропный эффект. Достоверных различий кумулятивного эффекта и полуэффективной концентрации карбахола в контроле и на фоне ГЦК не отмечалось. Однако эффект однократного добавления карбахола (1 мкМ) на второй минуте в контроле ( $67,80 \pm 8,1$  ( $n=11$ ;  $p < 0,05$ )) на фоне ГЦК ( $95,71 \pm 4,3$  ( $n=7$ ;  $p < 0,05$ )) достоверно отличался.

Таким образом, наши результаты предполагают возможность влияния гипергомоцистеинемии на холинергическую регуляцию, которая выражается в уменьшении полуэффективной концентрации агониста М-холинорецепторов, однако не влияет на величину максимального ответа на активацию М-холинорецепторов.

1. Djuric D. et al. Can J Physiol Pharmacol. 2018; 96(10):991–1003.
2. Castro R. R. T. et al. Int J Cardiol. 2006; 8;107(1):138-9.
3. Zimerman L. I. et al. Braz J Med Biol Res. 2010; 43(2):211-6.

## ВЛИЯНИЕ УФ-ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРУ БЕЛКОВОЙ МОЛЕКУЛЫ

А.А. Лушева, У.С. Секретарева, О.В. Башарина

*Воронежский государственный университет, 394036, Воронеж, Университетская пл., 1.*

*saschaluscheva@gmail.com*

УФ-излучение применяется в медицине, в частности, в терапии ряда заболеваний используют аутотрансфузию УФ-облученной крови. Целью нашей работы явилось исследование влияния УФ-света на структуру белка: на спектральные свойства и на гидравлический радиус нативной и облученной белковой молекулы. В качестве модельного белка был выбран бычий сывороточный альбумин (БСА).

Раствор БСА ( $1 \cdot 10^{-5}$  моль/л) облучали УФ-светом с помощью облучателя Bio-Link-BLX с  $\lambda_{\text{max}}$  254 в дозах 755, 1510 и 3020 Дж/м<sup>2</sup> (интенсивность облучения 1 лампы из 6 - 0,3 Дж/(см<sup>2</sup>·мин)). Спектры поглощения (220 – 400 нм) растворов БСА регистрировали на спектрофотометре UV-2401 PC Shimadzu, гидродинамические свойства исследовали с помощью спектрометра динамического и статического рассеяния света Photocor Complex. Размер сферических частиц рассчитывается по формуле Стокса-Эйнштейна, которая связывает размер частиц с их коэффициентом диффузии и вязкостью жидкости.

Изменение структуры белка находит отражение в изменении спектра поглощения данного раствора. Нами показано, что при воздействии УФ-света на растворы БСА повышается вклад светорассеяния в спектре поглощения. Поправки на светорассеяния в области полосы поглощения вводятся путем экстраполяции из области, где истинное поглощение отсутствует (340 – 400 нм). Показано, что параметры, характеризующие светорассеяние, линейно возрастают при повышении дозы облучения. Исходя из анализа тонкой структуры спектра поглощения по его второй производной, новых фотопродуктов в белке не образуется. Следовательно, неоднаправленное изменение оптической плотности в максимуме поглощения облученных растворов можно объяснить изменением положения хромофоров белковой глобулы. С помощью метода динамического рассеяния света показано, что радиус нативной глобулы БСА составляет около 5 нм, при воздействии УФ-света размер молекулы увеличивается приблизительно на 20 % во всем диапазоне доз. Возможно, регистрация спектра поглощения является более точным методом для определения структурных изменений в модифицированных белковых молекулах.

## ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ, ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ СВОЙСТВА И МЕХАНИЗМ ДЕЙСТВИЯ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

А.П. Любина, Н.В. Терехова, А.Д. Волошина, Д.А. Татаринov, В.Ф. Миронов

*Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова - Обособленное структурное подразделение ФГБУН "Федеральный исследовательский центр "Казанский научный центр РАН" 420088, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8.*

*aplyubina@gmail.com*

Фосфониевые соли – это широко изучаемый класс фосфорорганических соединений. Они обладают антимикробными, противоопухолевыми и др. биологическими свойствами. В работе исследованы цитотоксичность и механизм действия дифенилалкил-2-гидроксифенилэтилфосфоний хлоридов (1 ряд исследуемых соединений) и алкил-2-гидроксibenзилфосфоний хлоридов (2 ряд исследуемых соединений).

Соединения-лидеры проявляют наиболее высокий цитотоксический эффект на клеточных линиях M-HeLa и NuTu 80. Алкил-2-гидроксibenзилфосфоний хлориды показали более высокую селективностью в отношении вышеуказанных клеточных линий по сравнению с нормальными клетками человека. Было выявлена дозозависимая индукция апоптоза под действием исследуемых веществ. Причем апоптотические эффекты, вызванные соединением второго ряда, протекают в основном в стадии раннего апоптоза, тогда как воздействие соединения первого ряда приводит к увеличению числа клеток в стадии позднего апоптоза. Вещества вызывают значительное снижение митохондриального мембранного потенциала, что говорит о протекании апоптоза по митохондриальному пути. По данным эксперимента в режиме реального времени при повышении концентрации скорость снижения числа жизнеспособных клеток выше для соединений второго ряда, но цитотоксическое действие проявляется позже, чем при воздействии соединений первого ряда.

Таким образом, ряды протестированных соединений имеют схожий механизм действия, связанный с митохондриально-направленным апоптозом. Однако, установление некоторых различий в развитии апоптотических эффектов в раковых клетках, позволит в дальнейшем найти определенные молекулярные мишени воздействия исследуемых фосфониевых солей.

## ИЗУЧЕНИЕ ОСВЕДОМЛЕННОСТИ ПОТРЕБИТЕЛЕЙ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ О ПРОБЛЕМЕ ЛЕКАРСТВЕННОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ И НЕОБХОДИМОСТИ РАЗРАБОТКИ И ВНЕДРЕНИЯ МЕР ПО ЕГО ПРЕДУПРЕЖДЕНИЮ

О.А. Махмудова, В.Н. Хазиахметова

*Кафедра внутренних болезней, Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ,  
Казань.*

*odina\_24@mail.ru*

Нерациональное применение лекарственных средств (далее – ЛС), а также необоснованная полипрагмазия значительно увеличивают количество фармацевтических отходов и риск загрязнения ими окружающей среды. Одной из эффективных мер по минимизации экологического загрязнения ЛС, по мнению экспертов ВОЗ, является просветительская работа среди населения, объяснение опасности проблемы и пропаганда ответственного применения и утилизации медикаментов [1].

С 2019 по 2021 гг. нами были проведены анкетирования на площадке Google, где оценивалось отношение населения к проблеме рационального использования ЛС, надлежащей утилизации ЛС и желания потребителей ЛС сдавать неиспользованные\просроченные ЛС в специальные пункты сбора. В первом опросе приняли участие 287 респондентов, во втором – 159. Результаты опросов показали, что большинство потребителей медикаментов приобретают ЛС в лечебных целях (93,1%). Целью утилизации ЛС для 88% опрошенных является истекший срок годности ЛС. Согласно результатам 2019 года, 80,1% опрошенных выбрасывали просроченные ЛС в бытовой мусор, а 2020г. – 93,7%. Инициативу отдельного сбора ЛС и создания специальных пунктов сдачи просроченных и неиспользованных ЛС поддержали 62,4% в 2019 г. и 86,1% участников опроса в 2020г.

Заключение. Результаты опросов, проведенных в 2019 и 2020 гг., показали, что конечных потребителей ЛС интересует проблема фармацевтического загрязнения окружающей среды и инициатива отдельного сбора просроченных и неиспользованных ЛС поддерживается многими из них. Таким образом, требуется разработка и внедрение мероприятий направленных на утилизацию фармацевтических отходов у населения.

1. Alistair B.A. Boxall. European Molecular Biology Organization/ Alistair B.A. Boxall // The environmental side effects of medication: UK, 2004. - P. 1110-1116

## **ВЛИЯНИЕ ПРОТЕОЛИТИЧЕСКИХ ФЕРМЕНТОВ НА ОБРАЗОВАНИЕ БИОПЛЕНОК *STREPTOCOCCUS SP.***

А.П. Мельник, Е.Ю. Тризна, Д.Р. Байдамшина, Л.Ф. Гафарова, О.В. Остолоповская,  
А.Р. Каюмов

*Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань.*

*amelnik200018@mail.ru*

Микрофлора полости рта представляет собой совокупность представителей различных таксономических групп микроорганизмов, которые способны формировать бактериальные биопленки на поверхности твердых тканей зубов. Поэтому разрушение сформированных биопленок и подавление образования биопленки стрептококками – первичными колонизаторами поверхности зуба является перспективным подходом к замедлению образования зубного налета и предотвратить развитие кариеса [1]. Целью данной работы было установить возможность подавления роста биопленок изолятов *Streptococcus sp.* различными ферментами.

На первом этапе была создана коллекция изолятов стрептококков. Для этого были взяты мазки из ротовой полости группы условно здоровых людей, которые высевали на кровяной агар, изоляты с зоной частичного гемолиза рассевали до одиночных колоний, затем идентифицировали при помощи масс-спектрометрии.

Далее оценивали возможность подавления роста и образования биопленок *Streptococcus sp.* Субтилизином, Фицином и Папаином. Бактерии выращивали в 96-луночной планшете в течение 24 часов при 37°C в присутствии исследуемых ферментов, после чего проводили оценку метаболической активности клеток по резазуриновому тесту. Ни один фермент не приводил к подавлению роста стрептококков. Однако при оценке подавления образования биопленок эффективность демонстрировал Субтилизин и в меньшей степени Фицин и Папаин.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (№20-64-47014).*

1. S. Soriab, P. I. Angulo-Bejaranoa, A. Sharma. Biofilms: Development and molecular interaction, 2019, P. 61-75.

## ВЛИЯНИЕ МЕЖКЛЕТОЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК СПИННОГО МОЗГА ЧЕЛОВЕКА, МОНОНУКЛЕАРНЫХ КЛЕТОК ПЕРИФЕРИЧЕСКОЙ КРОВИ И КАРЦИНОМЫ ПОЧКИ ЧЕЛОВЕКА НА ПРОЛИФЕРАТИВНУЮ АКТИВНОСТЬ КЛЕТОК ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПРЕПАРАТА ЦИСПЛАТИН

В.О. Морева

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии, Кафедра генетики, Казань, Россия.*

*00htlf00@gmail.com*

Микроокружение обеспечивает локальную иммуносупрессию, которая способствует ускользанию опухоли от иммунного контроля со стороны организма. Многочисленные цитокины, секретируемые микроокружением, обеспечивают выживание, питание, рост, пролиферацию и инвазию опухолевых клеток. Лечебное воздействие на микроокружение является не менее значимым, чем традиционная цитостатическая терапия [1].

Цель исследования. Создать двойную ко-культуру, содержащую опухолевые и мезенхимальные стволовые клетки, и тройную ко-культуру, содержащую опухолевые, мезенхимальные стволовые и иммунные клетки и оценить влияние цисплатина на жизнеспособность/пролиферативную активность клеток в ко-культурах.

Материалы и методы. Мезенхимальные стволовые клетки (МСК) были выделены из костного мозга человека и инкубировались в среде  $\alpha$ -MEM (ПанЭко, Россия), клетки карциномы (A498) культивировали в среде DMEM/F-12 (ПанЭко, Россия). Мононуклеарные клетки (МКПК) были выделены из периферической крови в градиенте плотности фиколла (1,077 г/см<sup>3</sup>, ПанЭко, Россия). Клетки культивировали при 37° С, 5% CO<sub>2</sub> во влажной атмосфере. Для создания двойной и тройной ко-культур клетки были смешаны в соотношении 1:1 (по 1500 клеток) и 1:1:1 (по 1000 клеток) соответственно. После 48 часов инкубирования был добавлен препарат Цисплатин-ЛЭНС (ЛЭНС-ФАРМ, Россия). Через 24 часа инкубации с препаратом был проведен MTS-тест (смесь 20:1 реагентов CellTiter96 AQueous MTS Reagent Powder (Promega, США) и феназин метосульфата (Sigma-Aldrich, США) соответственно).

Результаты. Цисплатин оказывал ингибирующее действие на пролиферативную активность клеток: на 16,8% в МСК; на 6,5% в клетках карциномы; на 33,5% в МКПК. В двойной ко-культуре пролиферативная активность клеток упала на 16,2%, в тройной - на 38,5%. Полученные результаты могут указывать на высокую устойчивость клеток карциномы почки к действию цисплатина, однако, снижение пролиферативной активности в тройной и двойной ко-культурах, может указывать на участие МКПК и МСК в противоопухолевом ответе или влиянии межклеточного взаимодействия на повышение чувствительности клеток карциномы к цисплатину.

1. Borisov K. E., Sakaeva D. D. Tumor microenvironment as atarget of malignant gliomas treatment. Malignant Tumours 2015; 4:14-23.

## ИЗМЕНЕНИЕ ФОТОФОБИИ КРЫС С ПРЕНАТАЛЬНОЙ ГИПЕРГОМОЦИСТЕИНЕМИЕЙ В МОДЕЛИ ХРОНИЧЕСКОЙ МИГРЕНИ

С.М. Морозова, Д.В. Чернопольская, К.С. Богатова

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*sofya.mor@inbox.ru*

Гомоцистеин – серосодержащая аминокислота, являющаяся промежуточным продуктом процесса трансметилирования [1]. Повышенное содержание гомоцистеина в крови приводит к развитию гипергомоцистеинемии (ГГц) [2]. ГГц негативно влияет на репродуктивную функцию и на течение беременности. Вследствие этого ГГц может стать причиной серьезных неврологических проблем, стать причиной нарушений умственного и физического развития [3]. Считается, что мигрень, особенно с аурой, связана с повышенным уровнем гомоцистеина в плазме крови, но данные могут иметь неоднозначный характер, и могут зависеть от ряда факторов (индивидуальные особенности и половые различия) [4]. Целью исследования было изучить фотофобию крыс с пренатальной гипергомоцистеинемией в модели хронической мигрени.

Животные были разделены на 2 группы: контрольная группа (К. гр) (n=6) – здоровые животные, уровень гомоцистеина в плазме меньше 10 мкМ/л.; ГГц гр. (n=6) – крысы с пренатальной ГГц, уровень гомоцистеина в плазме больше 18 мкМ/л. Для моделирования хронической мигрени крысам проводили хирургию на черепе и устанавливали «ванночку», в которую вводили КС1 (1М) на 2 часа через день в течение 9 дней. Фотофобия крыс оценивалась в тесте «Темно-светлая камера», исследовали: время захода в темную камеру и время нахождения в темной камере. Статистический анализ проводили по критериям Манна-Уитни (pU<0.05) для независимых и Вилкоксона (pW<0.05) для связанных выборок.

По результатам теста фоновые показатели первого захода в темную камеру составили для К. гр. 9.7±2.3 сек., для ГГц гр. 4.5±1.2 сек. (pU<0.05). Время первого захода в темную камеру при первой аппликации КС1 животных К. гр. и ГГц гр. снизилось до 62.7±16 сек. (pW<0.05) и 68.4±32 сек. (pU<0.05, pW<0.05), на девятый день – 31.3±16 сек. (pW<0.05) и 34.3±14 (pU>0.05, pW<0.05). Фоновые показатели времени пребывания в темной камере для К. гр. составили 127.7±7.4 сек., а для ГГц гр. – 146.5±6.5 сек. (pU<0.01). После аппликации КС1 время нахождения в темной камере увеличилось в обеих группах (К. гр. и ГГц гр.): в первый день – 103.2±3.0 сек. и 106.3±3.0 сек. (pU<0.01, pW<0.05), на девятый день – 119.3±1.0 сек. (pW<0.05) и 125.8±2.7 сек. (pU<0.05, pW<0.05).

Исследования показали, что при моделировании хронической мигрени пороги световой чувствительности меняются в обеих группах. Но у животных с пренатальной ГГц интенсивнее выражена фотофобия и наблюдается более медленное восстановление до фоновых значений при развитии мигрени.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания №0671-2020-0059, и в рамках гранта РФФ №20-15-00100.*

1. H. Jakubowski. *Physiological Reviews*, 2019, **99**, 555-604.
2. Y. Fu et al. *Br. J. Pharmacol*, 2018, **175**, 1173-1189.
3. А.В. Арутюнян с соавт. *Ж. акушерства и женских болезней*, 2010, **4**, 16-23.
4. З.Г. Тадтаева. *Здоровье - основа человеческого потенциала: проблемы и пути их решения*, 2012, **2**, 721-729.

## АНАЛИЗ СИЛЫ МЫШЦ И КООРДИНАЦИИ ДВИЖЕНИЙ У КРЫС РАЗНОГО ВОЗРАСТА

В.Р. Мубаракшина

*ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия.*

*Viktoriam2000@mail.ru*

Саркопения – это процесс возрастного атрофического дегенеративного изменения скелетной мускулатуры, приводящие к постепенной потере мышечной массы и силы [1]. В результате снижения двигательной активности появляется нарушение состояния здоровья, что приводит к повышенному риску падений и переломов. В связи с этим существует потребность в создании модели нормального старения для изучения двигательного дефицита, а также для изучения механизмов старения.

Целью данной работы был анализ изменения мышечной силы и координации движений крыс разных возрастных групп. Объектом исследования являлись белые беспородные самцы крыс линии Wistar в возрасте 3, 6, 9, 12 и 18 месяцев. Крысы содержались в стандартных условиях вивария кафедры физиологии человека и животных КФУ. В ходе эксперимента были использованы следующие методы: тест «Ротарод» для оценки моторных функций, и работоспособности; тест «Сила хватки» для оценки состояния срединного нерва, который у крыс отвечает за хватку передних конечностей; «Балансирование на балке» для оценки координации движений. Статистический анализ экспериментальных данных проводили с использованием непараметрической U-критерий Манна-Уитни.

В ходе эксперимента была выявлена тенденция к уменьшению двигательной активности, снижению мышечной силы и координации движений у крыс с возрастом. В тесте «Ротарод» было обнаружено снижение нахождения времени крыс на вращающемся цилиндре на  $17.1 \pm 12.9$ ,  $21.2 \pm 18.1$  и  $55.2 \pm 0.89$  с ( $p < 0.05$ ) соответственно на 9, 12 и 18 месяцев жизни относительно крыс в возрасте 3 месяцев, что свидетельствует о снижении с возрастом моторных функций, двигательной координации и работоспособности. В тесте «Сила хватки» также наблюдалось уменьшение времени нахождения крыс на сетке на  $44.9 \pm 4.53$  и  $49.05 \pm 2.4$  с ( $p < 0.05$ ) в возрасте 12 и 18 месяцев соответственно относительно крыс в возрасте 3 месяцев, что свидетельствует о снижении силы мышц передних и задних конечностей с возрастом. В тесте «Балансирование на балке» было выявлено уменьшение времени удержания животного на балке на  $34 \pm 18.7$ ,  $62.5 \pm 6.4$ ,  $78.72 \pm 0.7$  с ( $p < 0.05$ ) в возрасте 6, 9 и 18 месяцев соответственно относительно параметров 3-х месячных крыс, что говорит о снижении у них способности к поддержанию равновесия.

1. Богат С. В., Пономарева И. А., Горелик С. Г. Саркопения в гериатрической практике: диагностика, лечение, профилактика // Врач. – 2014. – 6:9-12.



## ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВНУТРИЭРИТРОЦИТАРНОГО ГЕМОГЛОБИНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО ЛЕКАРСТВЕННЫМ ПРЕПАРАТОМ «МОНОСАН»

А.А. Немченко, О.В. Путинцева, В.Г. Артюхов

*Воронежский Государственный университет, Воронеж.*

*nemchenko-98@inbox.ru*

Лекарственный препарат «Моносан» относится к группе органических нитратов, которые широко применяются при лечении сердечно-сосудистых заболеваний. Механизм его действия основан на высвобождении молекул NO, которые, проникая в эритроцитарные клетки, взаимодействуют с молекулами гемоглобина и оказывают влияние на его структуру. Одним из надежных и информативных методов определения состояния гемопротееидов является регистрация электронных спектров поглощения. Исходя из вышеизложенного, наша работа была посвящена изучению спектральных характеристик внутриэритроцитарного гемоглобина после воздействия лекарственного препарата «Моносан» в концентрации  $1,047 \cdot 10^{-4}$  моль/л на суспензии эритроцитов доноров в течение 1 и 24 ч при 37 °С. Было установлено, что после 1 ч влияния модификатора выявляются изменения только в УФ-области спектров поглощения молекулы Hb, по-видимому, обусловленные конформационными перестройками третичной структуры апобелкового компонента исследуемых молекул, индуцированных, вероятно, нитрозированием остатков цистеина (Cys 93β) или тирозина. После воздействия препарата «Моносан» на клетки в течение 24 ч повышалась оптическая плотность образцов как в УФ-, так и в видимой областях спектра, отмечался переход максимума при  $\lambda = 345-346$  нм в «плечо» полосы Core, максимум которой снизился и сдвинулся до 406-409 нм, появилась новая полоса поглощения при 627-632 нм. Следовательно, длительный контакт изосорбида-5-мононитрата с железопорфириновым компонентом гемопротееида приводит к окислению атома железа гема и накоплению метформы гемоглобина. Таким образом, спектральные характеристики внутриэритроцитарного гемоглобина, модифицированного лекарственным препаратом «Моносан», свидетельствуют о высокой реакционной способности молекул оксида азота в качестве токсического агента. NO взаимодействует с кислородом с образованием пероксинитрита, который может быть модификатором структурно-функциональных свойств гемоглобина: ONOO<sup>-</sup> обуславливает прямое окисление железа и нитрование остатков тирозина, поэтому для рационального использования лекарственного препарата «Моносан» больным необходимо строго соблюдать режим дозирования.

## **МЕДИКОСТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И РАННЯЯ ДИАГНОСТИКА ПАЦИЕНТОВ С МНОЖЕСТВЕННОЙ МИЕЛОМОЙ, ВЫЯВЛЕННОЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА**

Т.И. Нестерова, О.В. Башарина

*Медико-биологический факультет, Воронежский государственный университет, 394036,  
Воронеж Университетская пл., 1.*

*tanya-nesterova70@mail.ru*

Понимание закономерностей распространенности и заболеваемости множественной миеломы (ММ) является необходимым условием для осуществления поиска причин и выявления новых факторов риска заболевания. Кроме того, владение актуальной эпидемиологической информацией крайне важно для адекватного планирования, а также для организации научных и клинических исследований.

Нами проводится работа по созданию популяционного регистра больных ММ на примере областной больницы Воронежской области. Для этого используются данные лабораторных исследований (электрофорез, общий анализ крови, биохимические показатели крови), полученных за определенный период. Отмечена высокая диагностическая ценность капиллярного электрофореза при ранней диагностике пациентов с ММ. Выявление распространённости и закономерности развития ММ у пациентов за данный период, перманентный мониторинг их статуса, проводимый нами многофакторный анализ клинических данных позволят улучшить лечебно-диагностический процесс, оптимизировать клиничко-лабораторный мониторинг пациентов, помогут в процессе разработки локальных лечебно-диагностических стандартов ведения больных ММ в повседневной клинической практике, что приведет к повышению результатов терапии.

## ЭКСПРЕССИЯ НАТРИЙ-ЗАВИСИМОГО ФОСФАТНОГО ТРАНСПОРТЕРА NaPi2b СНИЖАЕТСЯ В ОПУХОЛЯХ РАКА ЯИЧНИКА ПОСЛЕ НЕОАДЬЮВАНТНОЙ ТЕРАПИИ

А.К. Нургалиева<sup>а</sup>, В.Е. Попов<sup>а</sup>, С.З. Сафина<sup>б</sup>, Э.Ж. Шакирова<sup>б</sup>, М.В. Богданов<sup>а</sup>,  
Р.Г. Киямова<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, НИЛ «Биомаркер» Казань, Россия;  
<sup>б</sup> Республиканский клинический онкологический диспансер, Казань, Россия.

*alsina97@mail.ru*

Поиск и характеристика новых молекулярных маркеров является актуальной задачей, поскольку в настоящее время не существует эффективных маркеров для диагностики и прогнозирования течения и исхода заболевания рака яичника (РЯ). Натрий-зависимый фосфатный транспортер NaPi2b (ген *SLC34A2*) был идентифицирован как антиген MX35, который избыточно экспрессируется в 90% случаев эпителиального РЯ и в других злокачественных опухолях человека. NaPi2b является мишенью для терапевтических антител ХМТ-1536 и ХМТ-1592, которые проходят клинические испытания для лечения РЯ и немелкоклеточного рака легкого. Целью данной работы является характеристика NaPi2b в качестве молекулярного маркера для диагностики и прогнозирования течения и исхода заболевания РЯ. Анализ экспрессии гена *SLC34A2* в опухолях яичника проводили с использованием ПЦР в реальном времени, цифровой капельной ПЦР и Вестерн-блоттинга. Статистический анализ проводили с учетом степени злокачественности заболевания, стадии заболевания, наличия асцита, выживаемости и наличия неоадьювантной химиотерапии, которая преимущественно проводилась по схеме ТСб (паклитаксел, карбоплатин). Выявлена тенденция к снижению экспрессии гена *SLC34A2* на уровне транскрипции и трансляции с увеличением стадии РЯ, что может быть связано с уменьшением степени дифференцировки опухолевых клеток на более поздних стадиях. Показано, что экспрессия гена *SLC34A2* на уровне трансляции снижается в после неоадьювантной терапии, поэтому пациенты с РЯ после неоадьювантной терапии могут быть нечувствительны к таргетным препаратам, направленным против NaPi2b. Таким образом, полученные данные позволяют предположить, что уровень экспрессии гена транспортера NaPi2b может служить потенциальным маркером для дифференциальной диагностики РЯ и мониторинга применения неоадьювантной и таргетной терапии у пациентов с РЯ.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета, при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-14-00166) и за счет средств субсидии, выделенной Казанскому Федеральному Университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.*

## ДЕФИЦИТ МЫШЕЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ КАК ФАКТОР СНИЖЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ОПОРНО- ДВИГАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

В.А. Пода, Р.И. Зарипова, М.И. Сунгатуллина, Г.Г. Яфарова

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*пода.00@mail.ru*

Ограничение двигательной активности, или гипокинезия (ГК) – это физиологическое состояние, затрагивающее множество групп населения. Воздействие гипокинезии характеризуется как негативное, систематическое и влияющее на деятельность всего организма. Физиологические изменения, происходящие при ГК в скелетных мышцах человека и животных, рассматриваются как проявление функциональной пластичности. Однако связь изменений в эфферентных структурах и перестройки в афферентных и центральных звеньях спинальных двигательных центров на данный момент изучена недостаточно.

Цель исследования – определить механизмы нарушения функционального состояния нейромоторного аппарата крыс после нарастающей гипокинезии, а также в реадaptационном периоде с применением метода стимуляционной электромиографии.

Экспериментальные животные (n=10) находились в состоянии нарастающего ограничения двигательной активности в клетках-пеналах в течении 30 суток, далее содержались в обычном двигательном режиме (период реадaptации) в течении 2 недель. ЭМГ–тестирование производилось у интактных крыс (контроль), а также на 30 сутки ГК и после двухнедельного восстановления. Было показано, что после нарастающей гипокинезии продолжительностью 30 суток наблюдается увеличение длительности моторных ответов трехглавой мышцы голени на стимуляцию седалищного нерва. Также ГК приводила к увеличению времени проведения импульса по спинальной моносинаптической рефлекторной дуге и увеличению длительности рефлекторных ответов. В период реадaptации происходило восстановление длительности ответов моторных и рефлекторных ответов трехглавой мышцы голени, скорости проведения импульса по рефлекторной дуге, однако, наблюдалось отсроченное снижение максимальных амплитуд М– и Н–ответов.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОПУХОЛЕВЫХ СФЕРОИДОВ КОЛОРЕКТАЛЬНОГО РАКА ПОСЛЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ВНЕКЛЕТОЧНЫМИ ВЕЗИКУЛАМИ МЕЗЕНХИМНЫХ СТЕВЛОВЫХ КЛЕТОК

А.С. Пономарев, З.Е. Гилязиева, В.В. Соловьева

*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань.*

*l.ponomarev2013@gmail.com*

Мезенхимные стромальные клетки (МСК) играют особенную роль в патогенезе опухоли [1]. Было продемонстрировано, что МСК взаимодействуют с опухолевыми клетками и микроокружением с помощью внеклеточных везикул [2].

В тоже время, знания о влиянии внеклеточных везикул мезенхимных стволовых клеток (ВВМСК) на опухолевые клетки остаются достаточно ограниченными. Следовательно, целью данного исследования являлось охарактеризовать влияние ВВМСК на опухолевые сфероиды *in vitro*. Сфероиды являются трёхмерными многоклеточными структурами агрегированных опухолевых клеток, которые возможно получить из большинства типов опухолей. Использование сфероидов в научных целях может снизить ограничения, присущие двумерным клеточным культурам [3].

Особенностью данного исследования является использование клеточной линии колоректального рака (НСТ-15) для формирования сфероидов с помощью метода агрегирования клеток, под действием гравитации, на дне капли среды. Везикулы были выделены из мезенхимных стволовых клеток с помощью вещества цитохалазин В [31906012] и последовательного центрифугирования и фильтрования от клеточного дебриса. Добавление везикул к сфероидам колоректального рака происходило в концентрациях 1, 2 и 5 мкг на 20 тыс. опухолевых клеток. Эффект влияния ВВМСК был оценен с помощью анализа окрашивания на Аннексин V и ПЦР-РВ.

Результаты продемонстрировали, что фракция выделенных внеклеточных мембранных везикул содержала округлые структуры, окруженные мембраной. Окрашивание на Аннексин V показало, что добавление 5 мкг ВВМСК снижало жизнеспособность клеток на четвертый день культивирования сфероидов. Были оценены транскрипционные факторы, регулирующие стволовость [3] клеток с помощью ПЦР-РВ. Уровень экспрессии мРНК генов SOX2, Nanog статистически достоверно повышались после добавления 1 и 2 мкг ВВМСК к опухолевым сфероидам. Экспрессия Oct4 была снижена относительно контроля. Экспрессия Oct4 была снижена по сравнению с контролем. После добавления 5 мкг ВВМСК экспрессия этих 3 генов снижалась по сравнению с необработанными сфероидами. Таким образом, эти данные могут указывать на влияние везикул на гены стволовости и требуют дальнейшего изучения.

1. CuiFFo, B.G. and A.E. Karnoub, *Mesenchymal stem cells in tumor development: emerging roles and concepts*. Cell Adh Migr, 2012. **6**(3): p. 220-30.
2. Bruno, S., et al., *Effects of mesenchymal stromal cell-derived extracellular vesicles on tumor growth*. Front Immunol, 2014. **5**: p. 382.
3. Gilazieva, Z., et al., *Promising Applications of Tumor Spheroids and Organoids for Personalized Medicine*. Cancers, 2020. **12**(10).

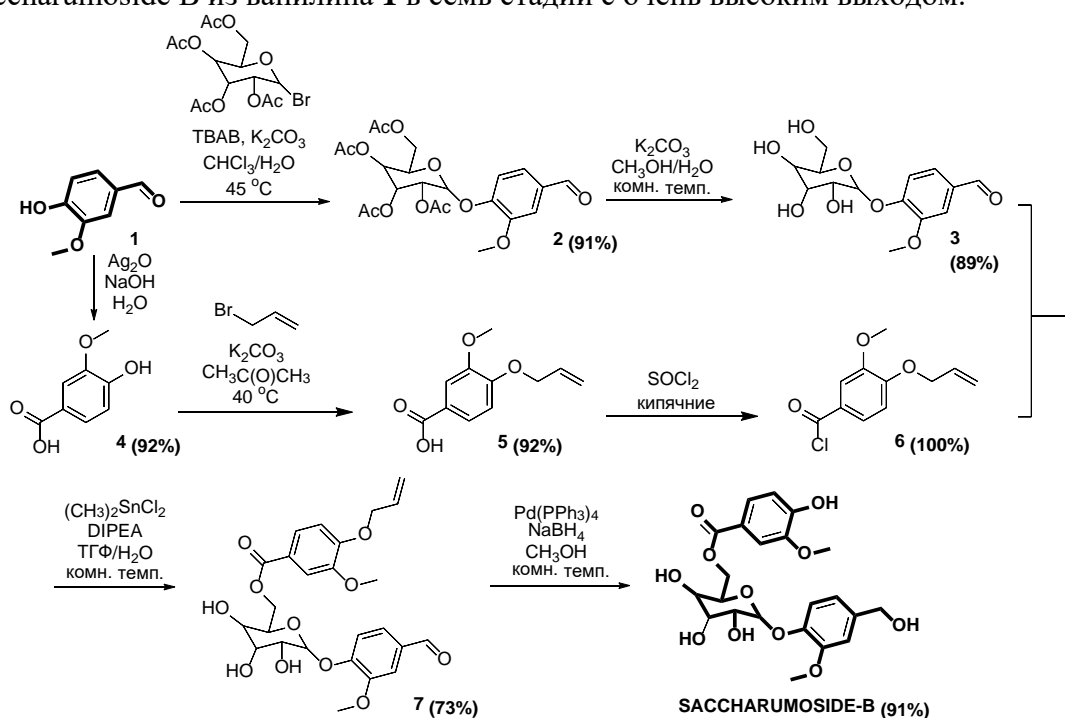
## НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ПРИРОДНОГО СОЕДИНЕНИЯ SACCHARUMOSIDE-B, ОБЛАДАЮЩЕГО ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

М.В. Пугачев, Ю.Г. Штырлин

Научно-образовательный центр фармацевтики КФУ, Казань.

*mpugache@kpfu.ru*

Разработка новых подходов к синтезу биологически активных соединений является одним из основных направлений медицинской химии. Известно, что выделяемый из коры сахарного клена (*Acer saccharum*) saccharumoside B, а также его производные обладают противоопухолевой активностью [1-3] и представляют большой интерес для разработки лекарственных средств. Однако представленный в литературе [2] способ получения saccharumoside B на практике оказался трудновоспроизводимым. Поэтому нами был разработан новый подход, позволяющий получать saccharumoside B из ванилина **1** в семь стадий с очень высоким выходом.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-73.2020.3).

1. T. Yuan, C. Wan, A. González-Sarrías, V. Kandhi, N. Cech, N. Seeram, *J. Nat. Prod.*, 2011, **74**, 2472-2476.
2. S. Rayavarapu, N. Yarla, S. Kadiri, A. Bishayee, S. Vidavalur, R. Tadikonda, M. Basha, V. Pidugu, K. Dowluru, D. Lakappa, M. Kamal, G. Ashraf, V. Tarasov, V. Chubarev, S. Klochkov, G. Barreto, S. Bachurin, G. Aliev, *Sci Rep.*, 2017, 7(8309), 1-14.
3. M.V. Pugachev, M.N. Agafonova, O.A. Bastrikova, O.G. Gnezdilov, T.V. Nikishova, K.V. Balakin, Y.G. Shtyrilin, *Med. Chem. Res.*, 2021, **30**, 1139-1150.

**РАЗРАБОТКА ДИАГНОСТИЧЕСКОГО НАБОРА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
ИММУНОГЛОБУЛИНОВ КЛАССА G И M К КОРОНАВИРУСУ SARS-COV-2 В  
СЫВОРОТКЕ (ПЛАЗМЕ) КРОВИ ЧЕЛОВЕКА МЕТОДОМ  
ИММУНОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

А.М. Ромозанова, Н.Н. Хабипова, Р.Р. Хадиуллина, А.Р. Ибрагимова, Р.Ф. Хайруллин

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия.*

*romozanova.a@gmail.com*

В настоящее время актуальной является задача разработки диагностических тестов для определения антител к коронавирусной инфекции SARS-CoV-2, позволяющих быстро и без применения специального оборудования получать результаты исследования. Нами был разработана иммунохроматографическая тест-система на основе рекомбинантного антигена возбудителя коронавирусной инфекции и ZZ-фрагмента белка A *Staphylococcus aureus*. Аналитическая зона на нитроцеллюлозной мембране была сформирована рекомбинантным рецептор-связывающим доменом (RBD) гликопротеина S1 коронавируса SARS-CoV-2, используемого в качестве антигена. В этой зоне происходило связывание свободных участков иммуноглобулинов входящих в состав иммунного комплекса иммуноглобулинов класса G и M сыворотки (плазмы) крови связанных с конъюгатом наночастиц золота с антигеном. Рекомбинантный ZZ-фрагмент белка A *S. aureus* формировал контрольную линию, в которой происходило связывание с конъюгатом наночастиц золота с контрольным белком. В качестве контрольного белка использовали иммуноглобулины класса G кролика. Была разработана методика получения стабильных конъюгатов золотых начастиц с антигеном и контрольным белком и оптимизированы методики тринзиентной гетерологической экспрессии в культуре клеток эмбриональных почек человека HEK293F и выделения и очистки методом металлохеллатной хроматографии экспрессированного рекомбинантного антигена RBD. Использование RBD в качестве антигена обеспечивает специфичность — при добавлении сыворотки от переболевших коронавирусной инфекцией появлялась полоска на уровне нанесенного RBD белка, при добавлении сыворотки здоровых доноров полоски не было. Результаты предварительных испытаний показали пригодность такой схемы для определения суммарных антител (IgG, IgM) к возбудителю коронавируса.

## **ВЛИЯНИЕ АНТОГОНИСТА NMDA РЕЦЕПТОРОВ МК – 801 НА ФОНОВУЮ АКТИВНОСТЬ ИНТЕРНЕЙРОНОВ ПАРИЕТАЛЬНОГО ГАНГЛИЯ У МОЛЛЮСКА *HELIX LUCORUM***

И.Н. Сагдиев, Х.Л. Гайнутдинов

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*ilyassagdievmail@gmail.com*

**Введение.** Глутамат – наиболее важный возбуждающий нейротрансмиттер в биохимических процессах в нервной системе. Нервный импульс активирует его высвобождение из пресинаптического нейрона. На постсинаптическом нейроне глутамат связывается с постсинаптическими рецепторами, такими, как, например, NMDA-рецепторы, и активирует их. Активация глутаматных рецепторов является одним из механизмов их участия в таких функциях высшей нервной деятельности как обучение и память. Одним из способов воздействия на эту систему служит применение МК-801, который является антагонистом NMDA рецептора глутамата.

**Материалы и методы.** Эксперименты были проведены на моллюске *Helix lucorum*. Перед началом эксперимента все животные содержались не менее двух недель в активном состоянии. На изолированном препарате нервной системы улиток проводились электрофизиологические измерения с применением внутриклеточного микроэлектрода заполненного 2.5 М раствором KCl с сопротивлением 5-15 МОм. Фоновая активность интернейронов левого и правого париеального ганглия регистрировалась в течение 30 минут после введения микроэлектрода в клетку. После регистрации проводился анализ временно-амплитудных характеристик возбуждающих постсинаптических потенциалов (ВПСП), частота их возникновения, наличие потенциалов действия (ПД) и частота их появления. Контрольные животные подвергались инъекциям МК-801.

**Результаты и обсуждение.** В фоновой активности интернейрона ППа3 было выявлено увеличение средней продолжительности ВПСП, а также возникновение ПД и нейрональной активности, схожей с эпилептиформной активностью. Возникновение данного типа активности может быть связано со способностью МК-801 блокировать работу никотинового рецептора ацетилхолина и ингибировать переносчики серотонина и дофамина.



## ВЛИЯНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ИГР НА ПОКАЗАТЕЛИ ВНИМАНИЯ И ПАМЯТИ ЧЕЛОВЕКА

А.Ф. Салихзянова, С.Г. Розенталь

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*salikhzyanovaa@gmail.com*

В современном мире видеоигры являются стремительно развивающейся индустрией. Будущее технологий связывают с дальнейшим развитием игровой индустрии, что приводит к необходимости изучения того, каким образом компьютерные игры влияют на человека, в частности на когнитивные функции. Целью исследования стало изучение влияния компьютерных игр на показатели внимания и памяти человека.

В качестве испытуемых в исследовании приняли участие 30 человек, молодые люди с большим опытом взаимодействия с компьютерными играми. Экспериментальная часть исследования включала в себя воздействие на испытуемых компьютерной игры жанра шутер, испытуемые были поделены на группы в зависимости от продолжительности времени игры: первая группа играла 1 час, вторая 2 часа, третья 3 часа. Для определения изменений показателей внимания и памяти до и после воздействия компьютерными играми были использованы следующие методики: корректурная проба Бурдона для определения концентрации и устойчивости внимания, умственной работоспособности и точности выполнения работы, методика «Числовой квадрат» для определения распределения внимания, методика «Память на образы» для определения объема кратковременной зрительной памяти.

В результатах исследования наблюдалось достоверное увеличение показателей концентрации, устойчивости и распределения внимания у всех групп испытуемых. Достоверные результаты изменений в сторону увеличения работоспособности наблюдались у групп играющих 2 и 3 часа. Однако результаты точности выполнения задания были достоверны только у игроков третьей группы. При исследовании объема кратковременной зрительной памяти на различные образы статистически значимые результаты не выявлены.

Исходя из результатов, был сделан вывод о положительном влиянии компьютерных игр на концентрацию, устойчивость и распределение внимания. Анализ результатов приводит к выводу, что три часа взаимодействия игры является наиболее оптимальным временем для эффективного положительного действия компьютерных игр, что мы видим на примере улучшенных показателей внимания и работоспособности.

## МИКРОБНОЕ СООБЩЕСТВО БЕРЕЗОВОГО СОКА: СОСТАВ И ПРОБИОТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

А.Г. Сабанаева, А.В. Исупова, Т.В. Григорьева, Д.Р. Яруллина

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*agsabanaeva@gmail.com*

Березовый сок издавна считается кладом витаминов, микро- и макроэлементов. В его составе содержатся сахара, органические кислоты, минералы, ферменты, белки и антиоксиданты. Именно поэтому он так популярен в народной медицине и его часто рекомендуют как природный иммуностимулятор. Березовый сок также обладает мочегонным, противовоспалительным и антиоксидантным действием. Благодаря своим бродильным свойствам в березовом соке наблюдается большое количество микроорганизмов, некоторые из которых обладают пробиотическими свойствами. Он является идеальной средой для заселения и роста микроорганизмов ввиду своего богатого и питательного состава. Целью данной работы является определить состав микробного сообщества сока, полученного из Березы повислой (*Betula pendula*), и пробиотический потенциал его отдельных молочнокислых представителей.

Березовый сок был собран в апреле 2021 г. на территории Государственного природного национального парка «Марий Чодра» республики Марий Эл. Состав микробного сообщества березового сока охарактеризован с помощью секвенирования генов 16S рРНК на секвенаторе MiSeq (Illumina) и анализа полученных данных на платформе Vasespace (Illumina). В березовом соке преобладали представители фил *Firmicutes* (55%) и *Proteobacteria* (43%), также присутствовали *Bacteroidetes* (1,9%). Микробное сообщество в основном состояло из родов *Leuconostoc* (37%) и *Clostridium* (17%), а также представителей семейства *Enterobacteriaceae* (42,5%). Из березового сока выделили восемь штаммов микроорганизмов и установили их принадлежность к молочнокислым бактериям (МКБ), согласно ГОСТ 10444.11-2013. Методом агаровых блоков определили, что полученные штаммы имели слабую антагонистическую активность в отношении условно-патогенных бактерий, однако изоляты BS 5 и BS 6 более эффективно подавляли рост *Enterococcus faecalis*, чем референсный пробиотический штамм *Lactiplantibacillus plantarum* 8РАЗ, выделенный из пробиотического препарата «Лактобактерин» («Лактобактерин сухой» (ФГУП НПО «Биомед»). Исследуемые изоляты имели гидрофильную и умеренно гидрофобную поверхность и, как следствие, низкую адгезивность. При этом семь полученных штаммов превосходили по этому параметру референсный штамм *L. plantarum* 8РАЗ.

*Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности КФУ с использованием оборудования МЦКП КФУ для обеспечения клеточных, геномных и постгеномных исследований в Приволжском регионе.*

## СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ $\alpha$ -ГИДРОКСИАЛКИЛ(АРИЛ)ФОСФОНАТОВ

А.Н. Седов, Р.Р. Давлетшин

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Химический институт  
им. А.М. Бутлерова. ул. Кремлевская 18, г. Казань, 420029. Республика Татарстан, Россия.*

*sedandrey1998@gmail.com*

Широкое использование антимикробных препаратов, применение вакцин и антисептиков привело к «насыщению» ими окружающей среды. В настоящее время все возрастающие показатели резистентности являются основной проблемой антибиотикотерапии, которая коснулась как традиционных веществ, так и современных препаратов.

Многие  $\alpha$ -гидроксифосфонаты обладают гербицидными, антибактериальными, противогрибковыми, антиоксидантными, а также противовирусными свойствами. [1,2]. В настоящем исследовании по реакции Абрамова получена широкая серия  $\alpha$ -гидроксиалкил(арил)фосфонатов с целью их последующего модифицирования.

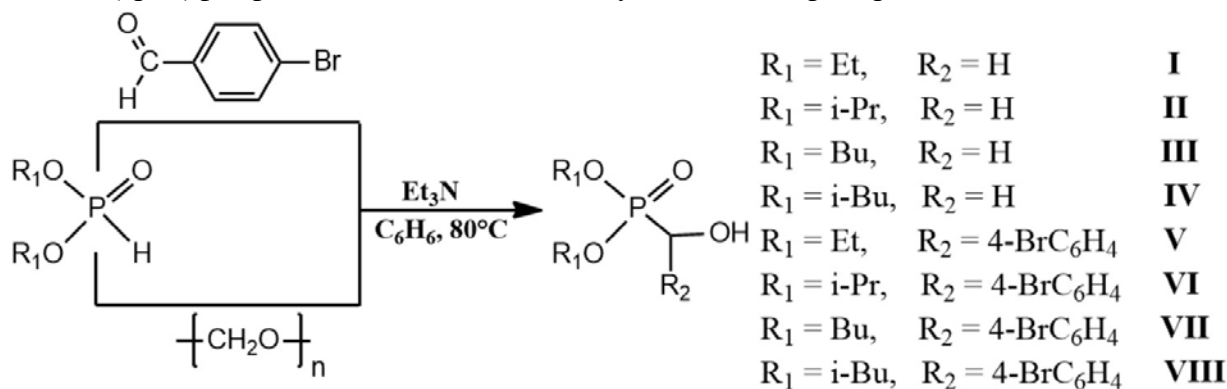


Схема 1. Синтез  $\alpha$ -гидроксиалкилфосфонатов **I-VIII**

Структура полученных соединений подтверждена комбинацией методов ЯМР  $^{31}\text{P}$  и ИК спектроскопией. Установлено, что соединения **I-IV** не обладают противомикробной активностью, в то время как соединения **V-VIII** обладают низкой активностью против бактерий *E. Coli*, *B. cereus*, *Ps. aeruginosa*, *S. Aureus*. Установлено, что соединения **VII** и **VIII** обладают средней антимикробной активностью по отношению к бактерии *B. Cereus*.

В дальнейшем нами планируется провести модификацию  $\alpha$ -гидроксиалкилфосфонатов азотистыми основаниями для получения фосфорилированных производных адефовира-потенциально обладающих биологической активностью.

1. J. Desai, Y. Wang, K. Wang, S. R. Malwal, E. Oldfield ChemMedChem, 2016, **11**, 2205-2215.
2. О. И. Колодяжный, Успехи химии, 2006, **75**, 254-282.

## DEVELOPMENT OF OBTAINING MATERIALS BASED ON CALCIUM PHOSPHATES IN THE PRESENCE OF OPTICALLY ACTIVE SUBSTANCES

T.A. Serykh, V.T. Badretdinova

*ITMO University, Saint-Peterburg*

*Serykh@infochemistry.ru*

Currently, biomimetic materials based on calcium phosphates are used for bone tissue regeneration and replacement. Biomimetic materials or biomimetics are materials that replicate the properties of natural objects. Such materials are biodegradable and could dissolve in the body. When calcium phosphate-based material enters the body, bone tissue is restored by replacing the implant with body tissues.

To develop such materials, it is necessary to know the properties and composition of bone tissue. Bone tissue consists of organic and inorganic parts. The organic part includes cells such as osteoblasts, osteoclasts and osteocytes, and intercellular substance: collagen, non-collagen proteins, etc. Collagen gives bone strength, and non-collagen proteins promote the growth of mineral crystals [1].

The inorganic part includes hydroxyapatite (HA) crystals. It is known that HA-based implants are biocompatible, biologically active, and low-toxic. In addition, HA has the necessary strength, roughness, and porosity. Therefore, the development of biomimetic materials based on calcium phosphates is an urgent task.

The aim of our work is to develop a technology for obtaining and researching materials based on calcium phosphates in the presence of optically active substances.

In the course of the work, a model system was created. After that, the concentration of calcium ions in the obtained samples was determined using an ammonia buffer and black eriochrome ground into powder in a mortar with sodium chloride.

Thus, it was revealed that using the resulting model system, it is possible to produce materials with a gradient concentration of calcium. It was found that the concentration of calcium ions varied from 0.2 mol/l·g to 0.05 mol/l·g.

1. W. Jiang, D. Athanasiadou, S. Zhang, R. Demichelis, K. B. Koziara, P. Raiteri, V. Nelea, W. Mi, J. A. Ma, J. D. Gale, et al., Nat. Commun. 2019, 10, 1

## ПОВЫШЕНИЕ РАСТВОРИМОСТИ ХЛОРНИТРОФЕНОЛА ПУТЁМ ПОЛУЧЕНИЯ ЕГО ТВЁРДЫХ ДИСПЕРСИЙ

С.Ю. Силаева, А.С. Беленова, М.В. Гольшкина, Т.К. Звягинцева

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия.*

*sophiasilaeva@yandex.ru*

Хлорнитрофенол – (2-хлор-4-нитрофенол) – фармацевтическая субстанция, которая применяется при лечении грибковых заболеваний кожи (эпидермофития, трихофития, кандидоз, грибковая экзема), а также микоза наружного слухового прохода. Существенным недостатком хлорнитрофенола является его низкая биодоступность, обусловленная тем, что он практически не растворим в воде (менее 1 г в 10000 л).

Наиболее эффективным для улучшения растворимости плохо и не растворимых веществ на протяжении многих лет (с 1961 г.) считается метод получения твердых дисперсий (ТД). Данная технология не сложна в исполнении, экономична и выгодна, а также универсальна [1, 2].

Были получены твердые дисперсии хлорнитрофенола с полимерами (полиэтиленгликоль-400, полиэтиленгликоль-1500, поливинилпирролидон-10000, метилцеллюлоза, натрий-карбоксиметилцеллюлоза, хитозан) в различных соотношениях. При этом использовались методы удаления растворителя, плавления и замешивания. Применение методов удаления растворителя и сплавления не дали положительных результатов (дисперсии с ними имели тенденцию к снижению растворимости). Полученные дисперсии хлорнитрофенола представляют собой воскообразную непрозрачную или стеклообразную, желтого цвета массу. Установлено, что оптимальным полимером является полиэтиленгликоль-1500 (ПЭГ-1500) в соотношении ЛВ–ПЭГ-1500 1:20 в ТД, при котором увеличение растворимости ЛВ было максимальным (растворимость хлорнитрофенола увеличилась в 1,66 раз).

1. Силаева С.Ю., Беленова А.С., Сливкин А.И., Чупандина Е.Е., Нарышкин С.Р., Краснюк (мл.) И.И., Краснюк И.И. Применение твердых дисперсных систем в фармации. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2020; 22(2): 173-181.

2. Краснюк И.И. (мл.) Влияние твердых дисперсий на растворимость антибиотиков. *Химико-фармацевтический журнал*. 2009; 43(4): 48-50.

## АНТИОКСИДАНТНАЯ ТЕРАПИЯ В ГЕПАТОПРОТЕКЦИИ ПРИ ОСТРОМ ПЕРИТОНИТЕ

И.И. Ситдиков, А.А. Шилов, А.В. Ситдикова, К.И. Левкин, С.Т. Аль-Анбари, Б.А. Федотов, Д.В. Видясов

*ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Медицинский институт, г. Саранск.*

*vudi.95@mail.ru*

**Цель исследования:** Выяснение эффективности эмоксипина и аплегина в гепатопротекции при гнойно-фибринозном перитоните.

**Материалы и методы:** В основу работы положены материалы экспериментальных исследований, проведенных на 18 взрослых беспородных половозрелых собаках, которым моделировали перитонит по способу А.П. Власова (1991), в соответствии с этическими требованиями к работе с экспериментальными животными и одобрения локального этического комитета. Данным группам проводилось исследование ряда функциональных показателей печени, а также в тканях печени содержание диеновых и триеновых конъюгатов, активности фосфолипазы А<sub>2</sub>, супероксиддисмутазы, оценивался спектр фосфолипидов. Исследуемые группы животных разделены на три группы по 6 особей: в первой группе, проводилось определение вышеуказанных параметров, она обозначена контрольной, животным проводили антибактериальную (внутримышечные инъекции 2 раза в сутки раствора гентамицина из расчета 0,8 мг/кг массы животного), инфузионную терапию (внутривенные введения 5% раствора глюкозы и 0,89% раствора хлорида натрия из расчета 50 мл/кг массы животного); во второй – к традиционной терапии подключали аплегин (10 мг/кг), эта группа обозначена как первая опытная (I); в третьей – к традиционной терапии подключали эмоксипин (10 мг/кг), эта группа обозначена как вторая опытная (II).

**Результаты и их обсуждение:** Установлено, что под влиянием аплегина (I) в ткани печени по сравнению с контролем отмечено уменьшение уровня диеновых конъюгатов на 32,6%, триеновых конъюгатов – на 39,4%, малонового диальдегида – на 41,9%. Выявлено снижение активности фосфолипазы А<sub>2</sub> на 38,2% ( $p < 0,05$ ). Под влиянием эмоксипина (II) по сравнению с контролем отмечено уменьшение уровня диеновых конъюгатов на 22,6%, триеновых конъюгатов на – 26,2%, малонового диальдегида – на 27,2 %, снижалась активность фосфолипазы А<sub>2</sub> на 24,9% ( $p < 0,05$ ). На фоне проводимой комплексной терапии восстанавливалось и функциональное состояние печени, о чем свидетельствовало не только снижение активности АЛТ и АСТ, но и меньшие поражения фосфолипидного бислоя мембран клеток органа. Оказалось, что на фоне такого рода терапии отмечены меньшие изменения состава основных мембранообразующих липидов, снижение уровня фракций липидов, обладающих детергентным действием. Мембраностабилизирующая эффективность эмоксипина оказалась существенно выше, чем у аплегина.

**Заключение:** С целью коррекции печеночно-клеточной недостаточности в комплексную терапию гнойно-фибринозного перитонита следует включать препараты, обладающие антиоксидантным действием, в частности аплегин и эмоксипин. В восстановлении функционального состояния мембран гепатоцитов исследуемыми препаратами лежит их способность снижать интенсивность процессов перекисного окисления липидов и фосфолипазную активность тканевых структур органа, особенно выражен этот эффект при применении эмоксипина.

## ЗНАЧЕНИЕ МЕМБРАНОСТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО КОМПОНЕНТА В КОРРЕКЦИИ ЭНТЕРАЛЬНОЙ НЕДОСТАТОЧНОСТИ ПРИ ОСТРОЙ КИШЕЧНОЙ НЕПРОХОДИМОСТИ

Ф.А. Али Фуад, И.И. Ситдиков, А.А. Шилов, А.В. Ситдикова, Б.А. Федотов, Н.В. Осипова

*ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Медицинский институт, г. Саранск.*

*vudi.95@mail.ru*

**Цель исследования:** Выяснение энтепропротекторной эффективности гепатопротектора ремаксол при острой кишечной непроходимости.

**Материалы и методы:** В основу работы положены материалы экспериментальных исследований, проведенных на 24 взрослых беспородных половозрелых собаках обоего пола массой от 8 до 12 кг, которым моделировали острую кишечную непроходимость, осложненную перитонитом по известной и апробированной ранее методике, в соответствии с этическими требованиями к работе с экспериментальными животными и одобрения локального этического комитета. Исследуемые группы животных были разделены на три группы по 8 особей: в первой проводили антибактериальную и инфузионную терапию моделируемого состояния, эта группа обозначена контрольной; во второй – к традиционной терапии подключали ежедневное внутривенное введение ремаксол в дозе 10 мл/кг, эта группа обозначена как первая опытная (I); в третьей – к вышеописанной терапии добавили однократный интестинальный лаваж ремаксолом в дозе 20 мл/кг, эта группа обозначена как вторая опытная (II). Содержание диеновых и триеновых конъюгатов оценивали спектрофотометрическим методом. Уровень малонового диальдегида определяли спектрофотометрическим методом по реакции с тиобарбитуровой кислотой (Sigma). Активность фосфолипазы A<sub>2</sub> оценивали в среде, содержащей 10 ммоль трис-НСl-буфер (pH 8,0), 150 ммоль тритона X-100, 10 ммоль CaCl<sub>2</sub> и 1,2 ммоль субстрата, в качестве которого использовали фосфатидилхолины яичного желтка.

**Результаты и их обсуждение:** При ежедневном внутривенном введении ремаксол в терапии острой кишечной непроходимости (I), отмечалась положительная динамика процессов перекисного окисления липидов, антиоксидантной системы и фосфолипазы A<sub>2</sub>. В ткани тонкой кишки, по сравнению с данными контрольной группы, происходило уменьшение уровня диеновых конъюгатов на 22,58–36,11 %, триеновых – на 18,18–31,23 %, малонового диальдегида – на 41,20–49,10 % (p<0,05). По сравнению с контролем активность фосфолипазы A<sub>2</sub> снижалась на 14,72–34,78 % (p<0,05). В группе, которой проводилась комбинированная ремаксолотерапия (II), отмечалась положительная динамика процессов перекисного окисления липидов, антиоксидантной системы и фосфолипазы A<sub>2</sub>. В ткани тонкой кишки, по сравнению с данными контрольной группы, происходило уменьшение уровня диеновых конъюгатов на 24,19–31,67 %, триеновых – на 19,27–40,20 %, малонового диальдегида – на 48,63–52,01 %. Активность фосфолипазы A<sub>2</sub> снижалась на 23,40–35,48 % (p<0,05).

**Заключение:** В восстановлении функционального состояния кишечника на фоне применения ремаксол лежит его способность снижать интенсивность процессов перекисного окисления липидов и фосфолипазную активность тканевых структур органа (мембраностабилизирующий эффект), особенно при комбинированной терапии: внутривенное введение препарата + интестинальный лаваж.

## ПОЛИМОРФИЗМ ГЕНОВ СИСТЕМЫ ГЕМОСТАЗА ПРИ ТЯЖЕЛОЙ ПРЕЭКЛАМПСИИ

Е.В. Иванова, О.Д. Худайберенова, А.В. Ситдикова, Ю.А. Макарова, О.А. Белова

*ФГБОУ ВО "МГУ им. Н.П. Огарёва", г. Саранск, Россия.*

*vlasova-t.i@mrsu.ru*

**Цель исследования:** определить полиморфизм генов системы гемостаза ITGB3 (T1565C), ITGA2 (C807T) в ассоциации с гиперкоагулемическими явлениями со степенью тяжести преэклампсии (ПЭ).

**Материалы и методы:** Проведен анализ исходной клинической картины, особенностей течения беременности у 173 пациенток, наблюдавшихся и родоразрешенных в отделениях перинатального центра ГБУЗ Республики Мордовия «МРЦКБ». В соответствии с целью и задачами исследования все беременные были разделены на 3 группы. I группу составили 63 пациентки с умеренной ПЭ. II группу – 58 беременных с тяжелой ПЭ. III группу (контроль) составили 52 беременных с физиологическим течением процесса гестации. Генотипирование генов интегрин бета-3 ITGB3 (T1565C), интегрин альфа-2 ITGA2 (C807T) методом Real-time ПЦР с помощью CFX96 Touch™ Real-Time PCR Detection System (США). Статистическая обработка данных: сайт «ген эксперт» ([http://gen-exp.ru/calculator\\_or.php](http://gen-exp.ru/calculator_or.php)), программа «Statistica 7.0».

**Результаты и их обсуждение:** Распределение частот генотипов гена ITGB3 (T1565C) выглядело следующим образом: T/T в I группе – 27 (42,9%), II группе – 12 (20,7%), III группе – 38 (73,1%); T/C в I группе – 22 (34,9%), II группе – 19 (32,8%), III группе – 10 (19,2%); C/C в I группе – 14 (22,2%), II группе – 27 (46,5%), III группе – 4 (7,7%). Распределение частот генотипов гена ITGA2 (C807T) выглядело следующим образом: C/C в I группе – 35 (55,5%), II группе – 12 (20,7%), III группе – 43 (82,7%); C/T в I группе – 17 (27,0%), II группе – 26 (44,8%), III группе – 8 (15,4%); T/T в I группе – 11 (17,5%), II группе – 20 (34,5%), III группе – 1 (1,9%).

**Заключение:** у беременных при тяжелой преэклампсии частота встречаемости патологических аллелей генов системы гемостаза на 23,2-25,9 % ( $p<0,05$ ) выше, чем при умеренной и на 45,6-47,3 % ( $p<0,05$ ) выше, чем у женщин с физиологическим течением беременности. При утяжелении патологии в выборках пациенток регистрировалось увеличение частоты встречаемости патологических аллелей генов интегринов.



## ОЦЕНКА КОГНИТИВНЫХ ФУНКЦИЙ КРЫСЯТ, РОЖДЕННЫХ ОТ САМОК С ПРЕНАТАЛЬНОЙ ГИПЕРГОМОЦИСТЕИНЕМИЕЙ

В.В. Скрипникова, К.С. Богатова

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия.*

*skripnikova.vika99@mail.ru*

Гомоцистеин – это серосодержащая аминокислота, метаболизм которой связан с обменом метионина и цистеина в организме [1]. Гипергомоцистеинемия (ГГЦ) – заболевание, характеризующееся высоким уровнем (выше 15 мкмоль/л) гомоцистеина в крови, связанное с нарушением обмена аминокислот [2]. ГГЦ приводит к повреждению эндотелиальных клеток сосудов и возникновению тромбозов, во время беременности вызывает отклонения в развитии нервной системы плода [3]. Целью исследования было изучить способность к обучению, кратковременную и долговременную память у крысят, полученных от самок с пренатальной гипергомоцистеинемией.

Было сформировано 2 группы крыс: 1) контрольная группа (n=53); 2) гомоцистеиновая F2 (ГгцF2) группа – крысята (n=60) от самок с пренатальной ГГЦ. Исследование когнитивных способностей крысят проводилось на 21-22 дни жизни с помощью теста «Водный лабиринт Морриса». Обучение проводили в 6 подходов с перерывом 15 секунд между каждым. Через 1 и 24 часа после обучения проводилась проверка запоминания положения платформы.

Результаты показали, что к концу обучения время поиска платформы в обеих группах снизилось: у контроля – с 24.6±3.1 сек. (1 подход) до 5.7±0.9 сек. (6 подход), у ГгцF2 – с 31.9±2.6 сек. до 12.3±1.2 сек. Однако процент обучаемости в ГгцF2 группе (81%) был ниже контроля (95%). Анализ траекторий плавания показал, что у обеих групп в начале обучения наблюдались некогнитивные стратегии поиска, которые у контроля менялись на более выгодные, а у ГгцF2 сохранялись даже к концу обучения. Это говорит о нормальном функционировании кратковременной памяти, но плохой обучаемости животных группы ГгцF2.

В процессе проверки запоминания расположения платформы выявили, что крысятам группы ГгцF2 требовалось больше времени на поиск через 1 час (11±1.0 сек.) и через 24 часа (17.8±1.8 сек.), в отличие от контрольных животных (9.5±1.2 сек. и 14.6±1.7 сек.). Процент крыс, помнивших расположение платформы, был ниже для ГгцF2 – 48% и 40%, чем для животных контрольной группы – 89% и 78%, через 1 час и 24 часа соответственно.

Таким образом, можно сделать вывод, что пренатальная гипергомоцистеинемия способствует задержке в созревании головного мозга, в результате чего у животных значительно ухудшается способность хранить и воспроизводить информацию, полученную в процессе обучения.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания №0671-2020-0059.*

1. Ю.Э. Доброхотова с соавт. *РЖМ*, 2005, **17**, 1110.
2. Y. Fu et al. *Br. J. Pharmacol*, 2018, **175**, 1173-1189.
3. O.V. Yakovleva et al. *Oxid. Med. Cell. Longev*, 2018, **2018**, 1-13.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С МОДЕЛЬНЫМИ БИОЛОГИЧЕСКИМИ МЕМБРАНАМИ АНТИТРОМБОТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ В РАСТВОРЕ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

А.Ф. Тимерова<sup>а</sup>, В.В. Клочков<sup>а</sup>, Л.Е. Никитина<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт физики КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Медико-биологический факультет КГМУ, Казань.*

*aizirya96@bk.ru*

Артериальный тромбоз является наиболее важным фактором, ведущим к артериальным сердечно-сосудистым заболеваниям. Такие болезни являются причиной повышенной смертности во всем мире [1]. Одним из основных факторов, приводящих к образованию тромба, являются изменения в фосфолипидных мембранах тромбоцитов, что приводит к разрыхлению и увеличению текучести мембран. Предполагается, что действие терпеноидов связано с их способностью «латать дыры» в мембранах путем погружения гидрофобной части молекулы в мембрану. Спектроскопия ЯМР является одним из наиболее мощных инструментов, позволяющих устанавливать пространственную структуру соединений, что и необходимо знать при разработке медикаментов. Терпеноиды имеют широкий спектр биологического действия и поэтому представляют большой интерес для поиска новых лекарственных препаратов.

Целью работы было установление особенностей взаимодействия трех монотерпеноидов (миртеноловые эфир, сульфид и амин) с моделью клеточной мембраны на основе данных ряда двумерных ЯМР экспериментов:  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HSQC,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMBC,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOESY и DOSY в изотропном растворе и в растворе, содержащем додецилфосфохолин (ДФХ) в качестве модели биологической мембраны. ДФХ имеет ту же головную группу, что и фосфатидилхолин, и может использоваться в качестве простой модели для мембран эукариот [2]. Исследуемые соединения впервые синтезированы в КГМУ группой под руководством Никитиной Л.Е. Для выяснения механизма комплексообразования между исследуемыми соединениями и мицеллой ДФХ были проведены 2D NOESY ЯМР эксперименты [3]. Проверка образования комплекса проводилась с помощью DOSY ЯМР экспериментов [3].

Таким образом, на основе анализа данных DOSY и двумерной  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOESY спектроскопии ЯМР изучено комплексообразование трех миртеноловых монотерпеноидов с мицеллой на основе ДФХ. Было установлено, что миртеноловый сульфид может быть наиболее перспективным для дальнейших исследований на биологическую активность, так как он встраивается внутрь мицеллы на основе додецилфосфохолина, то есть образует устойчивый комплекс с модельной мембраной.

1. J.A. Finegold, P. Asaria, D.P. Fransis. Mortality from ischaemic heart disease by country, region, and age: Statistics from World Health Organization and United Nations. *Int. J. of Cardiology*, 2013, №168, 934-945.
2. D.A. Kallik, M.R. Tessmer, C.R. Watts, C.-Y. Li. The use of dodecylphosphocholine micelles in solution NMR. *J. Magn. Reson.*, 1995, V. 109, P. 60-65.
3. L.E. Nikitina, A.F. Timerova, Klochkov et al. Structural details on the interaction of biologically active sulfur-containing monoterpenoids with lipid membranes. *J. Mol. Liq.*, 2020, V. 301, P. 13.

## МЕЖБАКТЕРИАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МНОГОВИДОВЫХ БИОПЛЕНКАХ В УСЛОВИЯХ АНТИМИКРОБНОЙ ТЕРАПИИ IN VITRO

Е.Ю. Тризна, А.В. Миронова, А.В. Каримова, М.С. Федорова, А.Р. Каюмов

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*trizna91@mail.ru*

Одной из причин появления толерантности к антимикробным препаратам у бактерий является их способность к образованию биопленок. В последнее время показано, что бактерии в окружающей среде существуют в виде многовидовых сообществ. В подобных сообществах чувствительность бактерий к антимикробным препаратам изменяется в зависимости от межбактериальных взаимодействий – синергизма или антагонизма. Кроме того, в полимикробных сообществах происходит значительное изменение состава внеклеточного матрикса по сравнению с мономикробными сообществами, в следствии чего может изменяться его проницаемость для противомикробных агентов. Таким образом, анализ внеклеточного матрикса и исследование межбактериальных взаимодействий в многовидовых сообществах может способствовать разработке наиболее эффективных подходов антимикробной терапии инфекций, ассоциированных с полимикробными биопленками.

Путем совместного культивирования были получены модели смешанных биопленок *S.aureus-P.aeruginosa*, *S.aureus-K.pneumoniae*, в которых оба вида бактерий сохраняли жизнеспособность. В случае обработки смешанных биопленок антибиотиками узкого спектра действия, проявляющими активность только в отношении стафилококка, наблюдалось повышение его устойчивости по сравнению с мономикробными биопленками того же вида. Внесение антибиотиков широкого спектра действия напротив, приводило к повышению чувствительности обоих штаммов, входящих в состав смешанной биопленки. При высоких концентрациях антибиотиков в полимикробной биопленке наблюдалась гибель как стафилококка, так и грамотрицательных бактерий, в то время как в мономикробных биопленках этих же видов в присутствии высоких концентраций амикацина и цiproфлоксацина жизнеспособность бактерий снижалась лишь на 2-3 порядка по логарифмической шкале. Вероятно, данный эффект обусловлен синтезом факторов антагонизма бактерий в условиях антимикробной терапии. Чтобы проверить данный эффект получали бесклеточную культуральную жидкость золотистого стафилококка и вносили к сформированным биопленкам *P. aeruginosa* и *K. pneumoniae* в комплексе с антибиотиками широкого спектра действия. При этом было показано значительное снижение жизнеспособности *P. aeruginosa* в составе биопленок и гибель при высоких концентрациях антибиотиков. Клетки в составе биопленки *K. pneumoniae* были менее чувствительны к воздействию культуральной жидкости и антибиотиков. Возможно показанное повышение чувствительности бактерий в смешанных культурах было связано с изменением проницаемости внеклеточного матрикса смешанного сообщества для антибактериальных препаратов.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (№ МК-3052.2021.1.4) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-04-00247).*

## СИСТЕМА ДЛЯ ПОИСКА И ОПТИМИЗАЦИИ ИНГИБИТОРОВ БИОСИНТЕЗА БЕЛКА У *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* НА ОСНОВЕ БЕСКЛЕТОЧНЫХ СИСТЕМ ТРАНСЛЯЦИИ И МЕТОДОВ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

К.С. Усачев<sup>a,b,c</sup>, Ш.З. Валидов<sup>a,b</sup>, Е.С. Кучаев<sup>b</sup>, А.А. Голубев<sup>a,b</sup>, М.М. Юсупов<sup>a,b,d</sup>

<sup>a</sup> ФИЦ «Казанский научный центр Российской академии наук», Казань;

<sup>b</sup> Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань;

<sup>c</sup> Институт физики КФУ, Казань;

<sup>d</sup> Институт генетики, молекулярной и клеточной биологии, Страсбург, Франция.

*k.usachev@knc.ru*

Распространение штаммов высоковирулентных и устойчивых к антибиотикам бактериальных патогенов, таких как *Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* и *Enterobacter* диктует необходимость поиска новых антибиотиков. Одной из наиболее продуктивных систем для высокопроизводительного скрининга новых химических соединений, проявляющих антимикробную активность, являются бесклеточные системы трансляции. После того, как для нового соединения показано, что в основе его действия лежит механизм ингибирования синтеза белка, необходимо установление пространственной структуры комплекса данного антибиотика с молекулой-мишенью. Свыше 40% существующих коммерческих антибиотиков ингибируют работу рибосомы. В рамках данной работы была разработана бесклеточная система трансляции патогенной бактерии *S. aureus*, что в совокупности с установленной с высоким разрешением методом крио-электронной микроскопии структуры рибосом *Staphylococcus aureus* открывает возможности для разработки и скрининга новых антистафилококковых препаратов [1-2].

*Исследования выполнены за счёт государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН*

1. A. Golubev, B. Fatkhullin, I. Khusainov, L. Jenner, A. Gabdulkhakov, Sh. Validov, G. Yusupova, M. Yusupov, K. Usachev. *FEBS Letters*, 2014, **594**, 3551-3567.

2. I. Khusainov, B. Fatkhullin, S. Pellegrino, A. Bikmullin, Sh. Validov, W. Liu, A. Gabdulkhakov, A. Al Shebel, A. Golubev, D. Zeyer, N. Trachtmann, G.A. Sprenger, Sh. Validov, K. Usachev, G. Yusupova, M. Yusupov. *Nature communications*, 2020, **11**, 1656.

## АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЕ ДЕЙСТВИЕ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ МЕТАБОЛИТОВ *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* В ОТНОШЕНИИ КЛЕТОК *PSEUDOMONAS AERUGINOSA*

М.С. Федорова, А.В. Миронова, Е.Ю. Тризна, А.Р. Каюмов

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань, ул.Кремлевская, 18.*

*MaSFedorova97@mail.ru*

Быстрое развитие антибиотикорезистентности связано с активным использованием антимикробных препаратов во всем мире в связи с распространением коронавирусной инфекции. Одним из механизмов бактериальной устойчивости к антибиотикам служит их способность к образованию биопленок. *Staphylococcus aureus* и *Pseudomonas aeruginosa* - одни из самых распространенных патогенов, способные проявлять взаимодействия как синергического, так и антагонистического характера при образовании смешанных биопленок. Ранее нами было показано, что добавление культуральной жидкости *S. aureus* подавляет жизнеспособность *P. aeruginosa*. Поэтому целью данной работы было выделить фракцию внеклеточных метаболитов *S. aureus*, активных в отношении клеток *P. aeruginosa*.

Нами показано, что внесение культуральной жидкости *S. aureus* приводило к гибели открепившихся клеток *P. aeruginosa* при разбавлении культуральной жидкости в 2 раза, а клеток в биопленке - при разбавлении КЖ в 4 раза. Так как у грам-положительных бактерий чаще всего секретируются антимикробные пептиды, подбирали оптимальные условия pH и температур для их выделения. В условиях повышенных температур (60°) наблюдалось снижение активности, закисление среды (pH3) не влияло на активность. Так как бактериоцины часто сорбируются на клетках, проводили их десорбцию с клеток *S. aureus* в глициновом буфере (25мМ pH 2.5). Для извлечения целевых метаболитов из полученных проб отмытых клеток и культуральной жидкости, проводили ступенчатую твердофазную экстракцию с дальнейшей лиофильной сушкой. В результате наибольшая антимикробная активность наблюдалась при элюции 40%-ным раствором ацетонитрила. Ультрафильтрация проб на PES-мембранах с отсечкой 3 и 10 кДа показала, что метаболиты находятся в диапазоне до 3 кДа.

Дальнейшие исследования будут направлены на идентификацию данных метаболитов.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (№20-64-47014).*

## ДИЗАЙН ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ОДИН КАРБОКСИЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

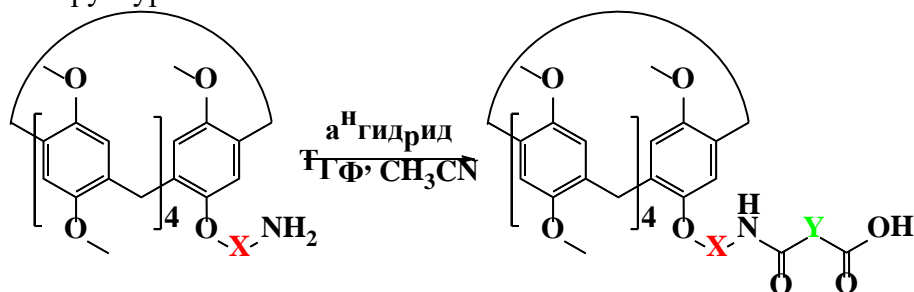
Д.А. Филимонова, А.А. Назарова, Л.С. Якимова, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*filimon.darya@gmail.com*

Псевдоротаксаны, не только как супрамолекулярные предшественники ротаксанов и катенанов, но и прототипы простых молекулярных машин, вызывают большой исследовательский интерес, направленный на изучение их функций. Эта непрерывно развивающаяся область подтолкнула ученых к поиску новых макроциклических хозяев и гостей для создания супрамолекулярных архитектур. Уникальной макроциклической платформой для синтеза псевдоротаксанов и ротаксанов оказались пиллар[*n*]арены, открытые в 2008 году. Одним из важнейших свойств пиллар[5]аренов является возможность их позиционно-селективной функционализации, что придает им многообразие свойств, таких как образование различных типов архитектур (комплексы самовключения, супрамолекулярные полимеры и т. д.). Интерес к монофункционализированным пиллар[5]аренам обусловлен способностью данных макроциклов к самосборке и самоорганизации, что делает их привлекательным для создания новых молекулярных рецепторных систем.

В рамках исследовательской работы был синтезирован ряд новых монозамещённых пиллар[5]аренов, содержащих карбоксильные группы. Структура полученных соединений подтверждена комплексом физических методов ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК-спектроскопией, масс-спектрометрией (МАЛДИ), а состав – элементным анализом. Полученные макроциклы являются хорошими кандидатами для связывания различных молекул «гостей», а также для получения псевдоротаксановых структур.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №20-03-00816 а).*

## СОЗДАНИЕ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ НАНОРЕАКТОРОВ ДЛЯ ДЕТОКСИКАЦИИ ПЕСТИЦИДА ПАРАОКСОН

З.М. Шайхутдинова<sup>a,b</sup>, Д.Н. Шамбазова<sup>a</sup>, Д.А. Татаринов<sup>b</sup>, А.В. Богданов<sup>a,b</sup>,  
Т.Н. Паширова<sup>a,b</sup>, П. Массон<sup>a</sup>

<sup>a</sup> НИЛ *OpenLab* Нейрофармакологии ИФМиБ КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань.

*shajhutdinova.z@mail.ru*

Нанореакторный подход с включением инкапсулированных ферментных композиций показал эффективность в лечении рака, воспалительных процессов, детоксикации лекарств, коррекции метаболических и генетических дефектов. В отличие от простых коллоидных носителей биокаталитические нанореакторы представляют собой компартменты, способные выполнять определенные функции во внутри- или межклеточной среде [1]. Данный подход не был реализован в лечении/детоксикации при отравлении пестицидами. Целью данной работы является создание нанореакторов, содержащих ферменты - фосфотриэстеразы бактериального происхождения (ФТЭ) для детоксикации параоксона (пестицид). Мутанты ФТЭ термофильных архей *Sulfolobus solfataricus* проявили высокую эффективность в отношении фосфорорганических соединений [2]. Для построения нанореакторов использовались полимерсомы, полученные в результате самосборки амфифильных блок-сополимеров на основе полиэтиленгликоля и пропиленсульфида с варьированием молекулярных масс, концентрации (0.1-2% масс.) и параметров их упаковки. Методом динамического рассеяния света и просвечивающей электронной микроскопии установлено, что размер нанореакторов составляет от 70 до 100 нм, индекс полидисперсности - 0.1. Дзета-потенциал нанореакторов увеличивается с ростом концентрации блок-сополимеров от  $-11 \pm 1$  (0.1 % масс) до  $-25 \pm 1$  мВ (1% масс.). В результате *in vitro* симуляции в условиях реакции второго порядка наблюдалась инактивация параоксона менее чем за 10 секунд, как с свободной, так и инкапсулированной ФТЭ в нанореакторы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 20-14-00155.*

1. T.N. Pashirova, A.V. Bogdanov, P. Masson, *Chem.-Biolog. Interact.*, 2021, **346**, 109577
2. L. Poirier, P. Jacquet, L. Plener, P. Masson, et al., *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2021, **28**, 25081-25106.

## ПОЛИОЛМЕТАНОФУЛЛЕРЕН $C_{60}[C_9H_{10}O_4(OH)_4]_6$ – ЭФФЕКТИВНЫЙ АНТИОКСИДАНТ ПРИ ПАТОЛОГИЯХ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ОКИСЛИТЕЛЬНЫМ СТРЕССОМ

Г.Р. Шарапова, Г.Р. Тарасова, Н.В. Калачева

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*s.g.raifovna@yandex.ru*

Объект наших исследований – водорастворимое производное фуллерена  $C_{60}$  - полиолметанофуллерен  $C_{60}[C_9H_{10}O_4(OH)_4]_6$ . Нами было открыто, что это соединение обладает свойствами мягкого разобщителя дыхания и фосфорилирования [1]. В настоящей работе мы впервые продемонстрировали, что наряду со способностью снижать митохондриальный потенциал ( $\Delta\Psi_m$ ) и, следовательно, уменьшать генерацию митохондриальных активных форм кислорода (митАФК), полиолметанофуллерен сохраняет антирадикальные свойства нативного фуллерена. В реакции образования супероксидного радикала с НАДН/метосульфат феназином полиолметанофуллерен концентрационно-зависимо снижал уровень супероксид анионов.

Нами была изучена способность полиолметанофуллерена сокращать избыточное количество АФК в нейтрофилах в условиях индуцированного окислительного стресса. Нейтрофилы активировали, добавляя бактерии *Ser. marcescens* в цельную кровь здоровых доноров-добровольцев. Ранее считалось, что основной пул АФК в нейтрофилах генерируется ферментативным комплексом НАДФН-оксидазы. Однако недавно было обнаружено, что митАФК одинаково важны для их функционирования. Поэтому наряду с АФК мы оценивали  $\Delta\Psi_m$  в клетках. Активация нейтрофилов сопровождалась усилением генерации ими АФК и повышением  $\Delta\Psi_m$ . Полиолметанофуллерен уменьшал  $\Delta\Psi_m$  и концентрационно-зависимо снижал избыток АФК, продуцируемых нейтрофилами, до базального уровня. Полученные результаты обосновывают дальнейшее изучение полиолметанофуллерена  $C_{60}[C_9H_{10}O_4(OH)_4]_6$  как перспективного антиоксиданта при тяжелых патологиях, обусловленных окислительным стрессом.

1. N. Kalacheva et al., *Bioorg Med Chem Lett.*, 2018, **28**,1097-1100.



## АЛАНТОЛАКТОН В РЕАКЦИИ С Р–Н-ФОСФОНИЕВЫМИ СОЛЯМИ

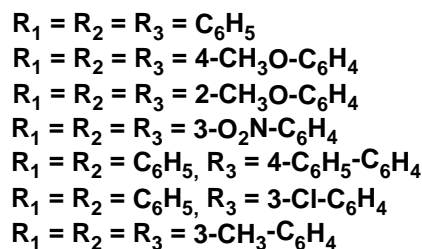
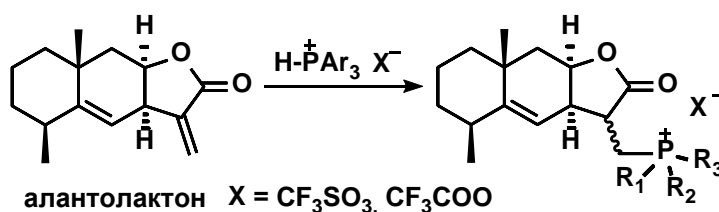
М.Э. Шемахина<sup>a,b</sup>, А.В. Немтарев<sup>a,b</sup>, С.Г. Клочков<sup>c</sup>, В.Ф. Миронов<sup>a,b</sup><sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;<sup>b</sup> ИОФХ им. А.Е.Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань;<sup>c</sup> Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка.

masha-shem@mail.ru

Алантолактон – сесквитерпеновый лактон ряда эудесмана, привлекающий внимание исследователей в связи с наличием широкого спектра биологической активности: противовоспалительной, антибактериальной, противоопухолевой и др. Исследования показали, что алантолактон способен индуцировать апоптоз, подавлять рост, пролиферацию и метастазирование раковых клеток [1].

Направленная модификация структуры активных молекул трифенилфосфониевым фрагментом является широко используемым подходом для их таргетной доставки в митохондрии [2]. Одним из распространенных способов введения фосфониевого фрагмента является непосредственная химическая модификация функциональных групп целевых молекул производными Р(III) или Р(V). Ранее этот подход был реализован на примере циклических монотерпеноидов, содержащих непрелдельный α,β-кетонный фрагмент [3].

В данной работе представлен экспериментальный материал по реакции алантолактона с Р–Н-фосфониевыми солями. Показано, что реакция проходит при комнатной температуре, приводя к образованию четвертичных триарилфосониевых солей.



1. G. Babaei, S.G. Aziz, M.R. Bazl, M.H.K. Ansari. *Biomed. Pharmacother.*, 2021, **136**, 111231.
2. J. Zielonka, J. Joseph, A. Sikora, M. Hardy, O. Ouari, J. Vasquez-Vivar, G. Cheng, M. Lopez, B. Kalyanaraman. *Chem. Rev.*, 2017, **117(15)**, 10043-10120.
3. М.Е. Шемахина, А.В. Немтарев, Р.Р. Файзуллин, Н.Р. Хасиятуллина, Л.Р. Григор'ева, В.Ф. Миронов. *Mendeleev Commun.*, 2020, **30 (6)**, 700-702.

## СИНТЕЗ 5'-ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛУРИДИНА

А.В. Шепелина<sup>a</sup>, Д.А. Татаринов<sup>a,b</sup>, И.Ю. Стробыкина<sup>b</sup>, О.В. Андреева<sup>b</sup>, М.Г. Беленок<sup>b</sup>,  
Б.Ф. Гарифуллин<sup>b</sup>, В.Е. Катаев<sup>b</sup>

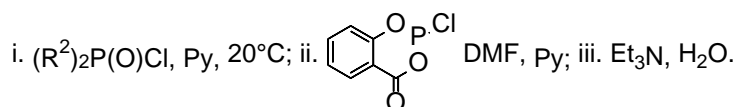
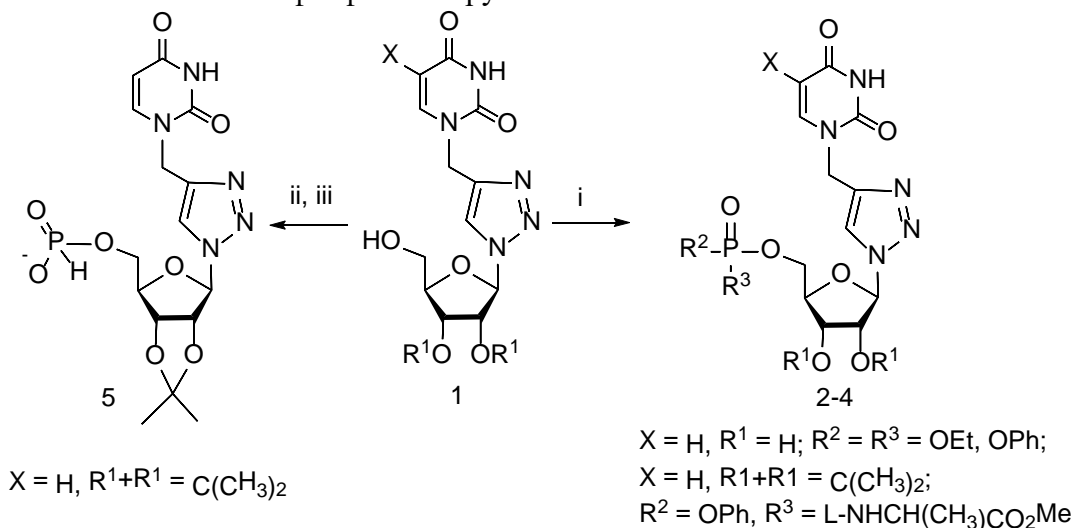
<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия;

<sup>b</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.

anya.s00@mail.ru

Нуклеотиды, такие как 5'-моно и полифосфорилированные нуклеозиды и их различные производные и конъюгаты играют ключевую роль в биологических системах. [1] Синтетические нуклеотиды являются перспективным и интенсивно исследуемым классом органических соединений, проявляющих широкий спектр биологической активности, включая противовирусную и антимикробную. [1]

В данной работе представлен синтез новых 5'-фосфорилированных производных 1,2,3-триазолилуридина, содержащих при атоме фосфора алкильные и ароматические заместители, а также фрагменты аминокислот и фосфитные группы.



Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение № 075-15-2020-777).

1. B. Roy, A. Depaix, C. Périgaud and S. Peyrottes, *Chem. Rev.*, 2016, **116**, 7854–7897.

## БЕНЗО- И НАФТОХИНОНЫ В СИНТЕЗЕ ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫХ ФОСФОНИЕВЫХ И АРСОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

А.М. Шинкарева<sup>a</sup>, Н.Р. Хасиятуллина<sup>b</sup>, А.В. Немтарев<sup>a,b</sup>, В.Ф. Миронов<sup>a,b</sup>

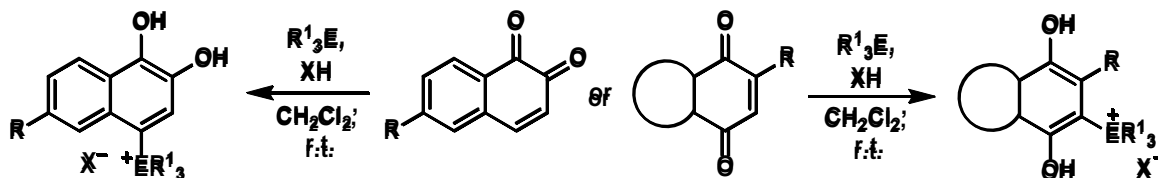
<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН.

5-ht2ab@mail.ru

Хиноны широко распространены в природе и часто используются для синтеза новых соединений с потенциальной фармакологической активностью. На данный момент хиноны активно применяются при разработке противоопухолевых, антибактериальных, противогрибковых, противовирусных и противомаларийных средств [1].

Ранее нами был предложен эффективный подход к синтезу полифункциональных четвертичных фосфониевых солей на основе производных *орто*- и *пара*-хинонов [2]. По данному методу был успешно получен ряд аналогичных соединений мышьяка. Разработанный метод отличается одностадийностью, мягкими условиями проведения синтеза и высокими выходами целевых соединений.



Для некоторых из полученных соединений была оценена антимикробная, гемолитическая и цитотоксическая активность в отношении нормальных и опухолевых клеточных линий человека *in vitro*. Некоторые из протестированных соединений показали умеренную антимикробную активность наряду с низкой гемолитической активностью [2, 3].

1. Zhang, L., Zhang, G., Xu, S., Song, Y. *Eur. J. Med. Chem.*, 2021, **223**, 113632.
2. Khasiyatullina, N.R. et al. *Mendeleev Commun.*, 2017, **27(2)**, 134–136.
3. Khasiyatullina N.R., Mironov V.F., Voloshina A.D., Sapunova A.S. *Chem. Biodiv.*, 2019, **16(5)**, e1900039.

## **СЕКЦИЯ 2 БИОТЕХНОЛОГИЯ 21 ВЕКА**

## ГИДРОЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ЭНДОФИТНЫХ БАКТЕРИЙ КАРТОФЕЛЯ

А.А. Туама, Н.С. Карамова

*Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань.*

*ammartuama02@gmail.com*

В настоящее время все большее внимание уделяется разработке препаратов биологического происхождения, основой которых являются микроорганизмы, способные оказывать благоприятное воздействие на культурные растения. Главными преимуществами данных препаратов является их позитивное комплексное действие, высокая эффективность и, главным образом, легкая утилизация, отсутствие накопления в окружающей среде [1]. Одним из современных направлений биотехнологий в области растениеводства является изучение свойств и возможности использования эндофитных микроорганизмов для биоконтроля патогенов сельскохозяйственных культур [2]. Известно, что существенный вклад в антагонистический потенциал эндофитов в отношении фитопатогенов вносят синтезируемые ими гидролитические ферменты.

Целью настоящего исследования явилась оценка способности эндофитных бактерий картофеля продуцировать внеклеточные гидролазы.

В работе были использованы 6 изолятов эндофитных бактерий, выделенных из клубней семенного картофеля (коллекция ТатНИИСХ, Республика Татарстан). Гидролитическую активность изолятов оценивали при их росте на разных питательных средах, содержащих следующие субстраты для разных ферментов: казеин, желатин, твин-80, крахмал, карбоксиметилцеллюлоза, пектин.

Установлено, что большинство исследуемых эндофитных изолятов продуцируют несколько гидролитических ферментов: целлюлазу, пектиназу, липазу, протеазу. Изоляты 4.1 и 17.1 показали способность метаболизировать все вышеперечисленные субстраты, что обуславливает их преимущество перед фитопатогенами в конкурентной борьбе с за питательные вещества.

1. К. Д. Дятлова. *Сорос. образов. журнал*, 2001, **7**, 17.

2. В.К. Чеботарь, А.В. Щербаков, Е.Н. Щербакова и др. *Сельскохозяйственная биология*, 2015, **50**, 648-654.

## ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОГО СЫРЬЯ – МУХИ ЧЕРНАЯ ЛЬВИНКА (*HERMETIA ILLUCENS*)

К.Р. Атнабаева<sup>a</sup>, А.А. Володин<sup>a</sup>, М.С. Талан<sup>b</sup>, Г.А. Ивкова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия;*

<sup>b</sup> *Казанский национальный исследовательский технологический университет (ФГБОУ ВО «КНИТУ»), Казань, Россия.*

*Gulnara.Ivkova@mail.ru*

Биотехнология - перспективное направление современной науки, изучающие возможности использования живых организмов для решения технологических задач. Представляем результаты поискового исследования по возможностям применения в качестве биологического сырья американской мухи – Черная львинка (*Hermetia illucens*).

Нами выделены неполярные фракции экстрактивных веществ из двух различных временных выборок стадий развития личинок. Применение экстракционного метода даёт возможность многократного использования растворителей и привлекает простотой технологического исполнения. Методом высокоэффективной жидкостной хроматографии проведен анализ экстрактов, выделенных из биоматериала органическими растворителями различной природы - с использованием как неполярных углеводородов (гексана, петролейного эфира, уайт-спирита), полярных растворителей (спиртов, хлороформа), так и смеси растворителей (например, хлороформ-метанол). Проведено сравнение полученных образцов.

Вторым этапом нашей работы было исследование возможности получения хитозан-меланинового комплекса из кутикул личинок американской мухи – Черная львинка (*Hermetia illucens*). Интерес к этому направлению объясняется уникальными физическими, химическими и биологическими свойствами, а также низкой токсичности природных полимерных материалов на основе хитина и его дезацетилированного производного – хитозана. Проведена реакция бензальдегида с хитозаном.

*Работы выполнены за счёт средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (номер проекта 0671-2020-0063).*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОЛЛАГЕНАЗЫ, СВОБОДНОЙ И ИММОБИЛИЗОВАННОЙ НА МАТРИЦЕ ХИТОЗАНА

Т.Н. Беляева<sup>a</sup>, В.А. Королева<sup>a,b</sup>, М.Г. Холявка<sup>a</sup>, В.Г. Артюхов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж;

<sup>b</sup> Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко, Воронеж.

*t.shelomentseva@yandex.ru*

Гидролитические ферменты находят широкое применение в различных сферах человеческой деятельности, в том числе в пищевой промышленности. Одной из перспективных в данной области протеаз является коллагеназа. Этот фермент обладает высокой специфичностью к фибриллярному белку коллагену, входящему в состав соединительных тканей, что обуславливает его использование в мясной и рыбной промышленности. Пивоварение является ещё одной отраслью, в которой успешно применяется коллагеназа [1].

Активность ферментов находится в жёсткой зависимости от физико-химических параметров реакционной среды. Более эффективное использование ферментов можно обеспечить благодаря тщательному подбору условий, в которых будет происходить реакция. Однако можно изменить оптимальные значения физико-химических параметров за счёт иммобилизации фермента на нерастворимом носителе [2].

Важными характеристиками ферментов, определяющими их каталитическую активность, являются оптимальные диапазоны температуры, значений pH среды и концентрации субстрата [3]. Нами были изучены физико-химические свойства коллагеназы, свободной и иммобилизованной на матрице хитозана.

Полученные в ходе исследования данные позволили сделать следующие выводы: иммобилизация коллагеназы на матрице хитозана приводит к сдвигу оптимума ее функционирования в сторону более высоких температур (от 37 до 40 °С) и к расширению диапазона оптимальных значений pH, кроме того, повышается термостабильность биокатализатора. Влияния иммобилизации на кинетику ферментативной реакции зафиксировано не было.

1. Л.Н. Гордеева. *Пищевая и перерабатывающая промышленность*, 2002, **2**, 604.
2. В.А. Королева [и др.]. *Вестник ВГУ: Химия. Биология. Фармация*, 2018, **3**, 58-63.
3. В.А. Королева [и др.]. *Орг. и регул. физиолого-биохим. проц.*, 2015, **17**, 99-102.

## РОЛЬ АРОМАТИЧЕСКИХ ПРЕНИЛТРАНСФЕРАЗ В ФОРМИРОВАНИИ МЕТАБОЛОМА ПЕЧЕНОЧНИКА *MARCHANTIA POLYMORPHA*

Л.Р. Валеева

*Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань.*

*lia2107@yandex.ru*

Среди всех представителей растительного царства Бриофиты (зеленые и антоцеротовые мхи, печеночники) представляют собой уникальную группу наземных растений, обладающих огромным потенциалом в качестве продуцентов уникальных биологически активных метаболитов. Ряд таких ароматических соединений подвергается пренилированию под действием специфических ферментов – цис-пренилтрансфераз. Таким образом, изучение пренилированных ароматических соединений бриофитов представляет собой перспективное направление в качестве основы для последующего развития метаболической инженерии этой группы растений.

Целью работы являлось изучение роли цис-пренилтрансфераз в формировании метаболома и вклада пренилированных ароматических соединений в биологическую активность метаболитов печеночника *M. polymorpha*. Для работы были выбраны гены *M. polymorpha* Mapoly0012s0016, Mapoly0121s0026, Mapoly0142s0042 и Mapoly0142s0037, относящиеся к цис-пренилтрансферазам типа 4 и 7 (CPT4, CPT7). Для получения растений, мутантных по перечисленным генам, использовали технологию CRISPR/Cas9 редактирования генома. Проводили клонирование последовательности направляющей РНК (sgRNA) в промежуточный вектор MpGE\_En03 под контроль промотора U6 и субклонирование последовательности U6::sgRNA в бинарный вектор MpGE011 в область T-ДНК, включающую ген *cas9*. Клонирование полноразмерных вставок подтверждали генотипированием и секвенированием. Полученные вектора трансформировали в клетки штамма *Agrobacterium tumefaciens* GV2260. Таким образом, нами были получены вектора для CRISPR/Cas9 редактирования последовательностей генов цис-пренилтрансфераз *M. polymorpha*. Далее будет проведена трансформация растений и получены растения-нокауты по таргетным генам. Последующий анализ состава экстрактов тканей мутантных растений и анализ их антимикробной активности позволит установить роль пренилированных ароматических соединений в формировании метаболома и вклада в биологическую активность метаболитов *M. polymorpha*.

*Работа выполнена при поддержке грантом Академии Наук Республики Татарстан № 10-107-эГ.*



## РОЛЬ ГЕРАНИЛГЕРАНИЛТРАНСФЕРАЗЫ I В РЕГУЛЯЦИИ РАЗВИТИЯ ТАЛЛОМА *MARCHANTIA POLYMORPHA*

С.М. Джабраилова, М.Р. Шарипова, Л.Р. Валеева

*Институт Фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*penguinaz00@gmail.com*

Переход от одноклеточного плана строения к многоклеточному является одним из наиболее значимых этапов эволюции эукариот, однако молекулярные механизмы этого перехода остаются недостаточно изученными. В свою очередь, пренилирование – одна из ключевых посттрансляционных модификаций белков – обеспечивает возможность протекания многих процессов, необходимых для формирования многоклеточных структур, включая сигнальную трансдукцию, закоривание белков в мембраны, клеточную пролиферацию, дифференциацию и апоптоз. Цель данной работы – определение роли пренилтрансферазы PGGT I в развитии многоклеточного строения растений *Marchantia polymorpha*.

Нами были получены линии растений *M. polymorpha* с нокаутированным геном  $\beta$ -субъединицы (GGB) геранилгеранилтрансферазы I (PGGT I). Растения-нокауты сохраняли жизнеспособность, но не были способны образовывать характерный дорсо-вентральный таллом, имели нетипичные округлые клетки, собранными в плотные каллусоподобные структуры. На основе нокаутных линий растений *M. polymorpha* были получены растения-комплементанты с восстановленным фенотипом растений дикого типа, экспрессирующие ген GGB, сопряженный с геном флуоресцентного белка. Было показано, что  $\beta$ -субъединица PGGT I локализуется в цитоплазме клеток растений-комплементантов. Протеомный анализ показал, что в мутантных растениях отсутствует ряд мембранных белков, характерных для растений дикого типа. Кроме того, были обнаружены белки и ферменты, отвечающие за биосинтез белка, не характерные для растений дикого типа. Также были обнаружены различия в биосинтезе лектин-подобных, фасцилин-подобных и гермин-подобных белков, участвующих в процессах регуляции развития растений и стрессового ответа. Таким образом, было показано, что пренилтрансфераза PGGT I играет роль в развитии нормального многоклеточного таллома растений *M. polymorpha*. Полученные данные позволят приблизиться к пониманию эволюции многоклеточности растений.

*Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии президента РФ СП-3391.2021.4.*

## ИММОБИЛИЗАЦИЯ ПАПАИНА НА МАТРИЦЕ ПОЛИВИНИЛКАПРОЛАКТАМА

А.Н. Дубовицкая<sup>a</sup>, М.Г. Холявка<sup>a</sup>, М.С. Лавлинская<sup>a,b</sup>, А.В. Сорокин<sup>a,b</sup>, В.Г. Артюхов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО ВГУ, г. Воронеж;

<sup>b</sup> ФГБОУ ВО ВГУИТ, г. Воронеж.

*a.n.dubovitskaya@mail.ru*

В пищевой и фармацевтической промышленности все чаще используются ферментные препараты. Высокий интерес представляет протеолитический фермент папаин, используемый в пищевой промышленности для тендеризации мяса и осветления напитков [1]. Энзимы характеризуются определенными диапазонами значений рН, температуры и иных факторов, за пределами которых они теряют свою активность, что ограничивает их применение в промышленности. Одним из решений данных затруднений является иммобилизация ферментов на синтетических носителях.

Поли-N-винилкапролактан (ПВК) – высокогидрофильный синтетический термоосаждаемый полимер с выраженной способностью к комплексообразованию и отсутствием токсичности, что позволяет использовать его в качестве матрицы для иммобилизации ферментов и других биологически активных молекул [2]. Целью работы являлось изучение каталитических свойств папаина, иммобилизованного на матрице поливинилкапролактама.

В качестве объекта исследования был выбран папаин фирмы Sigma. Иммобилизация проводилась на матрице поли-N-винилкапролактама в соотношении 1 г фермента на 100 мл 7% раствора ПВК при добавлении смеси фермент-ПВК к 1% раствору резорцина в отношении 1:1. В качестве иммобилизационной среды использовался фосфатный буфер с рН 6,5; инкубация проводилась в течение 24 часов при комнатной температуре. Измерение каталитической активности выполнялось по субстрату азоказеину. Определение содержания белка проводилось методом Лоури.

В результате проведенных экспериментов было выявлено, что активность свободного папаина составляет  $117,7 \pm 2,7$  ед/мл, а иммобилизованного на матрице поливинилкапролактама –  $40,7 \pm 5,1$  ед/мл, что соответствует 34,6% от каталитической способности нативного фермента. Несмотря на снижение каталитической способности в 2,9 раза, мы получили стабилизированную по уровню активности форму папаина. Таким образом, изучение свойств поливинилкапролактама как матрицы для иммобилизации ферментов является перспективным направлением исследований, а поливинилкапролактан можно успешно использовать как носитель для иммобилизации папаина.

*Работа выполнена при финансовой поддержке в форме гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-1982.2020.4. Соглашение 075-15-2020-325.*

1. Холявка М.Г. Практикум по биотехнологии: иммобилизованные биологические объекты в системе лабораторных работ / М.Г. Холявка, М.А. Наквасина, В.Г. Артюхов; Воронежский государственный университет. – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017. – 161 с.
2. Поливинилкапролактан – обратимо осаждаемый термополимер. Соосаждение белков / С.Ф. Шерстюк [и др.] // Биотехнология. – 1987. – № 2. – С. 179-182.

## РЕАКЦИИ ИЛИДОВ ФОСФОРА (1) С 2-R-АРИЛ[Д]-1,3,2-ДИОКСАФОСФОРИН-4-ОНАМИ (2) ПОЛУЧЕНИЕ 1,3,2-ДИОКСАФОСФОРИН-4-ОНОВ – ФОСФОРНЫХ АНАЛОГОВ ФЛАВОНОИДОВ

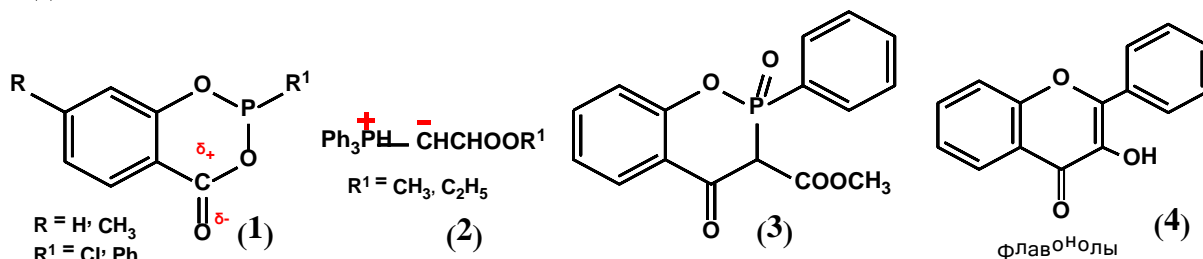
К.О. Ермолаева<sup>а</sup>, Г.А. Ивкова<sup>а</sup>, В.Ф. Миронов<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,  
Казань, Россия;

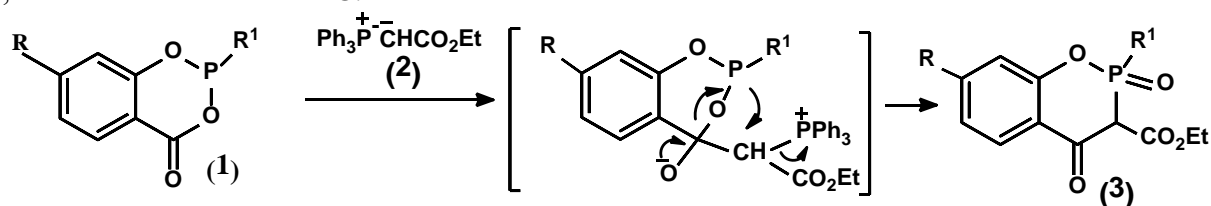
<sup>б</sup> Институт органической и физической химии КазНЦ РАН  
Казань, Россия.

rubl\_98@mail.ru

В ходе реакций илидов фосфора (1) с 2-R-арил[д]-1,3,2-диоксафосфорин-4-онами (2) получены соединения с новой P–C связью - 1,3,2-диоксафосфорин-4-оны (3), которые являются структурными аналогами крупнейшего класса полифенольных соединений – флавоноидами (4). Эти соединения выявляются во всех частях растений и обеспечивают их иммунитет и резистентность к паразитирующим микроорганизмам вирусного и бактериального происхождения.



В ходе реакции фосфита (1), проявляющего электрофильные свойства, с илидом (2) образуется гетероцикл (3) с новой связью P–C с высокой степенью регио- и стереоселективности. Строение этого соединения доказано методом ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>31</sup>P, <sup>13</sup>C. Мы полагаем, что первоначально реализуется атака карбанионного центра илида на углерод ангидридного фрагмента салицилфосфита с промежуточным образованием биполярной структуры (А), которая далее трансформируется в новый гетероцикл (3); при этом происходит образование фосфорильной группы, новых связей P–C и C–C.



Работы выполнены за счёт средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (номер проекта 0671-2020-0063).

## УЧАСТИЕ МБТШ IbpA ACHOLEPLASMA LAIDLAWII В ФОРМИРОВАНИИ БАКТЕРИАЛЬНОЙ БИОПЛЕНКИ

Д.А. Живайкина, М.С. Федорова, Л.С. Чернова, А.Р. Каюмов

*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань.*

*dariazhiv@mail.ru*

Малые белки теплового шока (МБТШ) – АТФ-независимые молекулярные шапероны, препятствующие необратимой агрегации белков в неблагоприятных условиях среды. Представитель класса Mollicutes – *Acholeplasma laidlawii* – фитопатогенная свободноживущая микоплазма с широким диапазоном сред обитания у которой найден только один МБТШ – IbpA (AIIbpA). Ранее было обнаружено, что при тепловом стрессе количество AIIbpA в клетках *A. laidlawii* составляет около 7% от общего количества белков в клетке, что является одним из ключевых факторов повышенной адаптации данной бактерии к высоким температурам. Кроме того, *A. laidlawii* обладает механизмом образования бактериальной биопленки, что обеспечивает большую приживаемость данного представителя. Поэтому целью данной работы было выявить способность гиперэкспрессии AIIbpA формировать термотолерантность бактерий к высоким температурам и способствовать образованию бактериальной биопленки в условиях температурного стресса, исследовать способность штаммов *Escherichia coli* с нефизиологическим содержанием малых белков теплового шока образовывать биопленку в условиях температурного стресса и выявить влияние N- и C- концевых функциональных мотивов AIIbpA на формирование бактериальной биопленки клетками *E. coli*.

Для оценки влияния гиперпродукции AIIbpA во время стресса в образовании биопленки клетками *E. coli*, оценивали жизнеспособность клеток при различных температурах с помощью резазурина и МТТ-теста. Для выявления влияния N- и C- концевых функциональных мотивов AIIbpA на формирование бактериальной биопленки клетками *E. coli*, были использованы плазмиды для экспрессии мутантных белков с делециями N- и C- концов и экспрессированы в штамме *E. coli* BL21 с нокаутированными генами, кодирующими собственные МБТШ. Образование биопленок оценивали с помощью окрашивания кристаллическим фиолетовым.

По результатам полученных данных гиперэкспрессия ахолеплазменного IbpA в клетках *E. coli* с физиологическими и нокаутированными генами собственных МБТШ существенно не повлияла на термотолерантность и формирование бактериальной биопленки.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект No 20-34-90066).*

## РЕГУЛОН ФАКТОРА ТРАНСКРИПЦИИ GlnR В КЛЕТКАХ *LENTILACTOBACILLUS HILGARDII*

Д.Э. Журавлева, З.И. Исхакова, А.Р. Каюмов

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*darya.ed@gmail.com*

Главным регулятором азотного обмена в клетках грамположительных бактерий является фактор транскрипции GlnR семейства факторов транскрипции MerR. Анализ аминокислотной последовательности белка GlnR *Lactobacillus hilgardii* выявил наличие характерного ДНК-связывающего мотива спираль-поворот-спираль, что позволяет предположить наличие ДНК-связывающих свойств. В клетках других бактерий GlnR участвует в регуляции азотного обмена путем связывания с промоторами генов в условиях избытка азотного питания. В бациллах GlnR подавляет экспрессию своего оперона *glnRA*, гена *tnrA* и оперона *ureABC*. Целью работы было определить регулон GlnR *L. hilgardii*.

Поиск промоторов, имеющих в своем составе участок, гомологичный консенсусной последовательности GlnR-боксов в геноме *L. hilgardii* проводили с помощью геномного браузера. Было обнаружено 13 потенциально регулируемых GlnR генов, восемь из которых кодируют белки с известной функцией (*amtB*, *aspA*, *bacF*, *dppE\_6*, *glnR*, *mltF\_2*, *potD\_1*, *serPI\_3*), и пять генов – с неизвестной (*00541*, *00542*, *00741*, *00742*, *01073*). Далее возможность взаимодействия GlnR с данными промоторами проверяли *in vitro* с помощью метода задержки в геле. GlnR способен связывать все промоторы предполагаемого GlnR-регулона, но с разной аффинностью. Однако, влияние GlnR на экспрессию этих генов остается неизвестным и требует дальнейших исследований. Также было показано, что РII-подобный белок PotN усиливает ДНК-связывающую активность GlnR в 1.3 раза, а в присутствии 2 мМ АДФ GlnR в 1.6 раза эффективнее связывается с ДНК, чем в присутствии АТФ.

Таким образом, фактор транскрипции GlnR способен связываться с промоторами всех генов предполагаемого регулона, но с разной аффинностью. ДНК-связывающая активность GlnR опосредована взаимодействием с РII-подобным белком PotN в ответ на энергетический статус клетки.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук (№ МД-572.2020.4).*

## НАКОПЛЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЯХ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УСЛОВИЙ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Ю.С. Иванова, У.А. Галиханова

*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань, Россия/*

*oh\_julia\_13@mail.ru*

Признанные официальной медициной лекарственные растения составляют основу ресурсной базы для создания лекарственных средств. Сегодня особо актуальны исследования, посвященные поиску новых лекарственных растений, легко доступных, с высоким содержанием ценных биологически активных веществ (БАВ), которые в том числе могут применяться в качестве компонентов функциональных продуктов питания. Однако на накопление БАВ в лекарственном растительном сырье (ЛРС) существенное влияние оказывают условия произрастания. В связи с этим, оценивали биохимический состав травы клевера лугового (*Trifolium pratense* L), произрастающего в зоне смешанных лесов (Арский и Балтасинский р-н) и лесостепи (Актанышский, Мензелинский р-н) республики Татарстан (РТ).

Установили, что в траве клевера лугового содержится больше водорастворимых фенольных соединений, а преобладающим флавоноидом, по-видимому, является цинарозид. Сравнительный анализ содержания БАВ показал, что растения клевера лугового (*Trifolium pratense* L) Балтасинского района, приуроченные зоне смешанных лесов, содержали примерно в 2 раза больше водорастворимых фенольных соединений и флавоноидов в пересчете на цинарозид, чем другие анализируемые варианты. Кроме того, интересно отметить, что только в *T. pratense* приуроченном зоне смешанных лесов (Балтасинский р-н) обнаружили некоторое количество лютеолина.

Балтасинский район самый северный в РТ с наиболее прохладным и изменчивым климатом [1], кроме того, район характеризуется высокой эрозией почв (около 40% территорий). Таким образом, по-видимому, целая совокупность стрессовых факторов Балтасинского района влияет на растения клевера лугового и стимулирует накопление фенольных соединений. Таким образом, данный район можно считать перспективным местом сбора ЛРС клевера лугового.

1. М.Р. Муратов Влияние применения удобрений на состояние почв и урожайность культур у предкамья Республики Татарстан, Казань, 2015, 161 с

## ЦЕОЛИТЫ ТАТАРСКО-ШАТРАШАНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ КАК НОСИТЕЛИ МОДЕЛЬНОГО АЛЬБУМИНА ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВНОЙ АДСОРБЦИИ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ БЕЛКОВ

Р.Р. Исламова<sup>а</sup>, Г.Ю. Яковлева<sup>б</sup>, А.Н. Тюрин<sup>с</sup>, О.Н. Ильинская<sup>б</sup>, О.Н. Лопатин<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань;*

<sup>с</sup> *Татарское геологоразведочное управление ПАО «Татнефть», Казань.*

*geology.isl@mail.ru*

Цеолиты являются природными адсорбентами, способными к ионообмену. В данной работе изучен цеолит – клиноптилолит из Татарско-Шатрашанского месторождения Республики Татарстан. Открытое в 90-х годах Татарско-Шатрашанское месторождение Дрожжановского района РТ расположено в центральной части европейской части РФ [1].

В настоящее время пристальное внимание исследователей привлекает терапевтический потенциал цеолитов, обусловленный детоксифицирующими, антиоксидантными и противовоспалительными свойствами. Для установления возможности служить носителем терапевтических белков были выбраны природные необработанные клиноптилолиты Татарско-Шатрашанского месторождения. В качестве модельного белка в работе использовали сывороточный бычий альбумин. Целью настоящей работы было выявление адсорбционной способности природного клиноптилолита, а также анализ пролонгированного выхода адсорбированного белка для обоснования возможности данного минерального вида быть носителем различных белковых лекарственных препаратов.

Хотя адсорбционные свойства цеолитов, в том числе и по отношению к белкам, известны, различные представители этих минералов могут обладать разными адсорбционными свойствами. Нами впервые установлена возможность исследованных цеолитсодержащих пород быть носителями анионного альбумина.

*1. Тюрин А.Н. Минералого-литологическая характеристика цеолитсодержащих пород Татарско-Шатрашанского месторождения. Дисс. канд. г.-м. н. Казань, 2003. 208с.*

## МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ОСНОВЫ РЕГУЛЯЦИИ АЗОТИСТОГО ОБМЕНА У *LENTILACTOBACILLUS HILGARDII*, МОЛОЧНОКИСЛЫХ БАКТЕРИЙ, ИЗ МОЛОЧНЫХ ПРОДУКТОВ И ВИНА

З.И. Исхакова, Д.Э. Журавлева, А.Р. Каюмов

*Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань.*

*zalinunya@mail.ru*

Молочнокислые бактерии (LAB) широко распространены в природе и могут быть найдены в нишах с избытком питательных веществ, включая поверхности растений, желудочно-кишечный тракт животных и человека, ферментированное молоко и растительные субстраты. Среди более чем 400 видов *Lactobacilli*, известных на сегодняшний день, только пять, включая *Lentilactobacillus hilgardii*, широко присутствующие в молочных продуктах и вине, несут в своем геноме ген, кодирующий РП-подобный белок, являющимся одним из центральных регуляторов клеточного метаболизма, реагируя на энергетический и углеродно-азотный статус многих свободноживущих бактерий, архей и хлоропластов растений. Геном *L. hilgardii* был секвенирован с использованием платформы Illumina MySeq и Oxford nanopore platform с общим охватом 201x. Ген Р-И белка из *L. hilgardii* был назван *potN*, и имеет уникальный генетический фон и расположен в опероне *potABCD*, кодирующем АВС-переносчик спермидина/путресцина. Р-И белки регулируют клеточный метаболизм связываясь с белками-мишенями, для белка PotN были определены 3 белка-мишени, это транскрипционный фактор GlnR, бета-субъединица пируват/2-оксоглутарат/ацетоиндегидрогеназы AcoB и АТФаза PotA. Измерение взаимодействия *in vitro* с помощью микромасштабного термофореза (MST) показали, что ADP-Mg<sup>2+</sup> снижает взаимодействие PotN-GlnR, в то время как АТФ-Mg<sup>2+</sup> снижает эффективность взаимодействия PotN с PotA. Не обнаружено влияния эффекторов на взаимодействие PotN-AcoB. Данные, полученные *in vitro*, были подтверждены *in vivo* с использованием бактериальной двухгибридной системы. В зависимости от доступности питательных веществ белок PotN конкурентно связывает АТФ и АДФ, а затем взаимодействует в основном либо с GlnR, либо с PotA. Взаимодействуя с GlnR, PotN влияет на его ДНК-связывающую активность и, по-видимому, контролирует GlnR-регулон. Связываясь с PotA, PotN влияет на его АТФазную активность и влияет на проникновение полиаминов в клетку. Возможная физиологическая роль взаимодействия с AcoB остается спекулятивной и требует дальнейших исследований.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук (№ МД-572.2020.4).*



## ОЦЕНКА ПРОБИОТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА И ПОЛНОГЕНОМНОЕ СЕКВЕНИРОВАНИЕ ШТАММА *LACTIPLANTIBACILLUS PLANTARUM* FCa3L

О.С. Карасева, Г.Д. Ожегов, Ф.С. Ахатова, Е.А. Анисимова, Р.Ф. Фахруллин, Д.Р. Яруллина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, ул. Кремлевская, 18.

Olkakarp66@gmail.com

Лактобациллы широко используются в пищевой отрасли и пробиотикотерапии из-за своих консервирующих свойств, антагонистической активности против патогенов и благотворных эффектов на здоровье человека. Однако большое количество потенциально полезных пробиотических микроорганизмов остаются неизученными. Целью данной работы является оценка пробиотического статуса и полногеномное секвенирование штамма *Lactiplantibacillus plantarum* FCa3L.

Бактерии *L. plantarum* FCa3L были выделены из квашеной капусты в 2014 году. Таксономическая идентификация выполнена с помощью MALDI Biotyper (Bruker, Германия) и методом секвенирования гена 16S рРНК. Секвенирование генома выполнено на приборе Illumina MiSeq. Сборка генома с помощью ассемблера Unicycler v. 0.4.8. позволила получить 62 контига. Из них 61 контиг объединяются в скаффолд длиной 3,3 млн. п.н. Один циклический контиг был идентифицирован как колифаг phi-X174. Аннотация на серверах EggNOG и RAST показала, что штамм *L. plantarum* FCa3L не имеет факторов патогенности, но обладает генами множественной лекарственной устойчивости. Выявлены гены, отвечающие за синтез биотина, тиамин, рибофлавина и витаминов группы В.

Анализ антагонистической активности *L. plantarum* FCa3L, выполненный методом «агаровых блоков» против ряда патогенных и условно-патогенных бактерий, позволил установить, что данный изолят превосходит референсный штамм *L. plantarum* 8P-A3, выделенный из пробиотического препарата «Лактобактерин» («Лактобактерин сухой» (ФГУП НПО «Биомед»), по способности угнетать рост *Morganella morganii*, *Bacillus cereus*, *Micrococcus luteus*, *Enterococcus faecalis*, *Escherichia coli* K-12, *Klebsiella pneumonia*, *Serratia marcescens*, *Staphylococcus aureus* ATCC и *Pseudomonas aeruginosa* ATCC. Установлен вклад кислотообразования (общая титруемая кислотность составила  $1,46 \pm 0,24$  мМ/г) и продукции перекиси водорода в антагонистическую активность *L. plantarum* FCa3L.

Измеренные с помощью метода MATS (микробная адгезия к растворителю) гидрофильность, основные и электрон-донорные свойства поверхности клеток *L. plantarum* FCa3L указывают на их низкую адгезивность. При этом они превосходят референсный штамм 8P-A3 по адгезии на буккальных эпителиоцитах и автоагрегации клеток.

Диско-диффузионным методом установлено, что бактерии *L. plantarum* FCa3L проявляют устойчивость к ванкомицину, ципрофлоксацину и аминогликозидам и чувствительны к ампициллину, рифампицину, клиндамицину, хлорамфеноколу, эритромицину и тетрациклину.

Данная работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности КФУ с использованием оборудования МЦКП КФУ для обеспечения клеточных, геномных и постгеномных исследований в Приволжском регионе.

## ВВЕДЕНИЕ В КУЛЬТУРУ *IN VITRO RHODIOLA ROSEA* С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКОЙ РАСТВОРОМ СТЕВИОЗИДА

А.С. Киселева, У.А. Галиханова

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*anykisely@gmail.com*

Использование биотехнологических подходов для культивирования растений *in vitro* может позволить сохранить природные популяции редких лекарственных видов и служить дополнительным источником получения лекарственного сырья. Вид родиола розовая (*Rhodiola rosea* L.) обладает уникальным биохимическим составом, обуславливающим адаптогенные и стимулирующие свойства, высокую антиоксидантную активность. В последние десятилетия численность популяций вида резко сокращается в связи с антропогенными факторами. Кроме того, восстановлению препятствуют низкая семенная всхожесть, необходимость длительной стратификации и высокий процент гибели проростков [1]. Исследование [2] свидетельствует, что стевиозид растения *Stevia rebaudiana* стимулирует прорастание семян пшеницы и может быть использован в качестве регулятора роста и развития растений.

В рамках исследования мы оценили особенности проростков родиолы розовой, обработанной стевиозидом, при введении в культуру *in vitro*. Эксплантами служили проростки с корнями *R. rosea*, полученные из стратифицированных семян (30 дней), обработанных раствором стевиозидом ( $10^{-8}$  М) в течение: 3, 6, 12, 24 ч. Контрольные семена - 24 ч в воде. Проростки выращивали в течение 60 дней, затем стерилизовали и переносили на безгормональную питательную среду Мурасиге и Скуга.

Показано, что предпосевная обработка семян *R. rosea* раствором стевиозидом в концентрации  $10^{-8}$  М сокращает время их прорастания. Однако повышение всхожести семян, стимуляция роста надземной и подземной части проростков происходит только в варианте с 3-х часовой обработкой. Полученные *in vitro* растения родиолы розовой, обработанные стевиозидом (3 ч), формируют большее количество листьев и корней, чем контрольные растения.

1. K. Tasheva. *Open Life Sciences*, 2010, **5**, 853-863.

2. U.A. Ogorodnova. *International Journal of Pharmacy & Technology*, 2016, **8**, 14936-1494.

## РОЛЬ ГЕНОВ NOP2 ПУТИ В РЕГУЛЯЦИИ БИОЛОГИИ ТЕЛОМЕР РАСТЕНИЙ *ARABIDOPSIS THALIANA*

А.Ю. Люшненко<sup>а</sup>, И.А. Агабекян<sup>а</sup>, Л.Р. Валеева<sup>а</sup>, Л.Р. Абдулкина<sup>а</sup>, Е.В. Шакиров<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия;

<sup>б</sup> Университет Маршалл, Хантингтон, США.

*lushnenko.a@mail.ru*

Теломеры представляют собой специализированные нуклеопротеиновые структуры на концах эукариотических хромосом. Они играют важную роль в поддержании целостности генома и регуляции продолжительности жизни клеток. Теломеры состоят из повторяющихся нуклеотидных последовательностей, защищающих хромосомы от слипания и деградации. С каждым делением клетки теломеры укорачиваются, а при достижении критической величины клетка перестает делиться и умирает. Установлено, что длина теломерной ДНК находится в определенном диапазоне для каждого биологического вида, однако, точный механизм регуляции длины теломер в настоящее время неизвестен [McEachern *et al.*, 2000]. В качестве модельного организма для изучения генов, регулирующих длину теломер, мы использовали *Arabidopsis thaliana*, чей геном хорошо изучен и широко используется в изучении биологии теломер.

Ранее было установлено, что ген *OLI2/NOP2A* является положительным регулятором, контролирующим длину теломер растений *A. thaliana* [Abdulkina *et al.*, 2019]. Также известно, что этот ген кодирует S-аденозил-L-метионин-зависимую метилтрансферазу и участвует в биогенезе рибосом. Однако механизм работы гена *OLI2/NOP2A* остается неизвестным. Ген *OLI2/NOP2A* также вовлечен в регуляцию роста и пролиферации клеток вместе с генами *OLI5/RPL5A* и *OLI7/RPL5B*, которые кодируют паралоги рибосомного белка L5 [Fujikura *et al.*, 2009]. Таким образом, целью работы являлось исследование влияния генетического пути NOP2A на регуляцию длины теломер в *Arabidopsis thaliana*.

В работе были получены семена мутантных растений из коллекций SALK и SAIL. С помощью генотипирования были найдены гомозиготные Т-ДНК мутанты по генам *OLI5/RPL5A*, *OLI7/RPL5B* и выращены в четырех последовательных поколениях. Геномная ДНК этих растений была выделена и рестрицирована с помощью эндонуклеазы рестрикции *TruII*, которая расщепляет нуклеотидные последовательности рядом с теломерной последовательностью, освобождая теломеры от остальной части генома. После этого гибридизовали с пробой, специфичной к теломерам растения *A.thaliana*. Согласно полученным данным сазерн блот анализа, растения-мутанты по гену *OLI5/RPL5A* имели стабильно короткую длину теломер. Однако мутанты по гену *OLI7/RPL5B* демонстрировали постепенное укорочение длины теломер из поколения в поколение. Ранее исследуемые мутанты по гену *OLI2/NOP2A* также устанавливали новую более короткую длину теломер, как и мутанты по гену *OLI5/RPL5A* [Abdulkina *et al.*, 2019]. Поэтому мы проанализировали генетическое взаимодействие генов *OLI5/RPL5A* и *OLI2/NOP2A*, скрестив гетерозиготные мутанты по этим генам. Двойные гомозиготные мутанты *oli5/rpl5a oli2/nop2a* демонстрировали стабильно короткие теломеры в трех последовательных поколениях. Длина теломер двойных мутантов оставалась на уровне одиночных мутантов *oli5/rpl5a*. Таким образом, в ходе работы были найдены новые генетические факторы, влияющие на длину теломер растений, причем ген *OLI5/RPL5A* функционирует в одном генетическом пути с ранее изученным геном *OLI2/NOP2A*.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-14-00147).*

1. Abdulkina, L.R. Components of the ribosome biogenesis pathway underlie establishment of telomere length set point in *Arabidopsis* / L.R. Abdulkina, C. Kobayashi, J.T. Lovell, I.B. Chastukhina, B.A. Behailu, I.A. Agabekian, A.V. Suescún, L.R. Valeeva, C. Nyamsuren, G.V. Aglyamova, M. R. Sharipova, D.E. Shippen, T.E. Juenger and E.V. Shakirov // Nat Commun. – 2019. – V.10. – P.5479.

2. Fujikura, U. Coordination of cell proliferation and cell expansion mediated by ribosome-related processes in the leaves of *Arabidopsis thaliana* / U. Fujikura, G. Horiguchi, M.R. Ponce, J.L. Micol, mayH. Tsukaya // *The Plant Journal*. – 2009. – V. 59, I. 3. – P. 499–508.
3. McEachern, M. J. Telomeres and their control / M. J. McEachern, A. Krauskopf, E. H. Blackburn // *Annu Rev Genet*. – 2000. – V. 34. – P. 331–358.

## ИОНООБМЕННЫЕ СМОЛЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ НОСИТЕЛЬ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ТРИПСИНА АДсорбЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Н.В. Малыхина, И.К. Воробьёв, С.С. Ольшанникова, Ф.А. Сакибаев, М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, г. Воронеж.*

*natasha.malykhina2016@yandex.ru*

Трипсин (КФ 3.4.21.4) – сериновая протеаза, которая катализирует гидролиз пептидных, сложноэфирных и амидных связей. Применяется в моющих средствах для удаления белковых пятен и при обработке кожи, обладает антибактериальной активностью [1].

Многие ферменты легко инактивируются под воздействием внешней среды. Поэтому для сохранения стабильности энзимов целесообразно проводить их иммобилизацию. Самый простой и доступный способ иммобилизации на сегодняшний день – адсорбция.

Ионообменные смолы представляют собой полимерные гранулы с различными функциональными группами, способные связывать ионы противоположного заряда [2]. Ионообменные смолы нашли широкое применение во многих отраслях хозяйственной деятельности человека. В основном их используют для смягчения и обессоливания воды, при очистке возвратных и сточных вод, для разделения и очистки различных веществ в химической промышленности, в роли катализаторов для органического синтеза [3].

Целью нашего исследования было разработать методику адсорбционной иммобилизации трипсина на ионообменных смолах.

Трипсин быка (MP biomedical, США), был выбран в качестве объекта исследования. Носителями для иммобилизации служили ионообменные смолы КУ-2, КУ-2-8чС, ИМАС-НР111, АВ-16-ГС, АВ-17-2П, PUROLITE A100, ЭДЭ-10П. Иммобилизацию трипсина проводили адсорбционным методом. Определение протеазной активности трипсина осуществляли на субстрате азоказеине (Sigma). Содержание белка определяли модифицированным методом Лоури.

Выявлено оптимальное соотношение содержания белка (мг на г носителя), общей протеазной активности (ед на мл раствора) и удельной протеазной активности (ед на мг белка) при иммобилизации трипсина на анионообменнике ЭДЭ-10-П с фосфатным буфером, рН 11.0 и NaOH-KCl буфером, рН 12.0. Благодаря сочетанию относительно недорогих компонентов предлагаемый нами метод доступен для отечественных лабораторий и перспективен для дальнейшего целевого применения в промышленности.

*Работа выполнена при финансовой поддержке в форме гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук МД-1982.2020.4. Соглашение 075-15-2020-325.*

1. Кретович В.Л. Введение в энзимологию. М. Наука, 1986, 336 с.
2. В.А. Королева, М.Г. Холявка, С.М. Сазыкина, С.С. Ольшанникова, В.Г. Артюхов. *Исследование сорбционной емкости кислоторастворимых хитозанов по отношению к бычьему сывороточному альбумину. Ж. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация*, 2015, 4, 85-89.
3. М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов. *Иммобилизованные биологические системы: биофизические аспекты и практическое применение: учебное пособие*, 2017, 261 с

## БЕЗОПАСНОЕ ГРИБКОВОЕ МАСЛО ИЗ МИЦЕЛИАЛЬНОГО ГРИБА MORTIERELLA ALPINA ДЛЯ ДЕТСКОГО ПИТАНИЯ

И.И. Мугаллимова

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа.*

*ilnara-001@yandex.ru*

Включение незаменимых жирных кислот в рацион питания человека, особенно для младенцев, стало популярным в последние десятилетия, и это способствует их производству во всем мире. Вместе с пищей в детский организм должны поступать не только незаменимые жирные кислоты, но и их производные – докозагексагеновая (DHA) и арахидоновая кислоты (ARA), которые биотехнологически получают из маслянистого гриба *Mortierella Alpina*. ARA очень важна в процессе формирования и развития всех органов и систем новорожденного. Для малышей, которые переходят с грудного вскармливания на прикормы, источником арахидоновой кислоты могут служить детские смеси. Производители стараются обогатить состав своих продуктов этим важным компонентом.

В настоящий момент микробные источники ARA используются для промышленного производства благодаря их быстрому и контролируемому производству по сравнению с животными (рыбой) и растительными источниками, экологической безопасности и снижении нагрузки на морскую флору и фауну. Гриб *Mortierella Alpina* не известен как патогенный для человека и не вырабатывает микотоксины. Не смотря на это существует мало сведений о промышленной и рыночной информации, касающейся этого микроорганизма. При нынешних темпах промышленное производство ARA по прогнозам достигнет 410 тысяч тонн к 2025 году, чего будет недостаточно для удовлетворения спроса [1].

Большой спрос на ARA стимулирует интенсификацию производства, которое может быть оптимизировано с помощью метаболической и биомолекулярной инженерии.

1. Ишутина, Н.А. Циклооксигеназа 2 как маркер невынашивания беременности ранних сроков при цитомегаловирусной инфекции / Н.А. Ишутина, И.А. Андриевская, М.Н. Герман // Acta Biomedica Scientifica. 2020. №3. С. 7-11.

## ВЛИЯНИЕ УФ-ОБЛУЧЕНИЯ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ И РАЗМЕРЫ МОЛЕКУЛ ТРИПСИНА

С.М. Панкова<sup>a,b</sup>, Ф.А. Сакибаев<sup>a</sup>, М.Г. Холявка<sup>a</sup>, В.Г. Артюхов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»;

<sup>b</sup> ФГБОУ ВО «Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко».

*sazykina.93@mail.ru*

В настоящее время достижения энзимологии находят все большее применение в профилактике, диагностике и лечении болезней. На сегодняшний день широкое распространение получили лекарственные препараты из протеолитических ферментов (трипсина, химотрипсина, папаина, бромелина), которые применяются в клинической практике в виде лекарств местного и системного использования. Трипсин (КФ 3.4.21.4) – протеолитический фермент класса гидролаз, синтезируемый из профермента трипсиногена в двенадцатиперстной кишке. Он относится к группе сериновых протеаз и представляет собой бесцветное кристаллическое вещество. Молекулярная масса составляет 23-25 кДа, оптимум каталитической активности находится в диапазоне рН 7.5-8.0. В качестве антимикробного агента, помимо протеаз, может выступать ультрафиолетовое излучение. В связи с этим целью работы было изучить динамику изменения размеров и удельной активности молекул трипсина после УФ-облучения в диапазоне доз 151-6040 Дж/м<sup>2</sup>.

В результате исследования, нами было установлено, что каталитическая способность трипсина уменьшается практически вдвое при использовании дозы 6040 Дж/м<sup>2</sup>. При этом анализ динамики изменения размеров частиц в растворе показал снижение способности трипсина образовывать надмолекулярные комплексы с возрастанием дозы его облучения УФ-светом, причем уменьшение дисперсии размеров частиц может быть обусловлено как низким содержанием агрегатов, так и увеличением их стабильности.

*Работа выполнена при финансовой поддержке в форме гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-1982.2020.4. Соглашение 075-15-2020-325.*

## СОЗДАНИЕ БИОКАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ ПАПАИНА, ИММОБИЛИЗОВАННОГО КОВАЛЕНТНЫМ МЕТОДОМ НА ХИТОЗАНЕ

Ю.А. Редько, С.С. Ольшанникова, М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, г. Воронеж.*

*redkoju@yandex.ru*

Папаин (КФ 3.4.22.2) – протеолитический фермент растительного происхождения, получаемый из листьев и плодов растения папайи (*Carica papaya*). Энзим используется в качестве противовоспалительного, антиокислительного, антибактериального и ранозаживляющего вещества, а также применяется в пищевой и легкой промышленности [1].

Хитозан – аминсахарид, обладающий биосовместимостью, биodeградируемостью, высокой биологической активностью, а также иммуностимулирующими свойствами [2].

Иммобилизация ферментов путем присоединения их ковалентной связью к полимерным носителям основана на взаимодействии реакционноспособных групп, входящих в макромолекулы полимерного носителя и белка. Метод ковалентной иммобилизации обеспечивает прочную и необратимую связь фермента с носителем и сопровождается стабилизацией молекулы энзима [3].

Целью нашего исследования было разработать методику ковалентной иммобилизации папаина на хитозане с использованием глутарового альдегида в виде сшивающего агента.

Папаин (Sigma) был выбран в качестве объекта исследования. Носителям для иммобилизации служили средне- (200 кДа) и высокомолекулярный (350 кДа) хитозаны. Иммобилизацию папаина на хитозанах проводили ковалентным методом. Определение протеазной активности препарата проводили на субстрате азоказеине (Sigma). Содержание белка определяли модифицированным методом Лоури.

Оптимальное соотношение содержания белка (мг на г носителя), общей активности (в ед на мл раствора) и удельной активности (в ед на мг белка) было выявлено при ковалентной иммобилизации папаина на матрице среднемолекулярного хитозана с 15 % глутаровым альдегидом и высокомолекулярного хитозана с 20 % глутаровым альдегидом в качестве сшивающего агента.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-74-20053).*

1. И.А. Столяр, Д.В. Григорян, А.Р. Никогосян. Папаин и другие сульфгидрильные протеолитические ферменты. *Ж. Новая наука: история становления, современное состояние, перспективы развития*, 2020, 275-277.
2. В.А. Королева, М.Г. Холявка, С.М. Сазыкина, С.С. Ольшанникова, В.Г. Артюхов. *Исследование сорбционной емкости кислоторастворимых хитозанов по отношению к бычьему сывороточному альбумину. Ж. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация*, 2015, 4, 85-89.
3. М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов. *Иммобилизованные биологические системы: биофизические аспекты и практическое применение: учебное пособие*, 2017, 261 с.



## РОЛЬ TRFL ГЕНОВ В РЕГУЛЯЦИИ ДЛИНЫ ТЕЛОМЕР БРИОФИТОВ

А.В. Санникова<sup>a</sup>, М.Р. Шарипова<sup>a</sup>, Е.В. Шакиров<sup>a,b</sup>, Л.Р. Валеева<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань;*

<sup>b</sup> *Department of Biological Sciences, College of Science, Marshall University, West Virginia.*

*Anastasya.sannikova@bk.ru*

Важной структурой в составе хромосом растений и других эукариот являются теломеры, которые представляют собой специализированные терминальные нуклео-протеиновые комплексы. В клетках растений были обнаружены TRF-подобные белки (TRFL), гомологи TRF-белков человека, выполняющих важную роль в поддержании стабильности теломер [1]. Для изучения эволюции TRFL белков растений уникальными модельными организмами являются Бриофиты, поскольку они являются самой древней дивергировавшей группой наземных растений и характеризуются медленной эволюцией своих геномов. Целью работы было изучение роли TRFL белков в регуляции длины теломер мха *Physcomitrella patens* и печеночника *Marchantia polymorpha*.

Биоинформационный анализ геномов показал наличие 2 генов TRFL у *P. patens* и 3 генов-гомологов TRFL у *M. polymorpha*. Методом гомологичной рекомбинации были получены мутантные линии растений *P. patens*. Растения-нокауты *M. polymorpha* получали методом CRISPR/Cas9 редактирования генома. Нами было показано, что для двух растений-нокаутов по гену TRFL2 присуще небольшое увеличение длины теломер по сравнению с диким типом. В то время как для растения-нокауты *M. polymorpha* сохраняли длину теломер неизменной. Однако мутантные растения *M. polymorpha* по гену TRB1 имели фенотипические изменения в раннем развитии таллома, проявляющемся в истончении пластинки выводковой почки, что может быть связано с уменьшением количества клеток или отсутствием воздушных камер. Таким образом, белок TRFL2 является негативным регулятором длины теломер у мха *P. patens*, но не связан с регуляцией длины теломер у *M. polymorpha*. Дальнейшее изучение TRF – подобных белков бриофитов позволит лучше понять эволюцию регуляторных путей поддержания структуры теломер, и применить полученные данные в генной инженерии и биотехнологии растений.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №21-14-00147*

1. E.V. Shakirov, D.E. Shippen, *Front Plant Sci.* 2012, **3**, 161.

## БИОИНДИКАЦИОННАЯ ОЦЕНКА АНТРОПОГЕННО-ТРАНСФОРМИРОВАННЫХ ТЕРРИТОРИЙ НА ПРИМЕРЕ ПТИЦ

Т.А. Сурнина, А.В. Арина

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань.*

*tani-411@yandex.ru*

При определении качества среды биоиндикационными объектами выступают отдельные чувствительные виды флоры и фауны. Широкая встречаемость, территориальная приуроченность к определенным местообитаниям и узнаваемость видов позволяют использовать птиц в качестве биоиндикаторов состояния окружающей среды. Изменения условий обитания (сдвиги климатических показателей, химизм среды обитания, степень антропогенного пресса и др.) отражаются не только на организменном уровне, а также в популяционных и синэкологических характеристиках. Изучение трансформации видового состава, структуры сообщества птиц как ответа на воздействие антропогенных факторов и разработка методики применения структуры орнитоценоза в качестве биоиндикационного инструмента являются неизученными и представляют теоретический и практический интерес.

Структуру сообществ птиц изучали в Республиках Татарстан и Карачаево-Черкесии в 2017-2020 гг. методом линейного маршрутного учёта с учетом ширины полосы (Равкин, 1967) [1] на маршрутах различной степени антропогенной трансформации: условно не нарушенные, мало нарушенные, средней деградации; очень сильной деградации. Были определены: количественный и видовой состав, доля участия вида в населении птиц, плотность особей вида, общая плотность всех видов; эколого-фаунистический анализ проведен по Б.К. Штегману (1938) [2].

Структура орнитоценозов отражает степень антропогенного воздействия. Удобными, простыми в применении, способными дать оценку структуре орнитоценоза являются показатели: видовой состав, количество семейств, фаунистический состав, количество видов занесенных в Красную книгу, экологический комплекс, принадлежность к синантропному экологическому комплексу, ярус гнездования, тип питания, ярус питания, видовое богатство и кривая Уиттекера. Одним из достоверных методов оценки антропогенной нагрузки являются индексы видового богатства (Шеннона-Уивера, Маргалефа), они значимо выше на неизменных и слаботрансформированных территориях. Индекс синантропности растет с уровнем нагрузки. Территория города, благодаря высокой мозаичности биотопов, обладает экотонным эффектом, поэтому в крупных городах с разнообразными биотопами наблюдается отклонение от линейной зависимости по всем перечисленным выше показателям. К высокому уровню трансформации толерантны виды, гнездящиеся на земле, в кроне, в антропогенных укрытиях, дуплах. В биотопах с высокой антропогенной нагрузкой преобладает наземный ярус питания.

*Исследования проведены при поддержке Казанского (Приволжского) федерального университета.*

1. Равкин Ю.С. К методике учета птиц лесных ландшафтов // Природа очагов клещевого энцефалита на Алтае. - Новосибирск, 1967. - С. 66-75.
2. Штегман, Б.К. Основы орнитогеографического деления Палеарктики / Б.К. Штегман; Акад. наук СССР. - Москва; Ленинград, 1938. - 156 с.

## **СЕКЦИЯ 3 ХИМИЯ 21 ВЕКА**

## РЗЭ-СОДЕРЖАЩИЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ГЛИЦИДИЛОВЫХ ЭФИРОВ КИСЛОТ ФОСФОРА

Х.А. Ахмадиев, К.А. Андрианова, Л.М. Амирова

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань.*

*ahmadiev-hasan@mail.ru*

Исследования последних десятилетий показали перспективность использования полимерных композиционных материалов, легированных ионами редкоземельных элементов (РЗЭ), в качестве сенсоров различных химических веществ, температуры, напряжения, трещин и ударов. Ученые заинтересованы в создании пленок и композиционных конструкций для самолетов, состоящих из стойкого люминесцентного материала, при деформировании которых до порогового давления происходит явление эластомеханолюминесценции (ЭМЛ). Преимуществом ЭМЛ-датчиков является способность к беспроводному локальному и распределенному исследованию сооружений, которые могут обеспечить непрерывный контроль материалов в реальном времени [1]. В настоящее время такие сенсоры напряжения недостаточно изучены для практического применения, поэтому получение эпоксидных полимеров, допированных ионами редкоземельных элементов, и исследование их свойств является актуальной задачей.

В данной работе исследован процесс отверждения эпоксидных олигомеров в присутствии солей редкоземельных элементов (РЗЭ). Кинетика и механизм отверждения исследованы методами дифференциальной сканирующей калориметрии и ИК-спектроскопии. Спектры люминесценции жидких и отвержденных композиций, снимали на приборе Perkin Elmer LS 55. Показано, что отвержденные эпоксидные полимеры при введении солей некоторых РЗЭ, проявляют люминесцентные свойства. Получены РЗЭ содержащие эпоксидные полимеры с различной плотностью сшивки для возможности оценки изменения параметров люминесценции при различных величинах деформации и напряжения.

В работе показаны перспективы использования РЗЭ-содержащих эпоксидных композиций в качестве связующих для препрегов с контролируемым процессом отверждения или маркеров для мониторинга механолюминесценции в полимерных композиционных материалах.

1. B.P. Chandra, V.K. Chandra, S.K. Mahobia, P. Jha, R. Tiwari, B. Haldar. Real-time mechanoluminescence sensing of the amplitude and duration of impact stress. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2012, 9-16.

## STUDY OF FACILE SYNTHESIS OF $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> FROM DIFFERENT ALUMINUM HYDROXIDES METAPHASES

M.E. Farid, A.V. Boretskaya, A.A. Lamberov

*Alexander Butlerov Institute of Chemistry, Kazan Federal University, Kazan, 420008, Russia.*

*mostafaepri2013@gmail.com*

$\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> can be formed using different methods such as laser ablation, sol-gel, hydrothermal reactions, pyrolysis, sputtering, and pyrolysis [1]. Hydrolysis of alkoxide is generally carried out either in aqueous (water) or non-aqueous (alcohol) solvent [2]. Use of water as solvent is cost-effective, and hydrolysis reaction can be made in open system. In our present, we synthesized  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> from different metaphases from aluminum hydroxide (boehmite/bayerite/amorphous). The aim from our work is to study the optimum facile synthesis method of  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> using different effective factors such as water content, aging time and temperature. The synthesized aluminum hydroxide was calcined at 550°C to get  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. We did XRD analysis, TGA analysis and textural characteristics analysis for all the samples, and catalysis efficiency test for the best samples. The aluminum hydroxide was synthesized using aluminum isopropoxide (AIP) as a precursor. AIP was hydrolyzed by distilled water by different ratios started from (1AIP: 1.5 H<sub>2</sub>O) to (1AIP: 5 H<sub>2</sub>O). The hydrolyzed was done at room temperature for some samples and at 80 °c for other samples. The results showed that there was no significant difference in the textural characters of the prepared samples at room temperature or at 80°C, only the difference was in the content of the boehmite and amorphous phases. The only significant difference in the textural characters appeared in the samples after aging for many hours. Also, for all the synthesized samples there was no bayerite except when we studied the factor of aging at room temperature. Based on our results, it was found that the highest specific surface area (381 m<sup>2</sup>/g) for aluminum oxide is achieved as a result of hydrolysis of IPA at the conditions (IPA: H<sub>2</sub>O =1:3 and 80 ° C). The pore volume for this sample is 0,36 cm<sup>3</sup>/g.

1. D. Pathania, R. Katwal, and H. Kaur, *Int. J. Minerals, Metallurgy and Materials*, 2016,**23**, 358.
2. I. B. Singh, A. Gupta, S. Dubey, M. Shafeeq, P. Banerjee, A. S. K. Sinha, *J Sol-Gel Sci Technol*, 2016, **77**, 416–422.

## ТЕРМИЧЕСКИ ИНДУЦИРУЕМАЯ ТВЕРДОФАЗНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ ДИПЕПТИДА L-ЛЕЙЦИЛ- L-ВАЛИН

Ш.Р. Ахметшин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*akshamil2251@gmail.com*

Короткоцепные олигопептиды в настоящее время активно изучаются, благодаря своей способности к самосборке с образованием различных наноструктур и материалов. Материалы на основе олигопептидов биосовместимы и безопасны для окружающей среды, поэтому могут выступать в качестве хорошей альтернативы неорганическим наноматериалам. Наряду с линейными дипептидами также изучаются их циклические аналоги 2,5-дикетопиперазины (ДКП). Высокий интерес к этим соединениям связан с важной ролью, которую ДКП играли в зарождении и развитии ранней жизни. Эти молекулы имеют большой потенциал для биомедицинских и высокотехнологичных применений, поскольку они обладают высокой биоактивностью и могут использоваться для создания супрамолекулярных катализаторов межфазного переноса, а также органо- и гидрогелей.

Ввиду большого значения ДКП для различных технологий активно развиваются методы их получения, в том числе твердофазный синтез. Однако, подходы к изучению твердофазных реакций с участием биомолекул относительно хорошо разработаны только для аминокислот, но крайне незначительно для дипептидов, из которых можно получать циклические молекулы в одну стадию. Таким образом, изучение твердофазных реакций циклизации дипептидов представляет интерес для разработки методов получения практически важных дикетопиперазинов.

В данной работе совмещенным методом термического анализа было проведено кинетическое исследование реакции циклизации дипептида L-лейцил-L-валин в твердой фазе. Была определена критическая температура процесса. Кинетические параметры циклизации: энергия активации и логарифм константы Аррениуса, – были рассчитаны в рамках подходов неизотермической кинетики. Эти параметры можно использовать для прогнозирования оптимальных условий для синтеза циклических дипептидов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант №14.Y26.31.0019.*

## ГИБРИДНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ В СОСТАВЕ АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ ИММУНОСЕНСОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИМИПРАМИНА

А.Х. Багманова, Э.Р. Газизуллина, Д.В. Брусницын, Э.П. Медянцева

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*yasmin1103@mail.ru*

Наиболее популярными модификаторами в составе биосенсоров являются гибридные наноконпозиты, которые позволяют расширить диапазон определяемых концентраций и понизить нижнюю границу определяемых содержаний.

Увеличение чувствительности определения лекарственных препаратов связано с использованием в составе иммуносенсоров антител, которые специфичны к одному или к группе антигенов.

Для определения трициклического антидепрессанта имипрамина предложены амперометрические иммуносенсоры на основе электродов, модифицированных с фуллереном  $C_{60}$  в аминопроизводном на платформе полиэфирополиола и нанокластерами рения. В качестве аналитического сигнала использован пик от электрохимического окисления нанокластеров рения. В присутствии изучаемого лекарственного вещества (имипрамина) происходит уменьшение аналитического сигнала от нанокластеров.

Варьировали количество гибридных наноконпозитов и концентрацию антител на поверхности печатного графитового электрода.

Проведено исследование наномодификаторов методами атомно-силовой микроскопии, дифференциально-импульсной вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса.

Аналитические возможности показывают, что область рабочих концентраций при определении имипрамина иммуносенсором изменяется от  $1 \times 10^{-10}$  до  $1 \times 10^{-4}$  моль/л, нижняя граница определяемых концентраций до  $5 \times 10^{-11}$  моль/л.

Проведенные исследования указывают, что разработанные амперометрические иммуносенсоры перспективны и могут быть использованы для контроля содержания лекарственных соединений в биологических жидкостях.

## ЗАВИСИМОСТИ ЭНТАЛЬПИИ СУБЛИМАЦИИ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

И.С. Балахонцев, М.И. Ягофаров

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*jsyoutub@gmail.com*

Энтальпия сублимации – это теплота, требующаяся для перевода вещества из твердой фазы в газообразную при заданном давлении и температуре.

Часто при работе с энтальпией сублимации возникает потребность найти её значение при более высокой температуре, для чего используют уравнение Кирхгофа.

Расчет разности теплоемкостей газовой и твердой фазы связан с трудностями экспериментального характера. Одним из решений проблемы являются методы, позволяющие рассчитать разность теплоемкостей в процессе сублимации в виде линейной функции от термодинамической характеристики вещества. Первой была предложена линейная корреляция, связывающая разность теплоемкостей с теплоемкостью твердой фазы Чикосом и сотр. Коэффициент корреляции составляет 0,698 со стандартной ошибкой 33 кДж/моль [1].

Нами же предлагается другой способ расчета, который основывается на том, что энтальпия сублимации при заданной температуре есть сумма энтальпий испарения/сольватации и плавления/растворения. Рассматриваются только жесткие ароматические молекулы, для которых отсутствуют специфические взаимодействия в растворителях. Энтальпию сублимации при 298.15 К можно найти как разность энтальпии растворения кристалла и сольватации в бензоле. Последнюю можно рассчитать по аддитивной схеме [2].

С другой стороны, зная энтальпию испарения, мы можем найти разность теплоемкостей и рассчитать поправку на её изменение с температурой [3]. Так можно найти энтальпию испарения при температуре плавления. Далее эту величину можно сложить с энтальпией плавления при температуре плавления, которую определяют экспериментально. Таким образом, по данным об энтальпиях плавления при температуре плавления, сольватации и растворения в бензоле при 298.15 К можно найти энтальпию сублимации в широком диапазоне температур.

1. Chickos, James S, Hosseini, Sarah, Hesse, Donald G and Liebman, Joel F. Structural Chemistry, 1993, **4**, 271-278.
2. Solomonov, Boris N, Varfolomeev, Mikhail A, Nagrimanov, Ruslan N, Novikov, Vladimir B, Buzyurov, Aleksey V, Fedorova, Yulia V and Mukhametzhanov, Timur A. Thermochemica Acta, 2015, **622**, 88-96.
3. Yagofarov, Mikhail I, Bolmatenkov, Dmitrii N and Solomonov, Boris N. The Journal of Chemical Thermodynamics, 2021, **158**, 106443



## СРАВНЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ЖЕЛЕЗОКАЛИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЕГИДРИРОВАНИЯ, СОДЕРЖАЩИХ ЦЕРИАНИТ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ

А.П. Бебякина, А.В. Борецкая, А.А. Ламберов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*apbebyakina@gmail.com*

Железокалиевые катализаторы это – одни из важнейших систем в промышленном синтезе, поскольку активно применяются в процессе производства ценного мономера, стирола, в реакции дегидрирования этилбензола. Особенностью промышленных железокалиевых катализаторов дегидрирования является их многокомпонентный состав. В связи с растущим спросом на экономию энергии существует сильный стимул для проведения реакции при пониженном молярном соотношении пар / этилбензол, поскольку в процессе используется большое количество пара. Основными элементами данных катализаторов являются железо, калий и церий. Железо и калий формируют ферритные фазы, увеличивающие эксплуатационный срок, церий в составе церианита способствует повышению каталитической активности катализаторов. Известно, что свойства оксидов металлов определяются способом их получения. Поэтому целью данной работы является исследование влияния соединений церия на каталитическую активность железокалиевых катализаторов дегидрирования этилбензола в стирол.

В ходе работы были синтезированы модельные каталитические системы Fe-K-Ce, полученные методом мокрого смешения карбоната калия, гематита и одного из соединений церия с последующей сушкой, таблетированием и прокаливанием при 750 °С в течение 3ч. В качестве производных церианита были использованы соли церия:  $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ce}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3$  и  $\text{Ce}_2(\text{CO}_3)_3$ , и оксид церия ( $\text{CeO}_2$ ). Образцы исследовались методами рентгенофазового анализа, термогравиметрии, совмещенной с дифференциально-сканирующей калориметрией и были испытаны на лабораторной установке в реакции дегидрирования этилбензола в стирол в среде водяного пара.

В ходе работы получены результаты, из которых следует, что образец, приготовленный с использованием нитрата церия, обеспечивает наименьшее превращение этилбензола. При сравнении двух образцов на основе оксалата церия отмечено, что при использовании наиболее дисперсного предшественника (размер частиц ~32 мкм), процессы формирования фаз протекают наиболее интенсивно: размеры ОКР церианита выше и наблюдается формирование второй плоскости моноферрита калия. Данные факторы способствуют наиболее высокой степени превращения этилбензола в реакции дегидрирования.

**ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИТРИАЗОЛНЫХ ЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ  
ОКСИЭТИЛИРОВАННЫХ ННС-ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНОВ С АЗИДНЫМИ  
И ПРОПАРГИЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ  
АКТИВНОСТИ IN SITU КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ В РЕАКЦИИ КРОСС-  
СОЧЕТАНИЯ**

И.М. Богданов<sup>a</sup>, Р.И. Гарипова<sup>a</sup>, В.А. Бурилов<sup>a</sup>, Д.А. Миронова<sup>a</sup>, Э.Д. Султанова<sup>a</sup>,  
С.Е. Соловьева<sup>b</sup>, И.С. Антипин<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Российская  
Федерация, 420008, Казань, ул. Кремлевская, 18;

<sup>b</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,  
Российская Федерация, 420088, Казань, ул. Академика Арбузова, 8.

*ilshat.bogdanov.2018@mail.ru*

Одним из мощнейших методов в современном органическом синтезе являются реакции кросс-сочетания, катализируемые комплексами переходных металлов (чаще всего палладия). В последние 30 лет наибольшую популярность в качестве каталитических систем получили N-гетероциклические карбены (ННС), которые обладают сильной  $\sigma$ -донорной способностью, устойчивостью к влаге и кислорода воздуха, а также низкой токсичностью, по сравнению с традиционными фосфиновыми лигандами [1].

Объединение ННС на платформу каликсаренов дает возможность в расширении потенциала применения полученных на их основе *in situ* комплексов переходных металлов за счёт образования мицеллярных систем, способных проводить традиционные органические превращения в водных растворах [2].

В данной работе синтезированы новые амфифильные оксиэтилированные ННС-производные каликс[4]аренов с азидными/пропаргильными фрагментами. На основе этих макроциклов получены политриазольные частицы в условиях медь-катализируемой реакции азид-алкинового циклоприсоединения.

1. L.A. Schaper, S.J. Hock, W.A. Herrmann, F.E. Kuhn. *Chem. Int. Ed.*, 2013, **52**, 270-289.
2. L. Guo, Xi-Zh. Song, C.X. Lin, Q.Sh. Li, Ch. Liu, W.H. Wang, F.B. Xu. *Polyhedron*, 2015, **85**, 732-739.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДАВЛЕНИЙ ПАРА ПРОИЗВОДНЫХ АЦЕТАНИЛИДА МЕТОДОМ СВЕРХБЫСТРОЙ КАЛОРИМЕТРИИ

А.В. Бузюров

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*abuzurov95@gmail.com*

Производные ацетанилида известны своей биологической активностью [1]. Природа этой активности обусловлена межмолекулярными взаимодействиями, поэтому изучение их энергетических характеристик является важной задачей. Вместе с тем термодинамические данные о фазовых переходах, этих соединений очень скудны и зачастую противоречивы. Поэтому в своей работе, мы провели экспериментальное определение давлений пара, как можно в более широком температурном диапазоне, для этого класса веществ и рассчитали на их основе энтальпии фазовых переходов.

Для решения поставленной задачи нами был использован метод сверхбыстрой калориметрии (СК) [2], суть которого можно выразить следующим уравнением:

$$p_{\text{нас}} = \frac{1}{A_{\text{исп}}} \frac{dm}{dt} \frac{RT_{\text{исп}}}{\beta_c M_A} \quad (1),$$

где  $p_{\text{нас}}$  – давление пара изучаемого соединений в Па при температуре  $T_{\text{исп}}$  в К.;  $dm/dt$  – скорость потери массы в  $\text{г} \cdot \text{с}^{-1}$ , оцениваемая на основании разности теплостоемостей образца после и до процесса испарения/сублимации;  $A_{\text{исп}}$  – площадь поверхности испарения, в  $\text{м}^2$ ; определяемая при помощи оптического микроскопа;  $M_A$  – молярная масса в,  $\text{г} \cdot \text{моль}^{-1}$ ;  $R$  – универсальная газовая постоянная, равная  $8,314463 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ , и  $\beta_c$  – коэффициент массопереноса в газовой фазе, в  $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$ .

Подход на основе СК с одной стороны за счет огромных скоростей нагрева и охлаждения (до  $1000000 \text{ К} \cdot \text{с}^{-1}$ ) позволяет определять давления пара при температурах на десятки градусов выше температуры разложения образца, определенной низкоскоростными методами, а с другой, благодаря большому соотношению поверхности образца к объему, работать с крайне низколетучими веществами.

Полученные в работе данные для нескольких хорошо изученных производных были сопоставлены с литературой. Полученные отклонения во всех случаях не превышали ошибки экспериментов.

1. F. Casellato, et al. *Thermochim. Acta*, 1973, **6**, 361-368.
2. A.V. Buzyurov, et al. *Thermochim. Acta*, 2021, **706**, 179067.

## ВЛИЯНИЕ ПЕПТИЗАТОРА В ФАЗОВНЕОДНОРОДНОМ ГИДРОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ НА СТРУКТУРНЫЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

А.Д. Бурондасова, А.В. Борецкая, А.А. Ламберов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*annaburondasova@yandex.ru*

Активные оксиды алюминия широко используются в качестве адсорбентов, катализаторов и носителей катализаторов во многих нефтехимических процессах, таких как очистка фракций газойля, гидрообессеривание нефти, паровой риформинг углеводородного сырья, дегидратация спиртов и многих других. Каталитические свойства активных оксидов алюминия зависят от их кристаллической структуры и текстурных характеристик, которые определяются свойствами предшественников – гидроксидов алюминия.

Получение гидроксидов алюминия в промышленных условиях сопровождается формированием фазовнеоднородного гидроксида алюминия, содержащего кристаллическую (бемит и/или байерит) и аморфную фазы. Для улучшения реологических свойств при формовании, а также для регулирования текстурных и кислотных характеристик часто используют пептизаторы либо модификаторы (неорганические или органические кислоты либо их соли). Пептизация гидроксида алюминия органическими кислотами имеет ряд преимуществ перед пептизацией минеральными кислотами. В отличие от азотной кислоты, в частности, органические кислоты легко удаляются при последующем прокаливании гидроксидов. Кроме того, пептизация органическими кислотами изучена недостаточно, что стимулирует расширение знаний в этом направлении.

Был рассмотрен эффект, оказываемый природой кислоты (уксусной и лимонной) на текстурные характеристики гидроксида алюминия и образование пористой структуры, кислотные свойства поверхности и каталитические характеристики (в реакции парофазной дегидратации метилфенилкарбинола в стирол) оксидных катализаторов (типа  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ), полученных при прокаливании фазовнеоднородного гидроксида, пептизированного кислотой.

Выявлено, что использование в качестве пептизатора уксусной кислоты не несет значительных изменений текстурных характеристик гидроксида и оксида алюминия, однако, снижает прочность гранул оксида алюминия и увеличивает насыпной вес катализатора.

В свою очередь, применение лимонной кислоты препятствует агрегации частиц и способствует стабилизации их размера с формированием мономодальной пористой системы в оксиде алюминия, увеличению прочности гранул оксида алюминия и улучшению каталитических показателей в реакции дегидратации метилфенилкарбинола в стирол.

## ТИАКАЛИКС[4]АРЕНЫ С ГЕРАНИЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ НА НИЖНЕМ ОБОДЕ: СИНТЕЗ И ПОЛУЧЕНИЕ 2D НАНОСТРУКТУР В КРИСТАЛЛЕ

А.А. Вавилова, И.Э. Шиабиев, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*anelia\_86@mail.ru*

Целенаправленный синтез веществ, которые имеют сродство к фосфолипидным мембранам и способны к самоорганизации в монослои, является важной и актуальной задачей современной органической химии, а также имеет практическое применение в материаловедении и нанотехнологии. Функционализация платформы *n-трет*-бутилтиакаликс[4]арена терпеноидными фрагментами позволяет получать структуры с жестким каркасом и конформационно-подвижными заместителями, потенциально способных к самоорганизации.

В связи с этим было изучено взаимодействие *n-трет*-бутилтиакаликс[4]арена с геранилбромацетатом в ацетоне в присутствии карбонатов щелочных металлов. Целевые тетразамещенные *n-трет*-бутилтиакаликс[4]арены в конфигурации *конус* и *1,3-альтернат* были получены при использовании карбонатов натрия и цезия в качестве основания.

Структура и состав новых производных тиакаликс[4]арена были охарактеризованы методами ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии (ЭС) и элементным анализом. С помощью рентгеноструктурного анализа показано формирование двумерных наноллистов с мономолекулярным слоем из синтезированных тиакаликс[4]аренов. Методами DSC, PXRD и FSC установлено, что полученные макроциклы способны образовывать различные кристаллические полиморфы.

Таким образом, синтезированные стабильные полиморфы тиакаликс[4]аренов, образующие упорядоченную упаковку мономолекулярных 2D наноллистов, могут найти применение в наноматериалах и медицине для современной разработки фармацевтических препаратов и материалов нового поколения.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (НШ-2499.2020.3) и молодых российских ученых - кандидатов наук (МК-1279.2020.3).*

## КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

К.Ю. Виноградов, Р.В. Шафигулин, А.В. Буланова

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева,  
Самара.

winyur@yandex.ru

Методом теории функционала плотности (DFT) была смоделирована электрохимическая реакция восстановления кислорода на катализаторе, который может быть получен при допировании углеродного материала фталоцианинами [1] никеля, железа, кобальта и меди (Рис. 1.). Моделирование производилось при помощи программного обеспечения Gaussian 09 с использованием функционала b3lyp и базиса 6-31G\*. Для изучения был выбран ассоциативный механизм как преобладающий на данном типе активных центров [2].

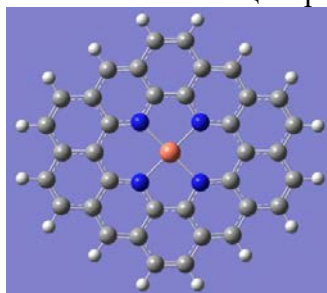


Рисунок 1 – Структура модельного катализатора. Серые сферы – углерод, синие – азот, белые – водород, оранжевый – исследуемый металл (Co, Fe, Ni или Cu).

В результате моделирования были получены энергетические профили реакции на графене и допированных образцах (Рис. 2). Выявлено, что центральный металл допанта сильно влияет на свойства получаемого материала. Среди изученных катализаторов наилучшие свойства продемонстрировал материал на основе фталоцианина кобальта, показав перенапряжение 0,5 В. Схожие, хоть и слегка уступающие характеристики показал и фталоцианин железа, что делает перечисленные два материала перспективными для дальнейшего практического исследования.

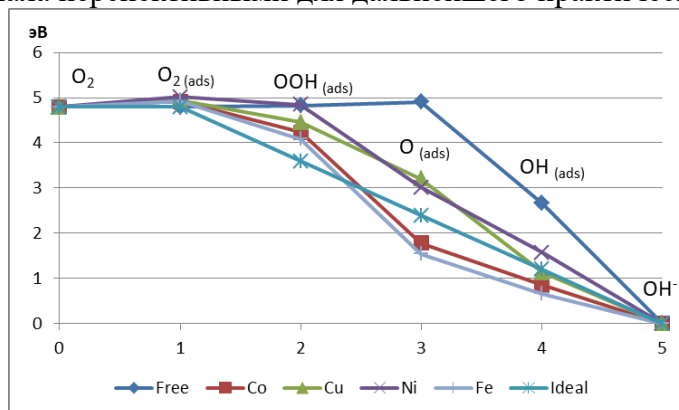


Рисунок 2 – Энергетический профиль ORR на исследуемых катализаторах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и рамочной программы БРИКС в рамках научного проекта № 19-53-80033

1. Dursun S., Akay R.G., Yazici M.S. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, V. 45, I. 60, P 34837-34844.
2. Yu L., Pan X., Cao X., Hu P., Bao X. *Journal of Catalysis*, 2011, V. 282, I. 1, P. 183-190.

## СИЛИКАТНЫЕ РУТЕНИЕВЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ В ПОЛЯРИЗАЦИОННОМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОМ ИММУНОХИМИЧЕСКОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ АМИТРИПТИЛИНА

Э.Р. Газизуллина<sup>а</sup>, Д.В. Брусницын<sup>а</sup>, Э.П. Медянцева<sup>а</sup>, С.В. Федоренко<sup>б</sup>, А.Р. Мустафина<sup>б</sup>

<sup>а</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>б</sup> КазНЦ РАН ИОФХ им. Арбузова, Казань.

*elvina1704@yandex.ru*

Для лечения депрессивных расстройств применяется фармакотерапия, основу которой составляют антидепрессанты, регулирующие активность биогенных аминов.

Мониторинг содержания антидепрессантов, в частности трициклических, в биологических материалах человека осуществляется в основном хроматографическими и масс-спектрометрическими методами.

Также актуально применение конкурентного гомогенного метода иммуноанализа – поляризационного флуоресцентного иммуноанализа (ПФИА), который позволяет экспрессно определять лекарственные соединения с высокой чувствительностью и селективностью, а также минимальной пробоподготовкой и использованием малых объемов проб и реагентов по сравнению с другими методами определения.

Проведено определение трициклического антидепрессанта амитриптилина с помощью ПФИА на фоне фосфатного буферного раствора с рН 7.5, модельной урины и грудного молока с относительным стандартным отклонением не более 0.035.

В качестве иммунореагентов использовались поликлональные антитела против трициклических антидепрессантов и трейсеры на основе нековалентно амитриптилин-модифицированных силикатных рутениевых наночастиц. Подобраны оптимальные концентрации трейсера и антител путем разведения. Согласно требованиям чувствительности трейсера выбрано оптимальное разведение, интенсивность флуоресценции которого 10-тикратно превышает фоновое значение. Диапазон рабочих концентраций амитриптилина составил  $1 \times 10^{-10}$  –  $1 \times 10^{-5}$  моль/л.

Полученные результаты являются перспективными для контроля содержания амитриптилина в биологических жидкостях для установления эффективности проводимых терапевтических назначений и в медико-криминалистических целях.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТЕКЛОВАНИЯ И РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ

А.М. Гайфутдинов, Л.М. Амирова, К.А. Андрианова

*КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, Казань.*

*amir\_gaifutinov@mail.ru*

Разработка и применение эпоксидных полимеров и композиций на их основе развиваются быстрыми темпами [1]. Широкий диапазон вязкостных свойств эпоксидных олигомеров позволяет получать на их основе связующие для различных технологических процессов: трансферных, автоклавных, препреговых и семипреговых технологий. В то же время эпоксидные смолы – это стеклующиеся жидкости с определенной склонностью к кристаллизации [2]. Изучение реологических свойств, процесса стеклования и кристаллизации эпоксидных олигомеров необходимо для прогнозирования их поведения в процессе хранения и переработки.

Целью работы было изучение процесса стеклования эпоксидных олигомерных системах для лучшей переработки олигомерных связующих в препреговых и семипреговых технологиях. В качестве объектов исследования были выбраны эпоксидиановые смолы различной молекулярной массы ЭД-8, ЭД-10, ЭД-16, ЭД-20, ЭД-22. Системы исследовали методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и реометрии.

В работе определены температуры стеклования эпоксидных олигомеров и зависимости температуры стеклования от скорости охлаждения и нагрева. Определены теплоемкости эпоксидных олигомеров в жидком и стеклообразном состояниях и зависимости теплоемкости от молекулярной массы, молекулярно-массового распределения и химической структуры. Исследованы реологические свойства эпоксидных олигомеров, в режиме осцилляции в зависимости от температуры и частоты.

1. Эпоксидные полимеры и композиции. / Чернин И. З., Смехов Ф. М., Жердев Ю. В.: Химия, 1982.
2. Krüger J.-K., Britz T., Baller J., Possart W., Neurohr H. Thermal glass transition beyond the Vogel-Fulcher-Tammann behavior for glass forming diglycidylether of bisphenol A // Physical review letters. – 2002. – Т. 89, № 28. – С. 285701.



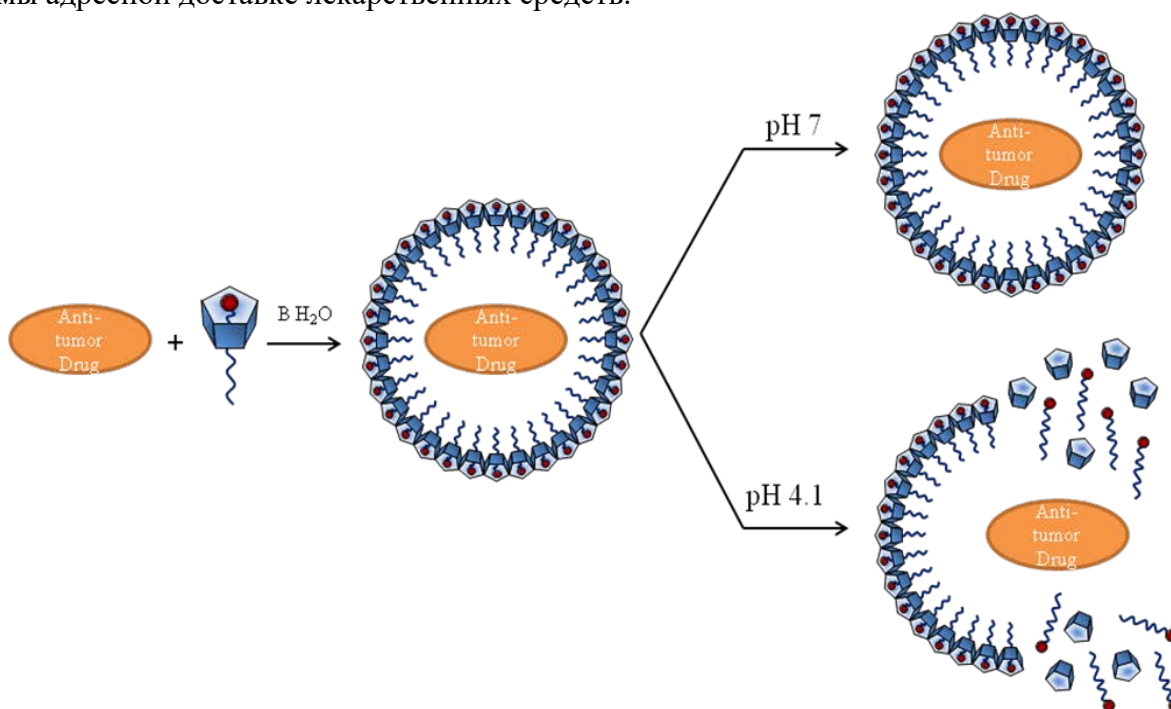
## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ АМФИФИЛЬНЫЕ МЕРОТЕРПЕНОИДЫ НА ПЛАТФОРМЕ ВОДОРАСТВОРИМОГО ПИЛЛАР[5]АРЕНА ДЛЯ КАПСУЛИРОВАНИЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ

А.А. Ахмедов, Д.Н. Шурпик, Р.Р. Гамиров, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*gamirov\_21@mail.ru*

В настоящее время интерес исследователей сфокусирован на природных соединениях и их аналогах. Меротерпеноиды являются природными соединениями [1] и благодаря низкой токсичности, биосовместимости и синтетической доступности все чаще находят применение в медицине. Однако высокое сродство к клеточным мембранам и здоровых, и раковых клеток не позволяет использовать эти соединения в адресной доставке лекарств из-за чрезмерно быстрого высвобождения доставляемого субстрата [1]. В связи с этим было предложено создать самособирающиеся системы на основе пиллар[5]аренов и синтетических меротерпеноидов, содержащих фрагменты терпенолов, которые могут быть использованы как универсальные системы адресной доставки лекарственных средств.



Методами турбидиметрии показано, что полученные системы не взаимодействуют с модельной клеточной мембраной при  $\text{pH} = 7.4$ , однако при  $\text{pH} = 4.1$  супрамолекулярные амфифилы на основе меротерпеноидов и пиллар[5]арена взаимодействуют с модельной клеточной мембраной. Характеристики супрамолекулярной самосборки, константы ассоциации и стехиометрия наиболее стабильных комплексов пиллар[5]арен / синтетический меротерпеноид были установлены методами УФ-видимой спектроскопии и динамического светорассеяния. Было показано, что супрамолекулярные амфифилы на основе систем пиллар[5]арен / синтетический меротерпеноид образуют монодисперсные ассоциаты в широком диапазоне концентраций. Включение противоопухолевого препарата 5-фтор-2'-дезоксифторидина (флоридина) в структуру супрамолекулярного ассоциата показано с помощью спектроскопии ЯМР  $^{19}\text{F}$  и 2D DOSY.

1. Y. Matsuda, I. Abe *Nat. Prod. Rep.* 2016, **33**, 26-53
2. Y. Koga, H. Morii *Biosci., Biotech., & Biochem.* 2005, **69**, 2019-2034.

## ЭЛЕКТРООКИСЛЕНИЕ СИНЕГО БЛЕСТЯЩЕГО FCF НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ НАНОСТЕРЖНЯМИ ДИОКСИДА МАРГАНЦА

Л.Т. Гимадутдинова, Г.К. Зиятдинова

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*liliya.gimadutdinova@gmail.com*

Синий блестящий FCF является синтетическим красителем, получившим широкое применение в текстильной, кожевенной, пищевой и косметической промышленности. Однако при высоких концентрациях он может оказывать негативное воздействие на здоровье человека. Поэтому необходим строгий контроль содержания этого красителя в готовой продукции, особенно продуктах питания, а в ряде стран использование синего блестящего FCF запрещено. Несмотря на проявляемую электрохимическую активность, краситель практически не рассматривается как объект анализа в электрохимических методах. Отдельные примеры показывают возможность определения синего блестящего FCF на модифицированных электродах, главным образом, углеродными наноматериалами. Поэтому дальнейшая разработка простых, чувствительных, селективных и надежных способов электрохимического определения синего блестящего FCF представляет актуальную задачу.

Показано, что синий блестящий FCF необратимо окисляется на стеклоуглеродном электроде при 0.94 В. Токи окисления составляют десятки нА, несмотря на достаточно высокую концентрацию аналита. Поэтому рассмотрены химически модифицированные электроды на основе оксидов металлов (наночастиц  $\text{CeO}_2 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  и наностержней  $\text{MnO}_2$ ). Показано, что использование наноматериалов обеспечивает улучшение формы вольтамперограмм и статистически достоверное увеличение токов окисления красителя. Наилучший отклик синего блестящего FCF регистрируется на электроде с наностержнями  $\text{MnO}_2$ . Электрод охарактеризован методами сканирующей электронной микроскопии, циклической вольтамперометрии и электрохимического импеданса.

Рассмотрено электроокисление синего блестящего FCF на модифицированном наностержнями  $\text{MnO}_2$  электроде и установлено, что процесс протекает необратимо, контролируется диффузией ( $D = (5.1 \pm 0.8) \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ ) и сопровождается переносом двух электронов без участия протонов. Коэффициент анодного переноса составляет 0.42. Стандартная гетерогенная константа скорости переноса электрона равна  $(3.7 \pm 0.4) \times 10^{-3} \text{ см/с}$ .

## СОВМЕСТНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛЮКОЗЫ И МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА И ПАЛЛАДИЯ

Ю.П. Добрынина, И.А. Гафиятова, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт  
им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия.*

*juliad99@mail.ru*

Глюкоза – незаменимый источник энергии для человека. В ходе гликолиза она превращается в лактат – соль молочной кислоты. Низкие уровни глюкозы в сочетании с высокими уровнями лактата указывают на наибольший риск развития острого повреждения почек и дисфункции печени, поэтому необходимо контролировать содержание этих соединений в биологических жидкостях. Для определения глюкозы и молочной кислоты используют различные физико-химические методы, в том числе вольтамперометрию с химически модифицированными электродами (ХМЭ).

В настоящей работе сопоставлена каталитическая активность частиц золота и бинарной системы на основе золота и палладия (Au-Pd), электроосажденных на поверхности стеклоуглеродного электрода (СУ), при окислении глюкозы и молочной кислоты с целью создания неферментативных сенсоров.

Установлено, что электролитические осадки золота и бинарной системы Au-Pd проявляют каталитическую активность по отношению к глюкозе и молочной кислоте. На вольтамперограммах их окисления на анодной ветви наблюдается один или два пика, высота которых зависит от концентрации органического соединения. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшение перенапряжения окисления субстратов на ХМЭ по сравнению с немодифицированным электродом. По сравнению с ХМЭ с частицами золота иммобилизация бинарной системы Au-Pd способствует повышению чувствительности на 1 порядок, а также стабильности каталитического отклика электрода, которая сохраняется в течение двух недель.

Показана возможность вольтамперометрического определения глюкозы и молочной кислоты при совместном присутствии на электроде с бинарной системой Au-Pd. Разность потенциалов пиков их окисления составляет более 500 мВ. Перекрестная активность модификатора в определяемом интервале концентраций для каждого из соединений.

Таким образом, ХМЭ на основе бинарной системы Au-Pd можно рекомендовать для вольтамперометрического определения глюкозы и молочной кислоты. Предлагаемый электрод имеет несомненные преимущества: низкая стоимость, простота методики приготовления и высокая стабильность отклика модифицированного электрода.

## ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И ТЕКСТУРА МЕМБРАННОЙ ФОЛЬГИ СПЛАВА Pd-Cu НА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ СТАДИЯХ ПРОКАТКИ

А.А. Антоненко<sup>a</sup>, А.И. Донцов<sup>a,b</sup>, А.П. Поправка<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж;

<sup>b</sup> Воронежский государственный технический университет, Воронеж.

*DontAlex@mai.ru*

Целесообразность применения тонкой фольги системы Pd-Cu состава, близкого к эквивалентному, для изготовления мембран глубокой очистки водорода обоснована кратно меньшей величиной энергии активации диффузии водорода в  $\beta$  – фазе в сравнении с  $\alpha$  – фазой [1]. Цель работы – сопоставление и обоснование текстуры мембранной фольги различной толщины, полученной способом прокатки. Исходную заготовку в виде слитка отжигали для гомогенизации твердого раствора, состав слитка Pd-55 ат Cu. Прокатку проводили в несколько этапов с промежуточными отжигами на вакуумируемом прокатном стане (стан DUO 320), до толщины фольги 20 мкм. Фазовый состав образцов исследовали методом рентгеновской дифрактометрии (ARL X'TRA, Anton Paar НТК-1200 N). Температурную зависимость фазового состава и текстуры выявили методом РД in situ при нагревании до 850 °С и охлаждении образца в вакууме. Наиболее общие закономерности для исходных (после деформации) образцов толщиной 300, 175, 100 и 20 мкм следующие: двухфазная структура с большей долей  $\beta$ -фазы; высокая дисперсность зерен  $\beta$ -фазы как следствие ее вторичности и возможности дискретного зарождения даже в пределах одного зерна  $\alpha$  – фазы; в большей доле текстура  $\langle 111 \rangle \alpha$  и в разной доле сопутствующие  $\langle 110 \rangle \beta$ ,  $\langle 112 \rangle \beta$ ,  $\langle 012 \rangle \beta$ . Сохранение в большой доле  $\alpha$  – фазы может быть следствием предварительного отжига при 850 °С и температурного режима на этой стадии процесса прокатки. Уже после одного цикла превращений для образцов всех толщин характерны общие закономерности: основная текстура  $\langle 110 \rangle$ , сопутствующие  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  – субмикроструктурная зеренная субструктура.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-19-00232).*

1. Алефельд Г., Фелькль М. /Водород в металлах // М. Мир перевод с англ. под ред. Когана Ю.М. 1991, Т.1, 475с

## ТЕХНОЛОГИЯ ПРОИЗВОДСТВА И ТЕПЛОВЫЕ ИСПЫТАНИЯ НОВОГО СТРОИТЕЛЬНОГО КИРПИЧА

А.И. Драцкая<sup>а</sup>, К.А. Осипов<sup>б</sup>

<sup>а</sup> МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область;

<sup>б</sup> ГБПОУ СПТ им. Б.Г.Музрукова, город Саров, Нижегородская область.

*ai.dratskaya@gmail.com*

Предлагается новая конструкция пустотелого строительного кирпича. Изучение нового пустотелого кирпича началось с геометрического расчёта. Был вычислен коэффициент пустотности по ГОСТу [1]. Новый пустотелый кирпич легче полнотелого кирпича на 38%. Было показано, что тремя типами новых кирпичей можно выполнять стандартные кладки стен. Кирпичи были отлиты из цемента [2]. Была изготовлена установка для тепловых испытаний и проведены тепловые испытания [3]. В новом кирпиче перегородка выполнена в виде ячейки Штейнера, то есть самой короткой линии, которая соединяет четыре вершины квадрата. На грани-постели стандартного кирпича размещены две такие перегородки. Возможны три варианта взаимной ориентации перегородок. Суть работы заключается в формировании единого вертикального воздушного столба и единой колонны из перегородок. Минимум материала и максимум воздуха обеспечивают улучшенную теплоизоляцию. Первые опытные образцы подтвердили эту гипотезу. Результаты испытаний бетонных кирпичей перенесены на перспективные огнеупорные шамотные кирпичи для доменных печей. Высказана гипотеза, что они будут на 12% лучше сохранять тепло, чем традиционные кирпичи с той же пустотностью. Начато изготовление опытных огнеупорных шамотных кирпичей. На заводе была заказана специальная форма для изготовления кирпичей. Затем были изготовлены специальные формы для производства опытных образцов. Организована команда для исследования и производства, выполнено 3D моделирование [4]. Подготовлен комплект электронной компьютерной документации для изготовления форм на станках с числовым программным управлением.

1. ГОСТ 530-2012 Кирпич и камень керамические. Общие технические условия.
2. А.И. Драцкая. Новый строительный кирпич. 17.08.2020. <https://youtu.be/APZbJ1ati-I>
3. А.И. Драцкая. Тепловые свойства кирпичей. 01.09.2020. <https://youtu.be/bQzxxKt003M>

## АНИЗОТРОПИЯ ЖЁСТКОСТИ ЯЧЕЙКИ ШТЕЙНЕРА В НОВОМ КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ

А.И. Драцкая

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*ai.dratskaya@gmail.com*

Объект исследования - новый композиционный материал [1]. Материал изучается на основе мыльных плёнок. Они самые лёгкие и прочные, поэтому такая форма рёбер мыльных плёнок должна быть у арматуры перед заливкой наполнителем. Показано решение задачи самого лёгкого армирования не только квадрата, как у Штейнера, но и куба – это 13 отрезков. Арматурные ячейки Штейнера по-разному изгибаются в разных направлениях. Доказана анизотропия жёсткости, получены численные результаты. По этим данным изготовлено несколько образцов композиционного материала. Предложена технология эпоксидного литья в парафиновые формы. Квадратная ячейка Штейнера – это 5 отрезков, которые соединяют 4 вершины квадрата самой короткой линией. Полученные короткие линии не полностью симметричны. Это значит, что ячейка Штейнера анизотропна по прочности и жёсткости. В разных направлениях она по-разному будет изгибаться. Цель работы – создание нового легкого и прочного композиционного материала. Ячейка Штейнера – это силовая арматура, которую надо залить эпоксидной смолой. Арматура будет самой лёгкой, потому что ячейка Штейнера самая короткая. Это математическая основа нового лёгкого композиционного материала. Новая задача – как соединить множество ячеек Штейнера между собой в новом материале. Две квадратные ячейки можно соединить двумя способами, прочность и жёсткость материала будет различной. Было изготовлено несколько образцов новых композиционных с квадратными ячейками Штейнера. У новых материалов различная гибкость. Можно заранее предсказать гибкость новых композиционных материалов.

1. Драцкая А.И. Геометрические формы новых композиционных материалов на основе мыльных плёнок / V Международный конкурс научно-исследовательских и творческих работ учащихся «Старт в науке V», февраль-май 2018 г. – М.: Российская Академия естествознания (РАЕ), 2018. <http://files.school-science.ru/pdf/5/35386.pdf>

## СИНТЕЗ С-30-ГАЛОГЕН- И АЗИДОПРОИЗВОДНЫХ БЕТУЛИНА

И.А. Ерашов<sup>a</sup>, А.В. Немтарев<sup>a,b</sup>

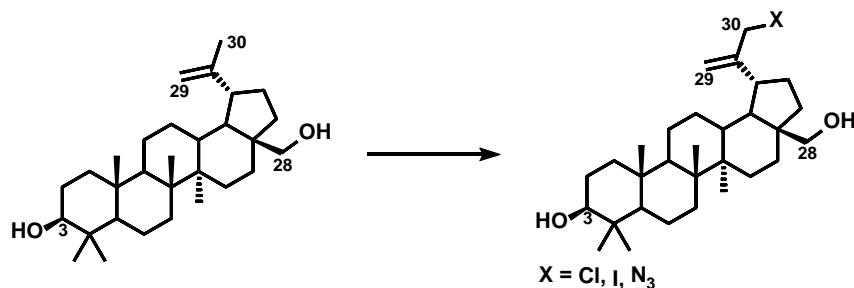
<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> ИОФХ им.А.Е.Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань.

*sherlock.dewitt@gmail.com*

Тритерпеноиды – многочисленный класс природных соединений, характеризующийся широким спектром биологической активности. Учитывая доступность ряда пентациклических тритерпеноидов, разработка способов их выделения и индивидуализации с последующей химической модификацией является перспективным направлением современной органической химии.

В работе представлен материал по синтезу С-30 модифицированных производных бетулина, содержащих галогены и азидогруппу.



Реакции аллильного галогенирования бетулина в положении С-30 позволяют получить ценные прекурсоры для синтеза практически значимых производных [1].

Реакция бетулина с дихлоридом селена в среде хлороформа позволяет (в зависимости от условий) получать С-30-хлор- или С-30-дихлор-производные. Моноиодирование бетулина избытком иода в среде ДМФА [2] позволяет быстро получить С-30-иодпроизводное бетулина, перспективное в качестве прекурсора в реакциях нуклеофильного замещения.

1. Курский Ю.А., Бодриков И.В., Чиянов А.А., Бажан Л.И. *ЖОрХ*. 2017, **53**, 301-302.

2. S.V. Yemets, T.E. Shubina, Pavel A. Krasutsky Electrophilic monoiodination of terminal alkenes // *Org. Biomol. Chem.* 2013. №**11**. С. 2891–2897

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫХ ТРИФЕНИЛМЕТАНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ ДЛЯ ОДНОВРЕМЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЕНОЛЬНЫХ АНТИОКСИДАНТОВ

А.С. Жупанова, Г.К. Зиятдинова

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*Zhupanova.Nastya@mail.ru*

В современной электроаналитической химии большое внимание уделяется созданию сенсоров, дающих отклик на фенольные антиоксиданты. При этом делается акцент на возможность их одновременного определения. Для решения этой задачи активно используются вольтамперометрические сенсоры на основе полимерных материалов. Среди них следует выделить электрополимеризованные покрытия на основе красителей трифенилметанового ряда, содержащие в своей структуре фенольные фрагменты. Электрополимеризация таких красителей приводит к формированию непроводящих покрытий. Поэтому для обеспечения достаточной проводимости электрода в качестве подложки предложено использовать углеродные наноматериалы (нановолокна, нанотрубки).

Впервые созданы вольтамперометрические сенсоры на основе функционализированных полиаминобензолсульфоновой кислотой одностенных углеродных нанотрубок и электрополимеризованных трифенилметановых красителей (алюминона и бромкрезолового пурпурного) для одновременного количественного определения природных фенольных антиоксидантов (флаванонов (гесперидина и нарингина), а также феруловой кислоты и ванилина). Найдены условия потенциодинамической электрополимеризации красителей, обеспечивающие наилучший отклик пар целевых аналитов. Сенсоры охарактеризованы методами СЭМ, циклической вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса.

Разработанные сенсоры характеризуются высокой чувствительностью и селективностью отклика на рассматриваемые пары фенольных антиоксидантов, в том числе в присутствии других природных фенолов, что является важным преимуществом перед существующими методами. Подходы успешно применены в анализе реальных образцов (цитрусовых соков и экстрактов ванили).

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.*



## ЭКСТРАКЦИЯ МЕДИ N-(ДИГЕКСИЛФОСФОРИЛМЕТИЛ)-N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)ОКТИЛАМИНОМ

Закиров А.М., Мирзаянов И.И., Гарифзянов А.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*artemzakirov.mail@gmail.com*

В связи с ежегодным увеличением спроса на добычу металлов, возникает необходимость поиска новых методов их добычи, а также разработка и совершенствование методов их вторичной переработки. Одними из технологий, позволяющих осуществлять концентрирование металлов из отходов кислых растворов различных производств, являются технологии экстракции, в том числе с использованием жидких мембран. В настоящей работе произведено изучение процессов жидкостной и мембранной экстракции с использованием N-(дигексилфосфорилметил)-N-(карбоксиметил)октиламина [1].

При исследовании жидкостной экстракции меди произведено изучение влияния соотношения компонентов смеси керосин – 2-этилгексанол на степень извлечения металла из водной фазы в органическую. Установлено, что при содержании менее 25% объёмной доли спирта наблюдается образование твердой фазы, что может осложнить дальнейшую миграцию ионов меди в объеме мембраны. Поэтому в качестве мембранного растворителя использовалась смесь керосин – 2-этилгексанол (1:1).

В экспериментах с мембранной экстракцией произведено изучение зависимости проницаемости мембраны, импрегнированной 0.1 М раствором переносчика, от концентрации кислоты в принимающей фазе, а также зависимости проницаемости мембраны от pH отдающей фазы. Показано, что оптимальные условия концентрирования меди достигаются при концентрации серной кислоты 0.5 М, а pH отдающей фазы 5.7.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90235.*

1. И.И. Мирзаянов, А. Ю. Лихачева, А.Р. Гарифзянов, Р. А. Черкасов. *III Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» (Сб. тезисов)*, 2018, 269.

## ЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ ПОЛИМЕРНАЯ КОМПОЗИЦИЯ НА ОСНОВЕ СВИНЦОВО-ГАЛОГЕНИДНЫХ (ПЕРОВСКИТНЫХ) КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

К.С. Зимин, А.Н. Солодов, Д.А. Балькаев

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*kostzim@list.ru*

В последние годы свинцово-галогенидные (перовскитные) квантовые точки заинтересовывают исследователей за счет ряда преимуществ перед аналогичными традиционными квантовыми точками неорганических полупроводников. Применение квантовых точек для светоизлучающих устройств или люминесцирующих изделий привлекает большое внимание из-за их уникальных оптических свойств [1]. Преимущества перовскитных квантовых точек перед аналогичными органическими люминофорами в том, что у них легко настраиваемая длина волны излучения, гораздо выше квантовый выход люминесценции, который достигает значения более 90% [2] и узкий пик излучения. Но самым важным недостатком перовскитных квантовых точек является их проблема с устойчивостью к воздуху и воде [3], под их воздействием снижается эффективность квантовых точек вплоть до полного гашения люминесценции. Для решения этой проблемы предлагается использовать полипропилен в качестве матрицы, в которой будут равномерно распределены квантовые точки. Применение термопласта значительно повышает стабильность квантовых точек, а также облегчает их синтез и в последующем позволяет перерабатывать полученную композицию в изделия методами литья или послойного наплавления (FDM) 3Д печати. Помимо этого, композиция может применяться в оптоэлектронной промышленности для производства подсветок дисплеев и светодиодов [1].

1. Protesescu L. et al. Nanocrystals of cesium lead halide perovskites (CsPbX<sub>3</sub>, X= Cl, Br, and I): novel optoelectronic materials showing bright emission with wide color gamut //Nano letters. – 2015. – Т. 15. – №. 6. – С. 3692-3696.
2. Xie R. J. et al. On the performance enhancement of nitride phosphors as spectral conversion materials in solid state lighting //ECS Journal of Solid State Science and Technology. – 2012. – Т. 2. – №. 2. – С. R3031.
3. Grätzel M. The light and shade of perovskite solar cells //Nature materials. – 2014. – Т. 13. – №. 9. – С. 838-842.

## СИНТЕЗ АМФИФИЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЩЕТОК, СОДЕРЖАЩИХ БЛОКИ ПОЛИМЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

И.В. Иванов, А.В. Кашина, Н.Н. Богорад, А.В. Якиманский

*Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург.*

*gangspil@gmail.com*

В последние годы активно развивается синтез и изучение свойств амфифильных сополимеров, способных к самоорганизации в селективных растворителях. Образующиеся в растворах наноструктуры обладают высокой чувствительностью к внешним воздействиям, под действием которых они могут формироваться или разрушаться в результате изменения конформаций макромолекул. Такое поведение в растворах делает амфифильные сополимеры перспективными для использования в системах для адресной доставки лекарств.

Данное исследование посвящено синтезу амфифильных молекулярных щеток с гидрофобной полиимидной (ПИ) основной цепью и гидрофильными боковыми цепями полиметакриловой кислоты (ПМАК). Для синтеза целевых молекулярных щеток проводили полимеризацию *трет*-бутилметакрилата (ТБМА) способом «прививка от» методом контролируемой радикальной полимеризации с переносом атома (ATRP) на мультицентровом ПИ макроинициаторе. Далее в результате кислотного гидролиза ТБМА звеньев боковых цепей получали привитые сополимеры с гидрофильными звеньями полиметакриловой кислоты в боковых цепях. Проведено изучение различных механизмов инициирования полимеризации ТБМА на ПИ макроинициаторе методом ATRP под действием каталитических комплексов на основе солей меди и железа.

На основе кинетических исследований и определения молекулярно-массовых характеристик продуктов полимеризации определены условия синтеза молекулярных щеток в контролируемом режиме.

Синтезирован ряд амфифильных молекулярных щеток, различающихся длиной и плотностью прививки боковых цепей полиметакриловой кислоты. Изучена зависимость растворимости синтезированных сополимеров в водных и водно-спиртовых средах от структурных параметров и методом динамического рассеяния света исследовано поведение макромолекул в селективных растворителях.

## МЕХАНИЧЕСКОЕ РАЗВОРАЧИВАНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛЫ АМФИФИЛЬНОГО ГРЕБНЕОБРАЗНОГО СОПОЛИМЕРА

А.С. Иванова, А.А. Полоцкий

*Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Россия.*

*sasinaas@yandex.ru*

Амфифильные гребнеобразные сополимеры, макромолекулы которых состоят из двух типов сильно различающихся по природе и свойствам цепей – сольвофобных и сольвофильных, представляют большой интерес благодаря своей способности к самоорганизации в селективных растворителях, а также возможности контролируемо в широких пределах варьировать структурные параметры.

Настоящая работа посвящена теоретическому изучению механического разворачивания макромолекулы амфифильного гребнеобразного сополимера с сольвофильной основной цепью и сольвофобными боковыми цепями в селективном растворителе методом самосогласованного поля Схойтенса-Флира. Параметр Флори взаимодействия полимер - растворитель  $\chi = 2$  для боковых цепей, для основной цепи  $\chi = 0$  - атермический растворитель. Было изучено влияние комплекса параметров - длины  $n$  и плотности прививки  $m$  при постоянном их соотношении  $n/m = const$ , то есть постоянстве числа боковых цепей в мицелле, на характер растяжения и конформационные изменения в системе.

Показано, что при растяжении в макромолекуле происходит микрофазовое разделение, и в равновесии сосуществуют глобулярная “голова” и растянутый “хвост”, на котором расположены небольшие кластеры из нескольких боковых цепей. Кривая деформации имеет пилообразную форму, что связано с выходом кластеров из “головы”. Получены зависимости общего количества кластеров, числа звеньев боковых цепей в большой мицелле/“голове” и среднего агрегационного числа кластеров от расстояния между концами основной цепи. Показано, что при полностью растянутой основной цепи число мицелл, образующихся на “хвосте”, уменьшается с увеличением длины боковых цепей и, соответственно, расстоянием между боковыми цепями, при этом значение агрегационного числа кластеров при постоянном соотношении длина /плотность прививки боковых цепей имеет близкие значения.

## ПРИСОЕДИНЕНИЕ ИМИДОВ И ГИДРОФОСФОРИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ К МЕТИЛПРОПИОЛАТУ

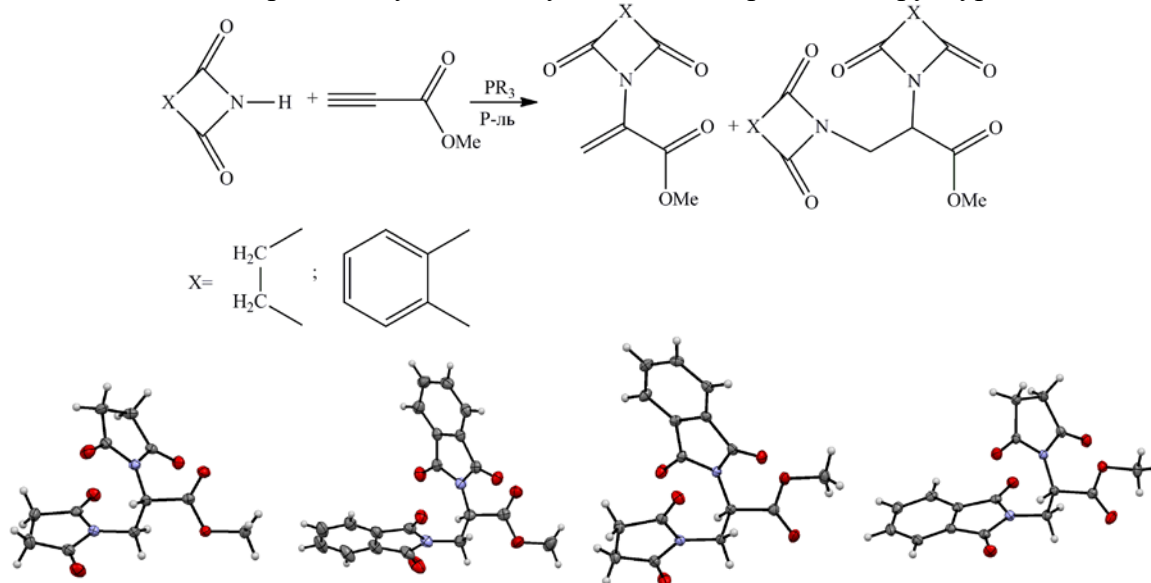
Э.Р. Калимуллина, А.Д. Фризен, А.В. Ильин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

*antonilin.1989@mail.ru*

Производные имидов двухосновных карбоновых кислот хорошо известны в литературе, и проявляют ряд полезных свойств, а уникальный синтетический потенциал фосфин-катализируемых реакций за последние годы привел к открытию большого числа новых химических превращений с участием непредельных электрофильных соединений, обогатив арсенал органического синтеза удобными методами конструирования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом.

В ходе данного исследования были разработаны методы фосфин-катализируемого  $\alpha$ -моно- и вицинального бисприсоединения имидов дикарбоновых кислот к метилпропиолату. Реакции бисприсоединения могут быть проведены постадийно с использованием на каждой стадии различных пронуклеофилов. Благодаря различной реакционной способности соединений, использованию различных растворителей и третичных фосфинов, можно контролировать региоселективность данных реакций. Для продуктов бисприсоединения имидов двухосновных карбоновых кислот к метилпропиолату были получены данные рентгеноструктурного анализа.



Структуры продуктов бисприсоединения имидов по данным РСА.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-1822.2020.3

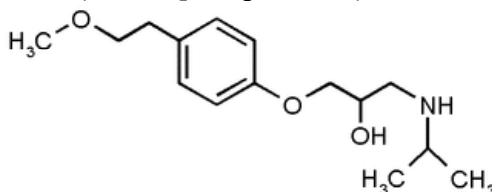
## ВОЗМОЖНОСТИ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА В АНАЛИЗЕ МЕТОПРОЛОЛА

А.И. Каменская, Ю.Г. Кураева, Л.А. Онучак

ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика  
С.П. Королева», Самара.

*alinagalymova@mail.ru*

В работе рассмотрены возможности применения метода капиллярного зонного электрофореза (КЗЭ) в анализе лекарственного препарата метопролола((±)-1-[4-(2-метоксиэтил)фенокси]-3-[(1-метилэтил)амино]-2-пропанол):



Исследования проводились на системе капиллярного электрофореза «Капель 105М» со спектрофотометрическим детектором. В условиях КЗЭ установлены закономерности миграции метопролола в зависимости от рН, ионной силы ведущего электролита и величины приложенного напряжения. Показано, что на эффективность процесса существенное влияние оказывают концентрация ведущего электролита и напряжение. На основании проведенных исследований выбраны условия количественного определения действующего компонента в готовых таблетированных формах (0,05 М боратный буферный раствор (рН 9,18); 20 кВ; 20°C; 220 нм; кварцевый капилляр 75 мкм, 60/50 см). Линейный диапазон определяемых концентраций оценивали путем построения градуировочной прямой по шести точкам. При определении содержания основного действующего вещества в таблетированных формах для оценки правильности измерения  $\delta$  использовали способ «введено–найдено»,  $\delta = 1$  %. На примере четырех образцов готовых лекарственных форм показана возможность количественного определения метопролола.

*Работа выполнена при поддержке гранта № FSSS-2020-0016 в рамках выполнения госзадания Министерства образования и науки Российской Федерации.*

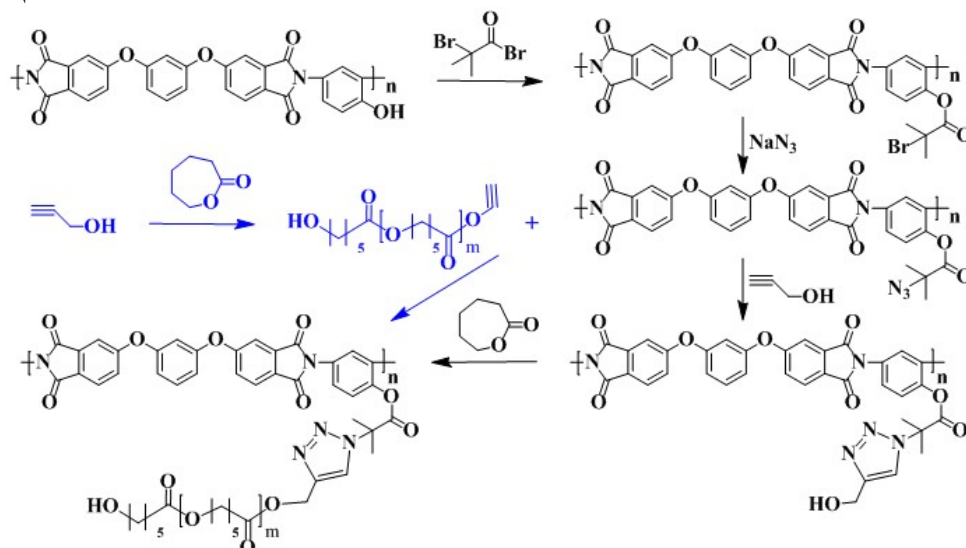
## ПРИВИТЫЕ СОПОЛИМЕРЫ С ПОЛИИМИДНОЙ ОСНОВНОЙ ЦЕПЬЮ И БЛОКАМИ ПОЛИ( $\epsilon$ -КАПРОЛАКТОНА) В БОКОВЫХ ЦЕПЯХ

А.В. Кашина, И.В. Иванов, Т.К. Мелешко, Н.Н. Богорад, А.В. Якиманский

Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук, Санкт-Петербург.

kashina.anna@mail.ru

Разработан подход к синтезу новых полимерных молекулярных щеток с полиимидной основной цепью и боковыми цепями поли( $\epsilon$ -капролактона) (ПИ-прив-ПКЛ). Для получения таких сополимеров была использована комбинация поликонденсации, полимеризации с раскрытием цикла (ROP) и Cu(I) катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения (CuAAC). Сравнивали два пути синтеза: (1) с использованием полимер-аналогичных превращений мультицентрового ПИ макроинициатора с иницирующей гидроксильной группой, отделенной от основной цепи триазольным циклом и проведении на нем полимеризации с раскрытием цикла или (2) предварительный синтез макромономеров с желаемыми функциональными группами (полиимида с азидными группами и ПКЛ с концевыми алкиновыми группами) и последующее проведение реакции клик-химии.



Было показано, что первый подход позволяет получать привитые сополимеры с основной ПИ цепью и относительно короткими боковыми цепями ПКЛ. В то время как реализация второго подхода приводит к более значительному увеличению молекулярной массы, но побочным продуктом реакции остается непрореагировавший линейный ПКЛ.

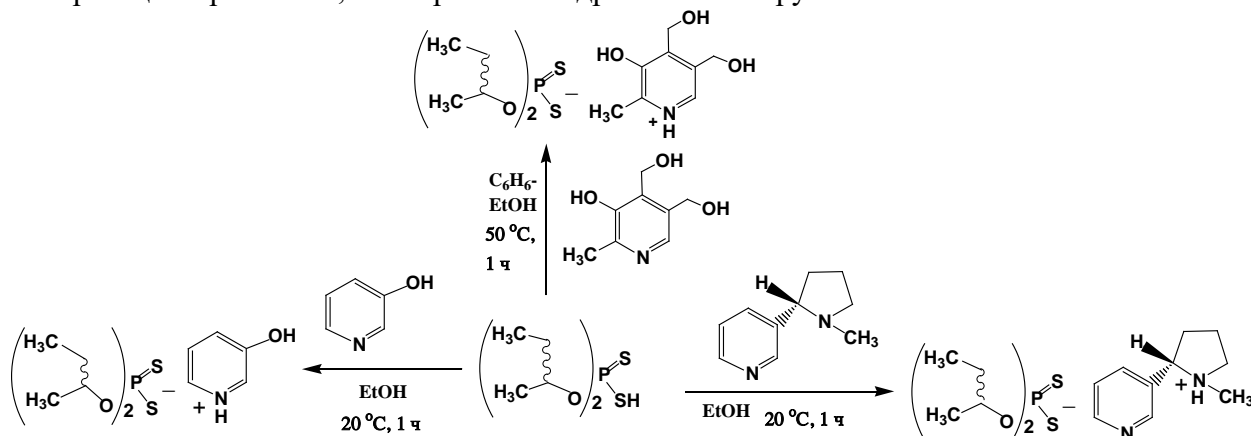
## ХИРАЛЬНЫЕ СОЛИ ДИТИОФОСФОРНЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ РАЦЕМИЧЕСКИХ СПИРТОВ И ПИРИДИНОВЫХ АЛКАЛОИДОВ

Е.С. Кобелева, О.В. Шильникова, И.С. Низамов, Р.А. Черкасов, И.Д. Низамов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

isnizamov@mail.ru

Актуальность работы обусловлена необходимостью создания новых antimicrobных препаратов на основе доступного дешевого сырья, в качестве которого могут выступать синтетические хиральные спирты. На основе рацемических бутанола-2 и 2-этилгексанола нами синтезированы хиральные дитиофосфорные кислоты и их соли, которые по antimicrobной активности в ряде случаев не уступают соединениям на основе энантимерно чистых спиртов. Для получения биологически активных солей использованы такие азотистые органические соединения, как пиридоксин, (*S*)-(-)-никотин и 3-гидроксипиридин. Установлено, что в реакциях с пиридоксином, (*S*)-(-)-никотином и 3-гидроксипиридином получены хиральные соли дитиофосфорных кислот на основе бутанола-2 и 2-этилгексанола в мягких условиях в этаноле. Данные реакции протекают, не затрагивая гидроксильные группы.



Проведен скрининг на antimicrobную активность хиральных солей дитиофосфорных кислот на тест-культурах микрофлоры гель-диффузионным методом. Установлено, что испытанные соединения проявляют высокую бактерицидную активность в отношении *Bacillus cereus* (с зоной подавления роста микроорганизмов 42 мм) и выраженную фунгицидную активность по отношению к *Candida albicans* (ATCC 885-653) (24 мм).



## ПРОСТОЙ DFT ПОДХОД РАСЧЕТА $^{13}\text{C}$ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР В НИКЕЛЕВЫХ КОМПЛЕКСАХ

С.А. Кондрашова

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань.*

*kondrashovamail@gmail.com*

Комплексы переходных металлов занимают особое место, так как некоторые из них проявляют каталитическую активность в химических и биохимических процессах и, таким образом, являются основой для разработки новых катализаторов. Для рационального дизайна таких систем необходимо знать их трехмерную структуру, особенно в растворах. В этом отношении современные корреляционные ЯМР эксперименты эффективны, но и они имеют свои ограничения и поэтому поиск дополнительных инструментов очень актуален. С этой точки зрения неэмпирические расчеты химических сдвигов (ХС) ЯМР атомов  $^{13}\text{C}$ , особенно непосредственно связанных с переходным металлом, могут быть очень информативны как с точки зрения установления структуры, так и для анализа деталей электронной структуры координационной связи в таких комплексах.

Целью настоящей работы является разработать простой DFT метод, который можно использовать для расчетов  $^{13}\text{C}$  ХС в диамагнитных Ni комплексах. Было установлено, что ЯМР ХС атомов углерода непосредственно связанных с Ni могут быть рассчитаны в рамках теории Кона-Шэма с использованием ряда гибридных функционалов [1]. Процедура линейного скалирования значительно улучшает результаты (RMSE = 4,0-4,6 м.д.). В комплексах Ni, скоординированных с растворителем или противоионами, корреляция несколько хуже (RMSE = 6,4 м.д.). В Ni-дииминных алкиновых комплексах имеется недооценка экранирования (на 7-10 м.д.) возможно из-за вклада высокоспиновых состояний. С осторожностью надо подходить при использовании различных эмпирических корреляций и закономерностей, так как они могут приводить к ошибочным выводам.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Татарстан в рамках научного проекта №18-43-160003.*

1. S. A. Kondrashova, F. M. Polyancev, Y. S. Ganushevich, Sh. K. Latypov. *Organometallics*, 2021, **40**, 11, 1614-1625.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАЦЕТАМОЛА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ КОМПОЗИТОМ НА ОСНОВЕ НАФИОНА И ЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Д.А. Коряковцева, И.А. Челнокова, К.С. Арсентьева, Л.Г. Шайдарова, Г.К. Будников

*Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, г. Казань.*

*koryakovtzeva\_darya@mail.ru*

Лекарственные средства на основе парацетамола (ПЦ), облегчающие симптомы простудных заболеваний и гриппа, сегодня широко распространены в аптечной сети.

Учитывая рост поступающих в продажу лекарственных средств, возникла необходимость в разработке новых экспрессных методов анализа активных компонентов, входящих в их состав. Для решения данной задачи подходит метод вольтамперометрии с химически модифицированными электродами (ХМЭ), отличающийся высокой чувствительностью, простотой выполнения анализа и относительно недорогим оборудованием.

Изучена каталитическая активность иммобилизованных на поверхность стеклоуглеродного электрода (СУ), частиц золота (Au), а также их композита на основе нафiona (Au-НФ) при окислении ПЦ. Установлена возможность применения данного способа для количественного определения ПЦ в лекарственных средствах.

В кислой среде окисление ПЦ на немодифицированном СУ происходит необратимо, регистрируемый сигнал плохо воспроизводим.

Использование электродов, модифицированных частицами металлов, приводит к улучшению формы сигналов, смещению потенциала и регистрации четко выраженных пиков при потенциалах окисления модификатора. Высота сигнала линейно связана с концентрацией ПЦ в растворе. Регистрируемый ток контролируется кинетикой химической реакции. Рассчитанная величина каталитического эффекта (отношение каталитического тока к току окисления модификатора) показывает, что при окислении ПЦ композитный электрод Au-НФ проявляет наибольшую каталитическую активность по сравнению электродом, модифицированным частицами золота. При этом каталитический отклик этого ХМЭ отличается высокой стабильностью и воспроизводимостью.

Полученные результаты использованы для разработки селективного вольтамперометрического способа определения ПЦ в лекарственных средствах. Использование ХМЭ по сравнению с немодифицированным СУ позволяет повысить чувствительность определения и снизить нижнюю границу определяемых содержаний на 2-3 порядка. Правильность методик оценена методом введено-найдено. Относительное стандартное отклонение ( $S_r$ ) не превышает 5 % во всем диапазоне исследуемых концентраций. Разработанный способ апробирован при анализе лекарственных средств.

## СИНТЕЗ НОВЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕЦЕПТОРОВ НА КАЛИКС[4]АРЕНОВОЙ ПЛАТФОРМЕ С ОБРАЗОВАНИЕМ ОСНОВАНИЙ ШИФФА

Г.В. Коноров<sup>a,b</sup>, А.С. Агарков<sup>a,b</sup>, А.С. Овсянников<sup>a,b</sup>, С.Е. Соловьева<sup>a,b</sup>, И.С. Антипин<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия;

<sup>b</sup> Институт Органической и Физической Химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский Научный Центр, Российская Академия Наук, Казань, Россия.

ggggg.kkkkk.g@mail.ru

Одной из наиболее развитых и перспективных областей органической химии является дизайн, синтез и применение молекул, способных к молекулярному распознаванию. Одним из наиболее привлекательных объектов для изучения межмолекулярного связывания, комплексов включения и селективности являются каликс- и тиакаликс[*n*]арены. В зависимости от химических свойств групп и структурных элементов данных макроциклов они могут распознавать и связывать как ионы различных металлов, так и некоторые органические соединения. В качестве таких функциональных групп, перспективными являются основания Шиффа. Было установлено, что многие основания Шиффа проявляют биологическую активность; кроме того, они используются в качестве стабилизаторов в UV-свете, двойная связь N=C открывает возможности их использования в качестве фотопреобразователей и сенсоров с чувствительностью к электромагнитному излучению в широком диапазоне длин волн. Синтетическая легкость их получения, а также высокая доступность исходных реагентов делают эти соединения чрезвычайно привлекательными для получения новых полифункциональных молекулярных систем (Схема 1).

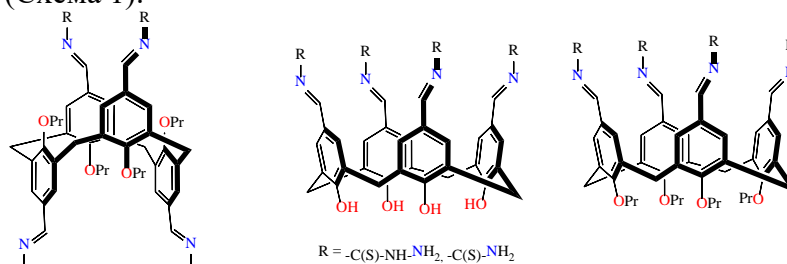


Схема 1. Основания Шиффа на каликс[4]ареновой платформе.

По результатам работы выполнен синтез и характеристика новых оснований Шиффа на основе тетраформилпроизводных каликс[4]аренов и их характеристика с помощью методов физико-химического анализа (ЯМР и ИК-спектроскопия, MALDI).

## МУЛЬТИСЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПЕРФТОРМЕМБРАН, СОДЕРЖАЩИХ РЕДОТ И ПОЛИАНИЛИН, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ САХАРИНАТ ИОНОВ

В.А. Кулешова<sup>a</sup>, Т.С. Титова<sup>b</sup>, П.А. Юрова<sup>b,c</sup>, А.В. Паршина<sup>a</sup>, О.В. Бобрешова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж;

<sup>b</sup> Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, Москва;

<sup>c</sup> Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва.

*vik.kuleshova2017@mail.ru*

Сахаринат натрия используют как подсластитель для маскировки горечи лекарственных веществ и сокращения количества сахарозы в пищевых продуктах. Определение отдельных компонентов, отвечающих за сладкий вкус, и интегральная оценка вкуса описаны с помощью массивов коммерческих потенциометрических сенсоров на основе полимерных мембран с синтетическими липидами, способными к гидрофобным и катионообменным взаимодействиям [1]. Работ, посвященных определению искусственных подсластителей в анионной форме, существенно меньше [2]. В данной работе исследованы мембраны на основе перфторированного сульфокатионообменного полимера, поли-3,4-этилендиокситиофена и полианилина для потенциометрического определения ионов сахараина и натрия. При получении композиционных мембран отливкой варьировали концентрацию допанта, а при *in situ* модификации – концентрацию раствора мономера и порядок обработки мембран растворами мономера и окислителя. Установлено, что появление дополнительных сорбционных центров в виде протоноакцепторных групп и фрагментов с  $\pi$ - $\pi$ -сопряжением при модификации перфтормембран наиболее выражено способствует росту чувствительности ПД-сенсоров (ПД – потенциал Доннана) к ионам сахараина при повышении диффузионной проницаемости образцов. Практическое применение разработанные мультисенсорные системы могут найти при анализе фармацевтических препаратов, содержащих для маскировки горечи сахаринаты.

1. Kobayashi Y., Habara M., Ikezaki H., Chen R., Naito Y., Toko K. // *Sensors*, 2010. V. 10(4). P. 3411.
2. Yasuura M., Okazaki H., Tahara Y., Ikezaki H., Toko K. // *Sensors and Actuators B: Chem.* 2014. V. 201. P. 329.

## СИНТЕЗ 2,3,4,5-ТЕТРАФЕНИЛ-1-МОНОФОСФЕРОЦЕНА

А.Р. Лакомкина<sup>a</sup>, А.А Загидуллин<sup>b</sup>, В.А. Милуков<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН.

alena.lakomkina.00@mail.ru

Фосфаферроцены – это производные ферроцена, в которых один или несколько атомов углерода заменены на двухкоординированный атома фосфора. Фосфаферроцены используются для создания новых супрамолекулярных систем и материалов с практически полезными свойствами [1]. Показано, что замена атомов углерода циклопентадиенильного кольца на атомы фосфора приводит к упрочнению  $\pi$ -связывания лиганда с металлом пропорционально увеличению числа атомов фосфора [2]. Фосфаферроцены позволяют изучить распределение плотности в комплексах фосфолидов, что необходимо для оценки влияния природы атома фосфора в циклопентадиенильном лиганде на характер связывания.

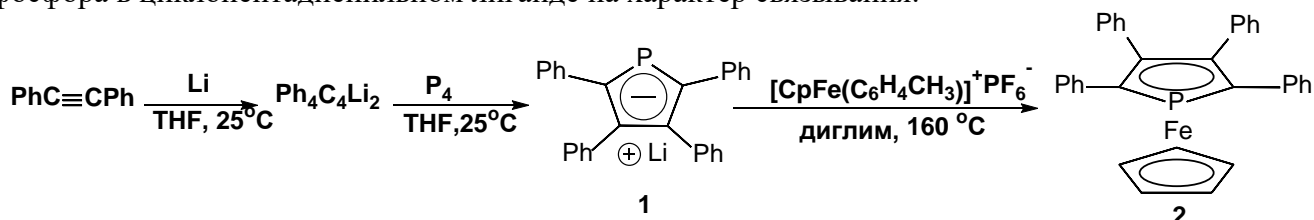


Схема 1. Синтез 2,3,4,5-тетрафенил-1-монофосферроцена.

Нами был разработан новый удобный способ синтеза 2,3,4,5-тетрафенил-1-монофосферроцена с выходом 50-55%. Однореакторной реакцией, основанной на взаимодействии белого фосфора  $P_4$  с 1,2,3,4-тетрафенил-1,4-дилитий-1,3-бутадиеном, полученным из дифенилацетилена и металлического лития Li, был получен 2,3,4,5-тетрафенил-1-монофосфолид лития (**1**). Взаимодействием с комплексом  $[CpFe(C_6H_4CH_3)]^+PF_6^-$  был синтезирован 2,3,4,5-тетрафенил-1-монофосферроцен (**2**), структура которого доказана методами ЯМР  $^1H$ ,  $^{13}C$  и  $^{31}P$  спектроскопии, РСА.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 21-73-10204.

1. I. A. Bezkishko, A. A. Zagidullin, V. A. Miluykov, O. G. Sinyashin, *Alkali and transition met-als phospholides*, 2014, **83**, 555.
2. G.Frison, F.Mathey, A.Sevin, *J. Phys. Chem. A*, 2002, **106**, 5653.

## ТЕРМИЧЕСКИЕ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ОЛИГОПЕПТИДОВ

Р.А. Ларионов<sup>а</sup>, М.А. Зиганшин<sup>а</sup>, С.А. Зиганшина<sup>б</sup>, А.В. Герасимов<sup>а</sup>, В.В. Горбачук<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, Казань;

<sup>б</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань.

*radik.larionov@gmail.com*

В настоящее время олигопептиды активно изучаются, благодаря тому, что на их основе могут быть получены разнообразные наноструктуры, обладающие биосовместимостью и низкой токсичностью. Такие структуры проявляют биологическую активность и могут иметь широкое биомедицинское применение. Популярным способом получения наноструктур на основе олигопептидов является их термическая обработка. Однако, при нагревании олигопептидов возможно протекание химических реакций с образованием других соединений, обладающих иными свойствами. Поэтому для корректного применения термической обработки в таких системах необходима информация о критических температурах, выше которых процессы самоорганизации олигопептидов, переходят в химические реакции. Помимо наноструктур на основе олигопептидов интерес представляют кристаллы на их основе, используемые для хранения летучих анестетиков и газов, и для разделения газовых смесей. Такие кристаллы способны проявлять супрамолекулярные свойства, такие как распознавание органических соединений и память к ранее связанному гостю.

В связи с этим в настоящей работе было проведено изучение термических свойств дипептидов L-изолейцил-L-аланин, L-лейцил-L-фенилаланин и L-фенилаланил-L-лейцин в твердой фазе, а также клатратов олигопептидов на основе лейцина с органическими соединениями.

Были определены температуры начала реакций циклизации олигопептидов в твердой фазе. В рамках неизотермической кинетики рассчитаны кинетические параметры этих реакций, включая энергию активации, множитель Аррениуса, порядок реакции, установлены их кинетические модели.

Методом статического парофазного газохроматографического анализа было изучено образование клатратов трипептида L-лейцил-L-лейцил-L-лейцина с органическими соединениями. Термическая стабильность клатратов ди- и три-лейцина исследовалась методом совмещенного термического анализа.

Была обнаружена способность кристаллов олигопептидов на основе лейцина запоминать ранее связанные гости. Память олигопептидов проявлялась в виде термических эффектов на кривой ДСК в отсутствие потери массы.

Процессы самосборки линейных и циклических дипептидов, а также влияние паров органических соединений на морфологию плёнки L-лейцил-L-лейцил-L-лейцина были охарактеризованы с использованием атомно-силовой микроскопии.

Полученные результаты могут быть полезны для развития методов получения наноматериалов на основе олигопептидов при повышенных температурах, методов синтеза производных 2,5-дикетопиперазинов, а также для молекулярного распознавания паров органических соединений.

*Исследование выполнено за счет средств субсидии, выделенной КФУ для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0671-2020-0061).*

## МОНОЗАМЕЩЁННЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ЭТАНОЛАМИДНЫЕ ФРАГМЕНТЫ: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ

Н.Р. Лачугина, Л.И. Махмутова, Д.Н. Шурпик, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*nata.la4ugina@gmail.com*

В настоящее время макроциклические соединения интенсивно изучаются в качестве систем-носителей лекарственных препаратов [1]. Особое место среди большого разнообразия макроциклов занимают пиллар[n]арены. Возможность доступной функционализации пиллар[n]аренов позволяет варьировать количество заместителей при фенольных –ОН. Особый интерес представляют монозамещённые соединения [2], используемые в создании супрамолекулярных полимеров и систем доставки лекарств.

В данной работе мы сообщаем о синтезе новых монозамещённых производных пиллар[5]арена, содержащих 2-гидроксиэтиламидные и 3-гидроксипропиламидные фрагменты. Структура полученных соединений установлена рядом физико-химических методов: спектроскопией ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК, масс-спектрометрией. Был проведен сравнительный анализ пространственных структур полученных соединений, как потенциальных систем доставки терапевтических агентов [3]. Методами спектроскопии ЯМР и ИК показано, что длина диметиленового фрагмента и отсутствие водородного связывания приводит к свободному вращению арильных фрагментов в пиллар[5]аренах, содержащих один или десять 2-амидоэтанольных фрагментов, через макроциклическую полость.

*Работа выполнена в рамках гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (НШ-2499.2020.3).*

1. Y. Chen, S. Sun, D. Lu, Y. Shi, Y. Yao, *Chin. Chem. Lett.*, 2019, **30**, 37.
2. P. Cragg, *J. Isr. J. Chem.*, 2018, **58**, 1194-1208.
3. D. N. Shurpik, A. A. Nazarova, L. I. Makhmutova, V. N. Kizhnyayev, I. I. Stoikov, *Russ. Chem. Bull.*, 2020, **69**, 97-104.

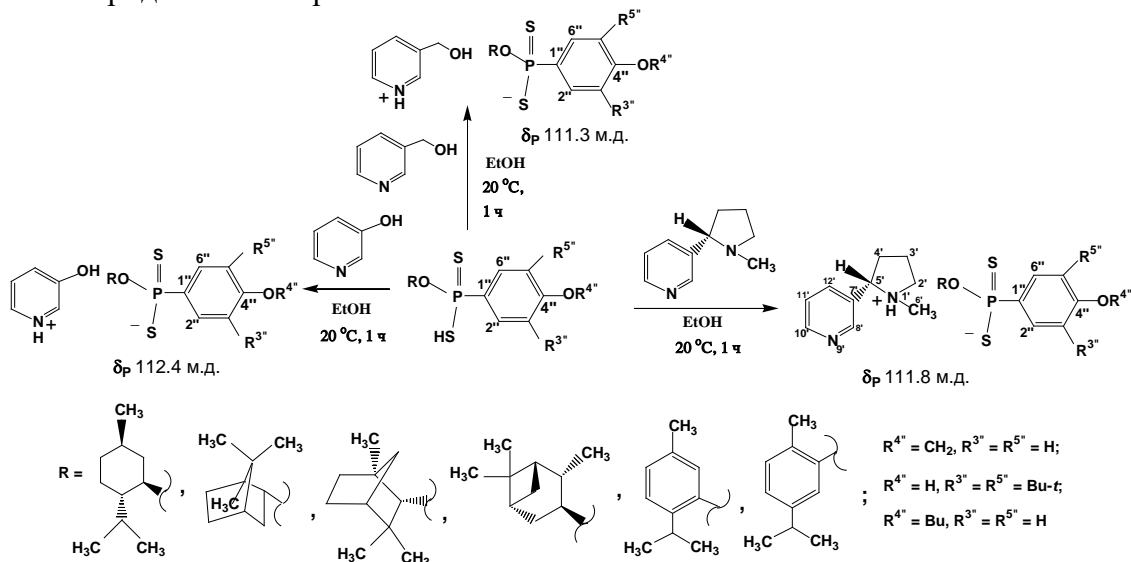
## ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ СОЛИ ДИТИОФOSFONОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ

Д.А. Левченко, А.А. Яковлев, И.С. Низамов, Р.А. Черкасов, И.Д. Низамов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*isnizamov@mail.ru*

Дитиокислоты фосфора, их соли и эфиры обладают широким спектром биологической активности. Для получения биологически активных дитиофосфоновых кислот мы выбрали монотерпеновые спирты, входящие в состав эфирных масел, выделенных из растений. Широкий ряд *O*-терпенилдитиофосфоновых кислот с хиральными и фармакофорными ароматическими заместителями получен на основе (1*R*,2*S*,5*R*)-(-)-ментола, (1*S*,2*R*,5*S*)-(+)-ментола, (1*S*)-эндо-(-)-борнеола, (1*R*)-эндо-(+)-фенхилового спирта, (1*S*,2*S*,3*S*,5*R*)-(+)-изопинокамфеола, тимола и карвакрола. Установлено, что (*S*)-(-)-никотин, 3-гидроксипиридин и 3-пиридинметанол реагируют с арилдитиофосфоновыми кислотами на основе монотерпеновых спиртов с образованием пиридиниевых солей. Соли арилдитиофосфоновых кислот получены и при использовании пиридоксина и атропина.



Пиридоксониевые соли арилдитиофосфоновых кислот проявили антикробную активность, установленную гель-диффузионным методом. Бактерицидная активность испытанных солей в отношении *Vacillus cereus* (с зоной подавления роста микроорганизмов 26-28 мм) превосходит активность антибиотика цефазолина (25 мм).



## ВЛИЯНИЕ НАНОСТРУКТУРЫ ПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ИХ СОЛЬВАТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА

Т.И. Магсумов, И.А. Седов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*igor\_sedov@inbox.ru*

Ряд протонных ионных жидкостей имеют наногетерогенную структуру, характеризующуюся наличием взаимно проникающей сети из двух доменов: полярного, состоящего из заряженных атомов и групп, и неполярного, в который входят алкильные цепи и прочие малополярные фрагменты. Очевидно, что наличие доменной структуры должно влиять на сольватационные свойства протонных ионных жидкостей, которые сравнительно слабо изучены.

В настоящей работе методом анализа равновесного пара были определены предельные коэффициенты активности и энергии Гиббса сольватации алканов, ароматических углеводородов и предельных спиртов в нитратах, гидросульфатах и роданидах пропил-, бутил-, 2-гидроксиэтил- и 2-метоксиэтиламмония. Методом молекулярной динамики и вставки тестовых частиц была изучена структура этих растворителей, строение сольватной оболочки углеводородов и энергии Гиббса образования полости в ионных жидкостях. Наличие неполярных доменов в солях пропил- и бутиламмония приводит к предпочтительной сольватации углеводородных цепей в этих доменах и низким энергиям Гиббса сольватации. В солях 2-гидроксиэтиламмония, характеризующихся отсутствием доменной структуры, наблюдались гораздо более высокие энергии Гиббса сольватации углеводородов. Гидроксильная группа в составе катиона ионной жидкости участвует в образовании сетки водородных связей и препятствует образованию неполярных доменов. Наличие сетки водородных связей приводит к возникновению сильных сольвофобных эффектов, высоким энергетическим затратам на образование полости в растворителе и, как следствие, плохой растворимости углеводородов. Следует отметить, что экспериментальные данные о величинах предельных коэффициентов активности и расчет энергии Гиббса образования полости можно использовать как индикатор наличия или отсутствия доменной структуры.

*Исследование выполнено при поддержке гранта Президента РФ МД-1444.2021.1.3.*

## ИНКАПСУЛЯЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В БИОПОЛИМЕРЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ УНТ

А.О. Макарова<sup>a</sup>, О.С. Зуева<sup>b</sup>, Ю.Ф. Зуев<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Казанский институт биохимии и биофизики, Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», Казань;*

<sup>b</sup> *Казанский государственный энергетический университет, Казань.*

*tat355@mail.ru*

Развитие новых технологий в биомедицине предполагает создание полимерных материалов, отличающихся высокой биосовместимостью и биodeградируемостью. Биополимеры на основе природных биополимеров (белки и полисахариды) могут быть изготовлены в виде насадок, гранул, шариков, мембран, покрытий, капсул, волокон и губок [1]. Применение гидрогелей во многом определяется ограниченностью их физико-химических и механических свойств. Изменение данных характеристик достигается при использовании функциональных добавок, в том числе углеродных нанотрубок (УНТ) [2].

Целью данной работы являлось комплексное исследование сконструированных гидрогелевых систем на основе желатина, κ-каррагинан и альгинат натрия в отношении их солубилизационной емкости и пролонгированного высвобождения биологически-активных веществ, в частности ферментных препаратов (биназа и липаза) и витаминов В<sub>2</sub> и (В<sub>9</sub>). В качестве модифицирующей добавки использовались многостенные УНТ. Определения удерживающей способности гидрогеля проводили на спектрофотометре Lambda 25 (Perkin Elmer, США).

Установлено, что при добавлении УНТ скорость высвобождения ферментных препаратов и витаминов уменьшается. УНТ встраивается в структуру гидрогеля и создает дополнительные стерические препятствия. Полученные результаты могут быть использованы для улучшения сорбционных свойств сконструированных гидрогелей с возможностью управления пролонгированным действием биологически активных веществ.

1. J.P. Gong. *Soft Matter*, 2006, **2**, 544-552.

2. S. Kugler, K. Kowalczyk, T. Szychaj, *Prog. Org. Coat*, 2015, **85**, 1-7.

## ВЛИЯНИЕ ПОЛИСАХАРИДНОЙ МАТРИЦЫ НА СТРУКТУРУ ФЕРМЕНТНЫХ ПРЕПАРАТОВ

А.О. Макарова<sup>a</sup>, О.С. Зуева<sup>b</sup>, Ю.Ф. Зуев<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Казанский институт биохимии и биофизики, Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», Казань;*

<sup>b</sup> *Казанский государственный энергетический университет, Казань.*

*tat355@mail.ru*

Применение белков в разработке гелевых систем доставки лекарств тесно связаны с их функциональными терапевтическими свойствами. Системы адресной доставки лекарств должны переносить белки, защищая их во время транспортировки через агрессивную среду организма к месту излечения с направленным удержанием и высвобождением активных компонентов. Пероральное введение терапевтических белков встречает ряд трудностей, связанных с потерей активности ферментов. Следовательно, супрамолекулярные контейнеры [1] в качестве носителей для доставки лекарств заслуживает особого интереса.

Целью данной работы являлось оценка возможных изменений в структуре биназы и липазы под влиянием гидрогелевого окружения (альгината натрия). Загрузка ферментов в альгинатные сферы может изменить структуру фермента и, таким образом, каталитические и фармакологические свойства. Для регистрации спектров флуоресценции триптофановых остатков в молекуле липазы и биназы использовали спектрофлуориметр Флюорат-02-Панорама (ЛЮМЕКС, Россия).

В случае биназы был определен слабый прогрессивный сдвиг максимума триптофана I класса при увеличении концентрации альгината и отсутствии явных изменений положения III класса. Для липазы наблюдается батохромный сдвиг максимума суммарной флуоресценции. Это может быть вызвано разворачиванием белка или увеличением степени гидратации вследствие взаимодействия с альгинатом натрия. Полученные результаты свидетельствуют об отсутствии значительных изменений структуры липазы и биназы под влиянием исследуемого гидрогелевого окружения, что подтверждается и сохранением высокого уровня активности фермента, солюбилизованного в гидрогеле.

1. J. Li, D. Mooney, Nat. Rev. Mater, 2016, 1, 16071.

## 1-АРИЛФОСФИРАНЫ И 1-АРИЛФОСФОЛ-3-ЕНЫ КАК ПРЕКУРСОРЫ ФОСФИНИДЕНОВ

Е.А. Мельников<sup>а</sup>, Ю.С. Ганушевич<sup>б</sup>, А.В. Акимов<sup>с</sup>, Д.В. Корчагин<sup>с</sup>, Е.Я. Мисочко<sup>с</sup>,  
В.А. Милюков<sup>б</sup>

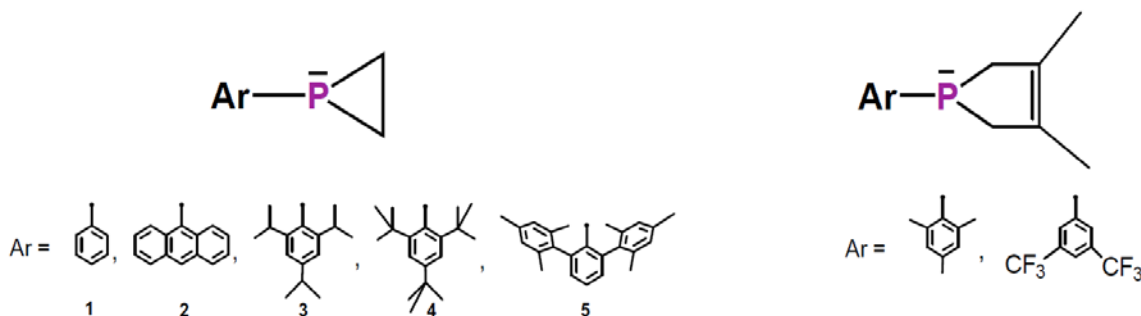
<sup>а</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>б</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,  
Казань;

<sup>с</sup> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская область.

oneircmelnik@gmail.com

В последнее время с теоретической и практической точки зрения все большее значение приобретают соединения низкокоординированного углерода, азота и фосфора. Нитрены и фосфинидены характеризуются сильными ферромагнитными обменными взаимодействиями между неспаренными электронами, из-за чего они являются превосходными модельными соединениями для изучения магнетизма в органических высокоспиновых молекулах. Однако на сегодняшний день было сделано всего лишь несколько попыток зафиксировать и изучить триплетный фосфиниден. Чрезвычайно реакционно способный мезитилфосфиниден, образованный в результате фотохимического расщепления соответствующего фосфирана, был детектирован в твердой матрице аргона при температуре 4,2 К методами ЭПР, ИК и УФ-спектроскопии. [1, 2]



В настоящей работе нами представлен синтез ряда 1-арилфосфиранов и 1-арилфосфол-3-енов, а также изучены их фотохимические свойства. Было показано, что фотолиз фосфиранов 1-3 приводит к образованию стабилизированного в матрице метилциклогексана триплетного фосфинидена. Фосфираны 4-5 претерпевает почти безбарьерную перегруппировку с образованием стабильных циклических продуктов, тем самым препятствуя превращению синглетного интермедиата в более стабильный триплетный фосфиниден. [3]

1. X. Li, S.I. Weissman, T.-S. Lin, P.P. Gaspar, JACS, 1994, 116 (17), 7899.
2. G. Bucher, M.L. G. Borst, A.W. Ehlers, K. Lammertsma, S. Ceola, M. Huber, D. Grote, W. Sander, Angew. Chem., 2005, 117 (21), 3353.
3. E. Ya. Misochko A. V. Akimov, D. V. Korchagin, Y. S. Ganushevich, E. A. Melnikov, and V. A. Miluykov, Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 27626

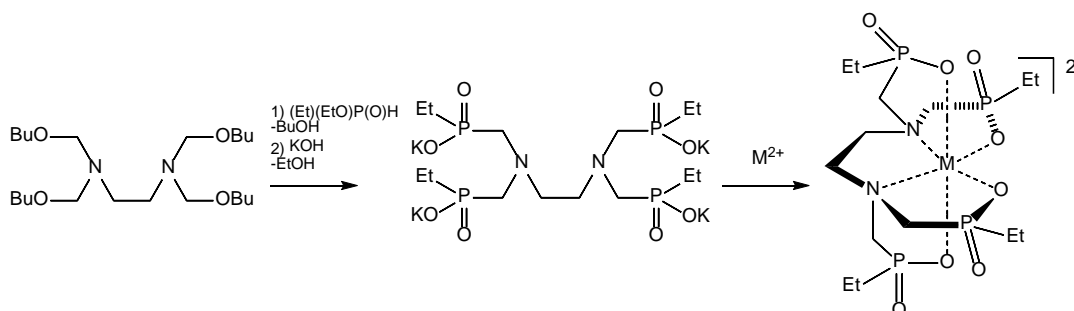
## СИНТЕЗ, КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА НОВОГО ЛИГАНДА – ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРА[МЕТИЛЕН-(ЭТИЛ)ФОСФИНОВОЙ КИСЛОТЫ]

И.И. Мирзаянов, А.Р. Гарифзянов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*ildar4016@mail.ru*

Одной из актуальных задач материаловедения является синтез и исследование новых соединений для дальнейшего изучения функциональной составляющей «структура–свойство». Ранее в нашей научной группе были получены и исследованы кислотнo-основные и комплексообразующие свойства ряда фосфорорганических комплексонов – аналогов аминокарбоновых кислот [1-2], являющихся аминополифосфовыми кислотами. В настоящей работе обсуждаются синтез и свойства нового лиганда – тетракалийевой соли этилендиаминтетра[метилена(этил)фосфиновой кислоты]. Показано, что данный лиганд образует более прочные комплексы с переходными металлами ( $\Delta \lg K_{M+L}$  1.5-2 ед.), чем его аналог, содержащий OEt-группу при атоме азота вместо Et. Для щелочноземельных ионов картина не так однозначна: если для фосфиновой кислоты комплекс бария на 1.3 порядка более прочный, чем комплекс стронция, то в обсуждаемом лиганде эти металлы образуют близкие по прочности комплексы.



*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90235.*

1. А.Р. Гарифзянов, И.Д. Шурыгин., Р.А. Черкасов, *ЖОХ*, 2018, **88** (9), 1517-1523; DOI: 10.1134/S1070363218090165.
2. И.Д. Шурыгин, А.Р. Гарифзянов, Р.А. Черкасов, К.А. Ившин, О.Н. Катаева, *ЖОХ*, 2018, **87** (9), 1534-1537; DOI: 10.1134/S1070363217090274.

## НЕСИММЕТРИЧНЫЕ (PCN) ПИНЦЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НИКЕЛЯ (II) НА ОСНОВЕ БЕНЗОТИАЗОЛА И ПИРАЗОЛА В ПРОЦЕССЕ ГОМОГЕННОЙ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА

И.К. Михайлов<sup>a,b</sup>, А.А. Кагилев<sup>a,b</sup>, З.Н. Гафуров<sup>b</sup>, А.О. Кантюков<sup>a,b</sup>, Д.Г. Яхваров<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия, 420008, ул. Кремлевская, д. 29/1;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия, 420088, ул. Академика Арбузова, д. 8.

*tiimhaylov@bk.ru*

Одной из основных задач современной металлоорганической химии является разработка новых высокоэффективных катализаторов на основе доступных переходных металлов [1]. Таким образом, комплексы на основе никеля привлекают все большее внимание, в силу своей каталитической активности по отношению к широкому спектру органических субстратов. Однако их каталитическая активность во многом зависит от тонкой настройки дизайна лигандного окружения. Тридентатные лиганды пинцерного типа эффективны для стабилизации плоско-квадратной геометрии никеля, что делает данный тип комплексов активными катализаторами в процессе гомогенной олигомеризации этилена (Рисунок 1) [2,3].

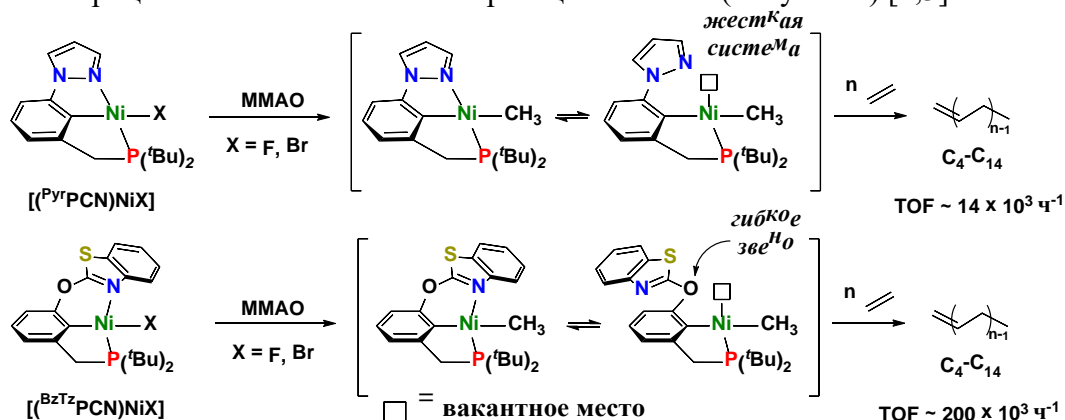


Рисунок 1 – PCN пинцерные комплексы никеля(II) с пиразольным и бензотиазольным фрагментом: активация и каталитическая активность в процессе олигомеризации этилена.

1. Gafurov Z.N., Mikhailov I.K., Yakhvarov D.G. et al. *Molecules*, 2021, **26**, 4063.
2. Gafurov Z.N., Mikhailov I.K., Yakhvarov D.G. et al. *J. Organomet. Chem.* 2020, **912**, 121163.
3. Gafurov Z.N., Mikhailov I.K., Yakhvarov D.G. et al. *J. Organomet. Chem.* 2021, **949**, 121951.

## ОЦЕНКА СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ УСТРОЙСТВ ПРИМЕНЯЕМЫХ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ БИМЕДИЦИНСКИХ КЛЕТОЧНЫХ ПРОДУКТОВ

С.А. Мухаметшин, М.Р. Халиулин, Е.А. Змиевская, И.А. Ганеева, А.Х. Валиуллина, Э.Р. Булатов

*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань.*

*saba0203@mail.ru*

Использование клеточной терапии способно совершить прорыв в лечении опухолевых и аутоиммунных заболеваний. Производство биомедицинских клеточных продуктов для клеточной терапии осуществляется в несколько этапов: выделение иммунных клеток пациента, генная модификация, культивирование в специальных системах, контроль качества полученных терапевтических клеток. Для обеспечения высокого качества и безопасности клеточных продуктов при культивировании необходимо использовать устройства, изготовленные из биосовместимых, безопасных, сертифицированных материалов.

Цель исследования: оценка ряда материалов на предмет пригодности для изготовления изделий и устройств для производства клеточных продуктов.

Материалы и методы: для исследования были отобраны различные виды пластмасс, стекла и металлов используемых в биомедицинской сфере. Проведено исследование влияния данных материалов на пролиферацию клеточных культур НЕК293 и SupT1. Оценка материалов осуществлялась по следующим критериям: доступность, возможность стерилизации водяным паром или гамма-излучением, влияние на клеточную пролиферацию и метаболизм. В работе применялся MTS тест на клеточную пролиферацию.

Результаты: среди наиболее доступных материалов выявлены термостойкое боросиликатное стекло (ТС) марки GG17, медицинская сталь марки 12x18H10T, полистирол PS, полиэтилен HDPE, фторопласт, полипропилен. Одним из наиболее пригодных материалов для производства сложных конструкций является фторопласт, полистирол, полипропилен, обладающие высокой пластичностью. Гамма-лучевой стерилизации могут быть подвергнуты все исследуемые материалы. Автоклавирование не выдержали полистирол и полиэтилен. Наименьшее влияние на пролиферацию клеток оказали: полистирол, стекло марки GG17, медицинская сталь марки 12x18H10T.

Выводы и обсуждения: согласно полученным данным, наиболее пригодным материалом для производства изделий и устройств для культивации клеточных продуктов является полистирол PS, однако его производство сопряжено с техническими сложностями. В ходе исследования так же было обнаружено, что большое влияние на клеточные культуры оказывает способ обработки материала. Для адгезионной культуры НЕК293 необходима предварительная подготовка материала, обеспечивающая отсутствие острых краев и примесей после обработки. Суспензионная культура SupT1 была менее чувствительна к шероховатости поверхности, однако наличие примесей оказывало негативное влияние на ее пролиферацию.

*Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

## ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕТРАКАИНА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ С ПОМОЩЬЮ МЕМБРАН МФ-4СК, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОИАНИЛИНОМ

А.Р. Новичихина, Т.С. Колганова, А.В. Паршина, О.В. Бобрешова

*Воронежский государственный университет, г. Воронеж.*

*novichikhina.alla@yandex.ru*

Тетракаин входит в состав местноанестезирующих средств и является поллютантом, что обуславливает актуальность разработки способов его определения в фармацевтических средах и стоках. В работе исследована возможность использования материалов на основе перфторированной сульфокатионообменной мембраны МФ-4СК и полианилина (PANI) для потенциометрического определения катионов тетракаина в водных растворах. Композиционные материалы МФ-4СК/PANI предоставлены Лабораторией ионики функциональных материалов Института общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН (г. Москва). Образцы получены методом *in situ* окислительной полимеризации анилина в матрице коммерческой мембраны МФ-4СК при варьировании его концентрации в растворе (0.002, 0.005, 0.010 М) и порядка ее погружения в растворы мономера и окислителя. Присутствие в композиционных материалах сорбционных центров разного типа – сульфогруппы перфторполимера и фрагменты с  $\pi$ - $\pi$ -сопряжением ПАНИ – способствовало поступлению в поры катионов тетракаина, содержащего в структуре аминогруппы и бензольное кольцо. Полученные мембраны использованы для организации ПД-сенсоров (ПД – потенциал Доннана) [1], перекрестно чувствительных к ионам тетракаина и гидроксония в водных растворах. Образцы МФ-4СК/PANI, полученные обработкой 0.005 М раствором анилина гидрохлорида и с различной последовательностью обработки растворами окислителя и мономера, обеспечили наибольшую чувствительность ПД-сенсоров к катионам тетракаина по сравнению с мешающими ионами гидроксония. Для выбранных образцов относительная погрешность определения катионов тетракаина в диапазоне концентраций  $1.0 \cdot 10^{-4}$ - $1.0 \cdot 10^{-2}$  М (рН 2.27-4.06) составила 1.0 и 6 %, относительное стандартное отклонение – 4 и 3 %, соответственно.

1. E. Safronova, A. Parshina, T. Kolganova, O. Bobreshova, G. Pourcelly, A. Yaroslavtsev. *J. Electroanal. Chem.*, 2018, **816**, 21-29.



## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИСПАРЕНИЯ СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ НОРМАЛЬНЫХ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ И БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

А.А. Нотфуллин, Д.Н. Болматенков, М.И. Ягофаров, И.С. Балахонцев, Б.Н. Соломонов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

notfullinair@gmail.com

Представители гомологического ряда *n*-алкил бензоатов находят применение в разных областях жизни человека. До настоящего времени термодинамические характеристики процесса испарения данного класса веществ были мало изучены.

В данной работе была собрана и критически проанализирована вся доступная информация о термодинамике испарения короткоцепочечных алкил бензоатов. Давления пара более длинных представителей гомологического ряда были измерены с помощью метода сверхбыстрой сканирующей калориметрии (FSC) [1].

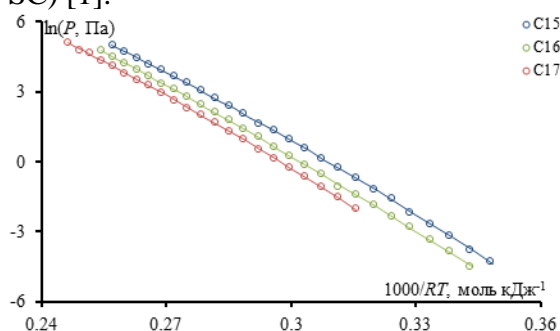


Рисунок 1 – Зависимость логарифма давления пара над жидкостью от обратной температуры для пентадецил, гексадецил и гептадецил бензоата.

На основании полученной информации были установлены взаимосвязи энтальпий испарения и логарифма давления пара при 298.15 К с длиной алкильной цепи заместителя ( $N_C$ ):

$$\Delta_f^0 H(298.15\text{K})/\text{кДж моль}^{-1} = 42.21 + 4.24 \cdot N_C, N_C > 1$$

$$\ln(P^\circ/\text{Па}) = 5.35 - 1.06 \cdot N_C, N_C > 1$$

Установленные корреляции в сочетании с полуэмпирическими методами для оценки разности теплоёмкостей жидкости и идеального газа [2] позволили предсказать ключевые термодинамические параметры испарения в широком диапазоне температур. На основании проведённого исследования были предсказаны температуры кипения, давления пара при 298.15 К и энтальпии испарения бензоатов от метила до *n*-эйкозила.

1. Buzyurov, A.V., et al., *Application of the Flash DSC 1 and 2+ for vapor pressure determination above solids and liquids*. *Thermochimica Acta*, 2021: p. 179067.
2. D. N. Bolmatenkov, M. I. Yagofarov, A. A. Notfullin, and B. N. Solomonov, *Calculation of the vaporization enthalpies of alkylaromatic hydrocarbons as a function of temperature from their molecular structure*. *Fluid Phase Equilibria*, 2021. *Submitted*.

## МОНО- И БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ СТАБИЛИЗИРОВАННЫЕ НА АМФИФИЛЬНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНАХ В КАТАЛИЗЕ РЕАКЦИЙ СОЧЕТАНИЯ СУДЗУКИ И СОНОГАШИРЫ.

Е.А. Очереднюк<sup>а</sup>, Р.И. Гарипова<sup>а</sup>, Э.Д. Султанова<sup>а</sup>, В.А. Бурилов<sup>а</sup>, И.С. Антипин<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия;

<sup>б</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова-обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.

ocherednuk@gmail.com

С развитием супрамолекулярной химии получены и функционализированы различные макроциклы, в том числе и каликс[4]арены, которые ввиду лёгкой модификации выступают в качестве наноконтейнеров для связывания/высвобождения субстратов, сенсоров и эффективной подложки для стабилизации металлических наночастиц.

Создание и использование металлических наночастиц охватывает различные области наук: медицина, биохимия, материаловедение, включающее в себя создание полупроводников и сенсоров, агрохимия и многие другие. Изучение наночастиц, исследование их физических и химических свойств, а также модификация путём варьирования различных подложек для стабилизации частиц является актуальной и необходимой задачей в современном мире.

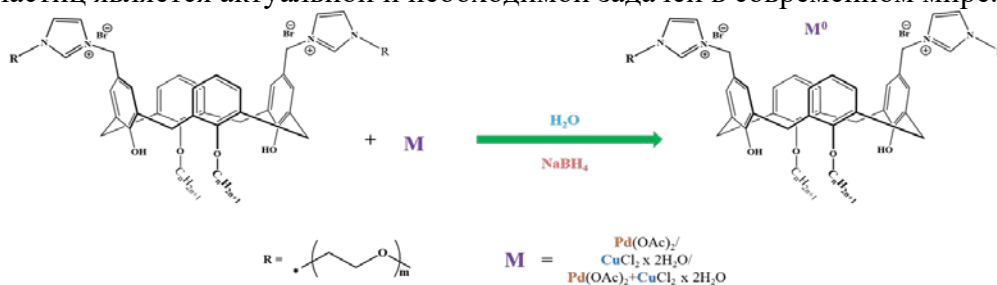


Рисунок 1 – Каликс[4]арены, как эффективные подложки для наночастиц металлов.

Полученные нашей научной группой олигоэтиленгликолевые каликс[4]арены (рисунок 1) были использованы в качестве подложек для стабилизации моно- и биметаллических наночастиц (Pd, Cu и PdCu) и для катализа реакций кросс-сочетания Судзуки и Соногаширы в водной среде. Полученные результаты свидетельствуют о высокой эффективности стабилизированных наночастиц по сравнению со свободными металлическими частицами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-73-162

## ОСОБЕННОСТИ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В БИНАРНЫХ АЗЕОТРОПАХ

А.А. Петров, И.Т. Ракипов, Б.Н. Соломонов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*arteapetrov@kpfu.ru*

Известно, что растворитель оказывает решающее влияние в химических, физико-химических и биологических процессах. Свойства растворителя определяют скорость и константы равновесия химических реакций, энергии электронных переходов. Использование при этом бинарных растворителей представляет большой интерес, поскольку позволяет варьировать свойства среды для различных практических задач. Так, использование бинарных растворителей позволяет увеличить растворимость лекарственных препаратов в 1,5-5 раз по сравнению с чистыми компонентами бинарного растворителя. Проведение реакций в бинарных растворителях, в которых один из компонентов способен образовывать водородные связи с исходными веществами или продуктами, наблюдаются как существенное ускорение, так и замедление скорости реакции. Частным случаем бинарных смесей являются азеотропы – многокомпонентные системы, кипящие без изменения состава. Данная особенность азеотропов может являться как преимуществом, например, в химических реакциях, так и недостатком в процессах дистилляции смесей.

В работе измерены энтальпии растворения насыщенных углеводородов в бинарных смесях, в том числе и в азеотропах. Показано, что избыточная энтальпия растворения алкана в азеотропе имеет максимальную величину. Проведена оценка влияния диэлектрических постоянных среды и дипольных моментов молекул на особенности образования азеотропных смесей.

Поскольку в термодинамическом плане азеотропы подобны чистым веществам, важным является оценить термодинамические величины фазовых переходов азеотропных смесей при температуре их кипения. В работе применено ранее разработанное уравнение зависимости энтальпии сольватации от молекулярной рефракции для оценки энтальпии парообразования азеотропов при 25°C. Для оценки скрытых теплот испарения, предложены корреляции энтальпий растворения от состава в азеотропных рядах.

*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект №19-73-10131).*

## АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ СТРЕПТОМИЦИНА НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ НИКЕЛЬ-ЗОЛОТО И КОМПОЗИТОМ С ОКСИДОМ ГРАФЕНА

А.А. Поздняк, Л.Г. Шайдарова, А.В. Гедмина, И.А. Челнокова, Д.А. Мурдасова,  
Г.К. Будников

*Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, ул.  
Кремлевская 18, г. Казань, 420008. Республика Татарстан, Россия.*

*anya\_pozdnyak@mail.ru*

Стрептомицин, антибиотик аминогликозидного ряда, широко используется в фармацевтике, ветеринарии и садоводстве для лечения и профилактики бактериальных заболеваний. Следовые количества исследуемого антибиотика, используемого при переработке сельскохозяйственной продукции, остаются в окружающей среде и приводят к ее загрязнению, а наличие их в пищевых продуктах приводит к ряду заболеваний.

Изучено электроокисление стрептомицина на электродах из стеклоуглерода (СУ) с осадком никеля, бинарной системы никель-золото (Ni-Au) и композитом на основе восстановленного оксида графена и этой бинарной системы (Ni-Au-ГO<sub>red</sub>). Определены оптимальные условия получения осадков (область потенциалов, время осаждения, соотношение содержания металлов в растворе осаждения биметалла), оценено влияние на электрохимические характеристики природы фонового электролита и pH. Выбор условий иммобилизации восстановленным оксидом графена проводился по электрохимическим характеристикам окисления и восстановления ферроцианид-иона.

Установлено, что окисление стрептомицина на композитном электроде Ni-Au-ГO<sub>red</sub>-СУ происходит с большим электрокаталитическим эффектом, по сравнению с окислением на Ni-Au-СУ, поэтому для разработки способа амперометрического детектирования стрептомицина был выбран электрод Ni-Au-ГO<sub>red</sub>-СУ.

Определены условия амперометрического детектирования стрептомицина на Au-Ni-ГO<sub>red</sub>-СУ в условиях проточно-инжекционного анализа. Разработанные способы проточно-инжекционного определения отличаются высокой чувствительностью до 0.45 нмоль, степенью автоматизации, а также высокой воспроизводимостью, экспрессностью и производительностью по сравнению со стационарными условиями. Амперометрический способ детектирования стрептомицина на Au-Ni-ГO<sub>red</sub>-СУ в проточно-инжекционных условиях был апробирован в анализе образца молока.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.*

## ВЛИЯНИЕ ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ТЕРМОДИНАМИКУ СОРБЦИИ БЕНЗИМИДАЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ ИЗ ВОДНО-АЦЕТОНИТРИЛЬНЫХ РАСТВОРОВ НА СВЕРХСШИТОМ ПОЛИСТИРОЛЕ

В.М. Разницына, Р.В. Шафигулин, А.А. Копылова, А.В. Буланова

*Химический факультет, Естественнонаучный институт, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия.*

*v\_raznitsyna@mail.ru*

Основным способом определения биологически активных соединений (БАС) является метод обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ), в котором существует трудность разделения сложных смесей БАС. Одним из возможных решений этой проблемы является введение в хроматографическую систему ионных жидкостей (ИЖ) [1].

Целью настоящей работы было изучение влияния 1-бутил-2,3-диметилимидазолий тетрафторбората ([BdMIM][BF<sub>4</sub>]) и 1-бутил-3-метилимидазолий бромид ([BMIM][Br]) на термодинамические характеристики удерживания бензимидазолов сверхсшитым полистиролом (СПС) методом ОФ ВЭЖХ.

В ходе работы были рассчитаны стандартные изменения энтальпии перехода бензимидазолов из водно-ацетонитрильного элюента на неполярный слой СПС, а также определены энтропийные составляющие процесса. Установлено, что при фазовом соотношении компонентов подвижной фазы (вода/ацетонитрил) 50/50 и 40/60 об.% термодинамические параметры сорбции значительно ниже в системах с тетрафторборатной ИЖ, чем в системах с бромидной ИЖ. При 70 об.%-ом содержании ацетонитрила в подвижной фазе, содержащей бромидную ИЖ, энтальпия и энтропийная составляющая сорбции бензимидазолов уменьшается. Изучены энтальпийно-энтропийные компенсационные зависимости в системах «водный раствор ИЖ – ацетонитрил – СПС» для выявления сходства физико-химических процессов сорбции бензимидазолов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Министерства образования и науки РФ №FSSS-2020-0016.*

1. M. C. García-Alvarez-Coque, M. J. Ruiz-Angel, A. Berthod, S. Carda-Brochet. Anal. Chim. Acta., 2015, **883**, 1-21.

## ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ИНЖЕКЦИОННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕЗИПРАМИНА АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИМИ ИММУНОСЕНСОРАМИ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Е.В. Расперетихина, Э.Р. Газизуллина, Д.В. Брусницын, Э.П. Медянцева

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*erasperetihina@gmail.com*

Важным аспектом контроля содержания лекарственных препаратов в потоке является возможность проведения селективного анализа, а также автоматизации процесса. Увеличение чувствительности и селективности связано с использованием иммуносенсоров, которые позволяют проводить экспрессное определение лекарственных препаратов практически без предварительной пробоподготовки.

Предложены новые амперометрические иммуносенсоры на основе печатных графитовых электродов, модифицированных гибридными наноматериалами (электрогенерированным восстановленным оксидом графена в сочетании с наноалмазами или нанокластерами рения в хитозане) для определения дезипрамина в режиме последовательного инъекционного анализа.

Проведено исследование гибридных наноматериалов методами спектроскопии электрохимического импеданса, сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопией.

В рамках работы проведена оценка селективности иммунологических взаимодействий (определение перекрестной реактивности используемых антител).

Подобраны оптимальные условия функционирования амперометрического иммуносенсора на дезипрамин в потоке (фоновый электролит, скорость потока, общий инъецируемый объем и объем пробы), а также разведение антител против трициклических антидепрессантов.

Использование амперометрического иммуносенсора для анализа дезипрамина в потоке возможно в области рабочих концентраций  $1 \times 10^{-9}$  -  $1 \times 10^{-5}$  моль/л, нижняя граница определяемых концентраций до  $9 \times 10^{-10}$  моль/л.

Анализ дезипрамина в биологических жидкостях является актуальной задачей, так как он является метаболитом амитриптилина.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПИРИДОКСИНА И ФОЛИЕВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ПЛЕНКОЙ ИЗ ПОЛИ-(3,4-ЭТИЛЕДИОКСИТИОФЕНА) С ВКЛЮЧЕННЫМ ГЕКСАЦИАНОКОБАЛЬТАТОМ РУТЕНИЯ

Л.Г. Шайдарова, А.В. Гедмина, И.Е. Рогожин, И.А. Челнокова, Г.К. Будников

*Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, г. Казань.*

*Rogozhin.09@mail.ru*

Витаминная недостаточность влияет на состояние человеческого организма и может стать причиной многих заболеваний. В связи с этим в последнее время все более популярными становятся витаминные фармацевтические комплексы-комбинированные витаминные препараты. Для обеспечения качества таких препаратов необходим контроль содержания в них витаминов.

Изучено электроокисление пиридоксина (В<sub>6</sub>) и фолиевой кислоты (В<sub>9</sub>) на электроде из стеклоуглерода (СУ) с иммобилизованной композитной пленкой на основе поли-3,4-этилендиоксотиофена (ПЭДОТ) с включенным гексацианокобальтатом рутения (III) (ГЦКР) с целью разработки селективного и высокочувствительного способа вольтамперометрического определения исследуемых витаминов группы В.

Установлено, что композитная пленка на основе ГЦКР-ПЭДОТ проявляет каталитическую активность, разница потенциалов каталитического окисления пиридоксина и фолиевой кислоты составляет 150 мВ. Определены условия электрополимеризации ПЭДОТ и иммобилизации на полимерную пленку гексацианометаллата на поверхность СУ для регистрации наибольшего электрокаталитического эффекта. Установлена природа тока окисления исследуемых витаминов группы В на электроде ГЦКР-ПЭДОТ-СУ.

Разработан способ селективного вольтамперометрического обнаружения фолиевой кислоты и пиридоксина на ГЦКР-ПЭДОТ-СУ. Нижняя граница определяемых содержаний составляет  $5 \times 10^{-7}$  М для пиридоксина и  $5 \times 10^{-9}$  М для фолиевой кислоты. Разработанный вольтамперометрический способ определения апробирован на примере анализа витаминных комплексов, содержащих пиридоксин и фолиевую кислоту.

## СИНТЕЗ КАРБО- И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННОГО МЕТАЛЛОФЕРМЕНТА НА ОСНОВЕ АЛЬБУМИНА

И.С. Смирнов<sup>a</sup>, И.О. Насибуллин<sup>a,b</sup>, А.Р. Курбангалиева<sup>a</sup>, К. Танака<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Кластер новаторских исследований RIKEN, Вако, Япония;

<sup>c</sup> Токийский технологический институт, Токио, Япония.

*IvSSmirnov@kpfu.ru*

Исследования в области разработки искусственных металлоферментов в последнее десятилетие привлекают огромное внимание химиков. Интерес вызван уникальными свойствами искусственных металлоферментов, поскольку они объединяют в себе как достоинства гомогенных металлокатализаторов, катализируя несвойственные живому организму реакции, так и достоинства природных ферментов, ускоряя целевые реакции в водной или биологической средах [1].

В нашей работе был использован искусственный металлофермент на основе человеческого сывороточного альбумина и модифицированного катализатора Ховейды-Граббса 2-го поколения [2]. Нами предложена простая и эффективная методика синтеза различных субстратов для получения карбо- и гетероциклических ароматических систем с помощью реакции метатезиса олефинов с замыканием цикла и последующим элиминированием с использованием искусственного металлофермента на основе альбумина. Разработан метод синтеза субстратов для получения производных нафталина, антрацена, фенантрена, карбазола, индола, бензо[*b*]тиофена, дибензофурана. Выявлено влияние особенностей электронной и пространственной структуры субстратов на выход продукта реакции метатезиса. В ряду производных нафталина показано, что субстраты с электроноакцепторными заместителями обладают более высокой реакционной способностью, чем с донорными. Кроме того, обнаружено, что в водно-органической среде субстраты с винильными группами, непосредственно связанными с ароматическим кольцом, реагируют хуже, чем субстраты с аллильной группой.

1. F. Schwizer, Y. Okamoto, T. Heinisch, Y. Gu, M.M. Pellizzoni, V. Lebrun, R. Reuter, V. Köhler, J.C. Lewis, T.R. Ward. *Chem. Rev.*, 2018, **118**, 142–231.
2. S. Eda, I. Nasibullin, K. Vong, N. Kudo, M. Yoshida, A. Kurbangalieva, K. Tanaka. *Nat. Catal.*, 2019, **2**, 780–792.



## СВЯЗЬ МЕЖДУ ИЗМЕНЕНИЕМ ТЕПЛОЁМКОСТИ ПРИ ИСПАРЕНИИ НОРМАЛЬНЫХ И РАЗВЕТВЛЕННЫХ АЛКАНОВ И ЭНТАЛЬПИЕЙ ИСПАРЕНИЯ И ПРОГНОЗ ЕЁ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ

А.А. Соколов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*andsok1999@gmail.com*

Энтальпия испарения является одним из ключевых термодинамических параметров вещества. Как фундаментальные, так и прикладные задачи требуют знания энтальпии испарения в широком диапазоне температур. В частности, особый интерес представляет изучение энтальпий испарения алканов, как компонентов нефти, для определения температурной зависимости давления её паров и параметров их разделения. Согласно закону Кирхгофа, температурная зависимость энтальпии испарения определяется разностью теплоёмкостей жидкости и газа. Данные об этих величинах редко одновременно доступны из литературы. В связи с этим ранее Чикосом и сотр. была предложена схема для оценки разности теплоёмкости жидкости и газа, предполагающая её линейную зависимость от теплоёмкости жидкости [1], которую можно рассчитать по аддитивной схеме. Эта схема широко применяется исследователями в области термохимии фазовых переходов, однако имеет ряд существенных ограничений [2]. В настоящей работе были выявлены соотношения между разностью теплоёмкостей жидких и газообразных алканов и энтальпиями испарения при 298.15 К [3]. С использованием этих соотношений был разработан подход к расчёту энтальпий испарения как нормальных, так и разветвленных алканов при произвольной температуре.

1. J.S. Chickos, S. Hosseini, D.G. Hesse, J.F. Liebman. *J. Struct. Chem*, 1993, **4**, 271-278.
2. M.I. Yagofarov, B.N. Solomonov. *J. Chem. Thermodyn.*, 2021, **152**, 106278.
3. M.I. Yagofarov, D.N. Bolmatenkov, B.N. Solomonov. *J. Chem. Thermodyn.*, 2021, **158**, 106443.

## ИМПЕДИМЕТРИЧЕСКИЕ ИММУНОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ НАНОМОДИФИКАТОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИМИПРАМИНА

А.М. Солдатова, Э.Р. Газизуллина, Д.В. Брусницын, Э.П. Медянцева, М.А. Зиганшин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*solnishkoru@outlook.com*

В последнее время активно растет число публикаций с использованием в составе электрохимических иммуносенсоров наноструктурированных материалов, которые позволяют увеличить удельную площадь поверхности электрода, а также повысить электропроводность первичного преобразователя сигнала. Необходимо отметить, что с каждым годом увеличивается число стрессовых ситуаций, поэтому нужно контролировать содержание антидепрессантов на предмет фальсификата, поэтому их анализ является актуальной задачей в области аналитической химии.

Анализ литературы показывает, что отсутствуют публикации с использованием гексарениевых халькогенидных нанокластеров в качестве модификаторов биосенсоров. Это отражает новизну работы.

Разработаны импедиметрические иммуносенсоры для определения имиπραмина на основе печатных графитовых электродов, модифицированных фуллереном C<sub>60</sub> в сочетании с гексарениевыми халькогенидными нанокластерами.

Проведен скрининг наноструктурированных материалов методами спектроскопии электрохимического импеданса и атомно-силовой микроскопией. Методом атомно-силовой микроскопии оценена шероховатость поверхности, а также распределение наноструктурированных материалов на электроде. Варьировали количество модификаторов и биочувствительного компонента (антител) на поверхности электрода.

Установлено, что область рабочих концентраций имиπραмина для импедиметрического иммуносенсора изменяется в диапазоне  $1 \times 10^{-10}$  -  $1 \times 10^{-6}$  моль/л, а нижняя граница определяемых концентраций до  $8 \times 10^{-11}$  моль/л.

Практическая значимость работы заключается в возможности проводить высокочувствительное определение трициклического антидепрессанта имиπραмина в биологических жидкостях, в частности в моче и грудном молоке.

## НОВЫЙ ПОДХОД К УВЕЛИЧЕНИЮ РАВНОВЕСНОЙ СТЕПЕНИ НАБУХАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ СУПЕРАБСОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

А.В. Сорокин<sup>a,b</sup>, М.С. Лавлинская<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж, Россия;

<sup>b</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия.

*maria.lavlinskaya@gmail.com*

Большой практический интерес представляют композиционные суперабсорбенты (САП), сочетающие в себе синтетические и биodeградируемые полисахаридные звенья. Их важнейшей характеристикой является величина равновесной степени набухания  $Q_e$ . Основные факторы, оказывающие влияние на этот параметр – природа и содержание полисахарида, а также количество сшивающего агента, используемого в синтезе. Как правило, высокое содержание этих компонентов снижает величину равновесной степени набухания. Перспективным подходом к увеличению равновесной степени набухания композитных САП с относительно высоким содержанием полисахарида в полимерной матрице является пластификация. В связи с этим целью настоящей работы – изучение влияния дибутилсукцината на равновесную степень набухания композитных суперабсорбентов на основе натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы.

Композитные суперабсорбенты синтезировали растворной осадительной полимеризацией при 80 °С с использованием акриловой кислоты, акриламида и *N,N*-метилен-*bis*-акриламида с содержанием 10 или 20 % масс. натрий-карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ,  $M_w$   $10 \times 10^3$  и степенью замещения 0.7). После окончания реакции продукты перетирали с 10 %-ным раствором гидроксида калия и 0 – 10 % масс. дибутилсукцината (ДБС) и высушивали до постоянной массы.

Равновесная степень набухания композиционных САП в дистиллированной воде уменьшается при увеличении содержания КМЦ в матрице суперабсорбента несмотря на то, что поверхность полимеров становится более развитой и пористой. Введение 5 % масс. ДБС повышает равновесную степень набухания до 51 % по сравнению с образцами, не содержащими добавку, причем наиболее ярко эффект выражен на образцах, содержащих 20 % масс. КМЦ. Внесение 2 % масс. ДБС практически не оказывает влияния на равновесную степень набухания композитных САП, а при содержании добавки 10 % масс. значения  $Q_e$  уменьшаются.

Таким образом, можно заключить, что при содержании 5 % масс. дибутилсукцината последний является эффективным пластификатором для композитных суперабсорбентов на основе КМЦ.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-74-20053.*

## НАНОКЛАСТЕРЫ РЕНИЯ В СОСТАВЕ ИММУНОСЕНСОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ АНТИДЕПРЕССАНТОВ

М.М. Старцева<sup>a</sup>, Э.Р. Газизуллина<sup>a</sup>, Д.В. Брусницын<sup>a</sup>, Э.П. Медянцева<sup>a</sup>, Ю.Г. Елистратова<sup>b</sup>,  
А.Р. Мустафина<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> КазНЦ РАН ИОФХ им. Арбузова, Казань.

*startsevamn@gmail.com*

Впервые для регистрации иммунохимических взаимодействий использованы гексарениевые халькогенидные кластеры, которые обладают высоким отрицательным зарядом, который можно рассматривать в качестве движущей силы адсорбции кластеров на углеродных наноматериалах, и электрохимической активностью.

Нанокластеры ( $K_4[Re_6S_8](OH)_6$ ] и  $K_4[Re_6S_8](CN)_6$ ]) в сочетании с углеродными наноматериалами (углеродные нанотрубки и оксид графена) использованы в качестве модификаторов печатных графитовых электродов в составе иммуносенсоров. Свойства и морфология модифицированных поверхностей изучены разными методами, в частности атомно-силовой микроскопией, что позволило получить параметры шероховатости поверхности для различных наномодификаторов.

При этом на вольтамперограммах наблюдаются токи электрохимического окисления гидрокси- и цианидных кластеров рения.

Согласно данным спектроскопии электрохимического импеданса выбраны гибридные наноматериалы с наименьшим значением сопротивления переноса электрона.

Также проводили варьирование концентрации поликлональных антител против трициклических антидепрессантов (биочувствительный компонент) на поверхности электрода.

Использование гексарениевых халькогенидных нанокластеров в сочетании с углеродными наноматериалами в качестве гибридных модификаторов позволило разработать высокочувствительные и селективные амперометрические и импедиметрические иммуносенсоры для определения трициклических антидепрессантов (амитриптилин, дезипрамин, имипрамин) в фармацевтических препаратах и моче. Нижняя граница определяемых содержаний на уровне  $(4-7) \times 10^{-11}$  М. Относительное стандартное отклонение не превышает 0.050.

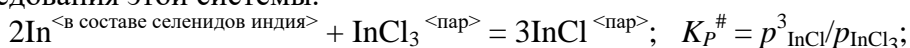
## ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЯ ПАРОВ ХЛОРИДОВ ИНДИЯ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ СИСТЕМЫ In – Se

Н.Ю. Брежнев, А.В. Косяков, А.В. Стейч, А.Ю. Завражнов

*Воронежский государственный университет, Воронеж.*

*nastya.steitch@yandex.ru*

Работа посвящена исследованию фазовых равновесий в системе In – Se, промежуточные фазы которой перспективны для полупроводниковой электроники. Нами показана возможность применения метода вспомогательного компонента с использованием паров хлоридов индия для исследования этой системы.



Равновесие изучали при помощи высокотемпературной спектrophотометрии паровой фазы. Значительная информация о фазовой диаграмме системы In – Se извлекается при анализе температурной зависимости величины  $K_P^\#$ , для определения которой необходимы значения парциальных давлений ненасыщенных паров  $\text{InCl}_3$  и  $\text{InCl}$ . По этой причине на первом этапе эксперимента определяли величины коэффициентов молярной экстинкции паров хлоридов:  $\varepsilon_{\text{InCl}_3}$  и  $\varepsilon_{\text{InCl}}$ . На втором этапе проводили непосредственное спектrophотометрическое исследование гетерогенное равновесия ненасыщенного пара хлоридов индия с некоторыми фазами системы In – Se. При этом найденные на первом этапе значения  $\varepsilon_{\text{InCl}_3}$  и  $\varepsilon_{\text{InCl}}$  позволили рассчитать для каждой температуры парциальные давления  $p_{\text{InCl}}$  и  $p_{\text{InCl}_3}$  и, далее, –  $K_P^\#$ .

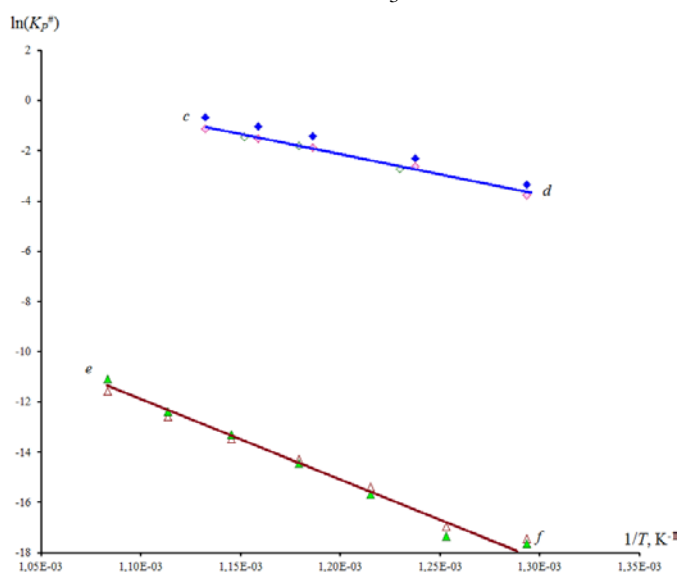


Рисунок 1 – Температурные зависимости величины  $K_P^\#$  для равновесия (1): паровая фаза – хлориды индия, конденсированная фаза – сплавы системы In – Se. Линия |cd| – сплав состава 50.0 мол.% Se, линия |ef| – сплав состава 58.5 мол.% Se.

Построены температурные зависимости величины  $K_P^\#$  для некоторых гетерогенных сплавов системы In – Se. Выявлено, положение линий  $K_P^\# - T$ -зависимостей оказывается уникальным для каждого набора фаз системы In – Se. Это доказывает возможность использования метода вспомогательного компонента в его спектrophотометрическом воплощении для изучения рассматриваемой системы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-33-90238 (асп.)*

## СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ НОВЫХ ГОМОЯДЕРНЫХ D- И F-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ДИЗАМЕЩЕННЫХ ИМИННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКС(4)АРЕНОВ

Стрельникова Ю.В.<sup>b</sup>, Агарков А.С.<sup>a,b</sup>, Князева М.В.<sup>a,b</sup>, Овсянников А.С.<sup>a,b</sup>, Исламов Д.Р.<sup>a,b</sup>,  
Губайдуллин А.Т.<sup>a</sup>, Соловьева С.Е.<sup>a,b</sup>, Антипин И.С.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия, 420088, Россия, г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 8;

<sup>b</sup> Казанский федеральный университет, Казань, Россия, 420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18.

Актуальной задачей супрамолекулярной химии является дизайн и синтез структур в кристаллической фазе как материалов с заранее определенными физическими свойствами на основе макроциклических соединений из-за их применения в нескольких областях, таких как хранение, катализ и разделение.

Применение макроциклических соединений имеет ряд серьезных преимуществ по сравнению с традиционными лигандами при конструировании различных рецепторных структур, на основе которых и создаются функциональные материалы: 1) возможность введения нескольких полидентатных рецепторных фрагментов в одну молекулу и их пространственная предорганизация, 2) эффективное применение подходов молекулярной тектоники для направленного дизайна супрамолекулярных структур в кристаллической фазе, 3) практически неограниченные возможности в их декорировании различными функциональными группами [1,2]. Функционализация макроциклов производными салена позволяет получать комплексы с катионами d-металлов, обладающие люминесцентными и магнитными свойствами.

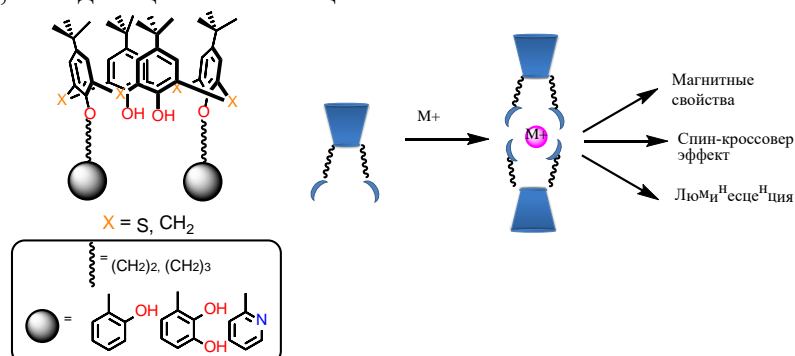


Рисунок 1 – Стратегия синтеза целевых производных (тия)каликс[4]арена.

В настоящей работе синтезированы полидентатные основания Шиффа саленового типа и металлокомплексы на их основе, потенциально обладающие магнитными и люминесцентными свойствами. Также была установлена структура железного (III) комплекса на основе макроцикла, содержащего саленовый координирующий фрагмент.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00519.*

1. A. Ovsyannikov, S. Solovieva, I. Antipin, S. Ferlay Coord. Chem. Rev. 2017, 352, 151–186;
2. A.S. Ovsyannikov, S. Ferlay, E.F. Chernova, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, M.W. Hosseini Macroheterocycles 2017, 10, 410-420.

## ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: САМОСБОРКА И СЕЛЕКТИВНОЕ РАСПОЗНАВАНИЕ ЛИЗОЦИМА

В.Р. Султанаев, Л.С. Якимова, К.С. Шибаета, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*vildan\_sultanaev@mail.ru*

Актуальной проблемой в современном научном мире является поиск новых материалов для создания систем с контролируемыми свойствами для решения задач медицины, диагностики и адресных систем доставки [1]. Высокоэффективными оказываются полифункциональные производные (тия)каликс[4]арена и комплексы на их основе, которые представляют собой особый класс полимерных материалов, образованных посредством нековалентной самосборки [2]. Введение различных заместителей позволяет данным структурам селективно связываться с широким спектром биологических молекул и определяет их физические свойства.

В данной работе были синтезированы макроциклические анионные производные тиакаликс[4]арена в конформации *1,3-альтернат*, функционализированные по нижнему ободу остатками аминокислоты и ее аммониевой солью. Установлено образование наноразмерных частиц в присутствии катионов серебра, проведена корреляция между размером образующихся частиц и природой функциональной группы в структуре макроцикла.

Интерполиэлектролитные комплексы, образованные посредством нековалентной самосборки противоположно заряженных синтезированных производных и *n*-*трет*-бутилтиакаликс[4]арена в конформации *1,3-альтернат*, функционализированного четырьмя гуанидиниевыми фрагментами, проявили селективность в распознавании лизоцима в ряду модельных белков (гемоглобина и бычьего сывороточного альбумина).

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-73-10094, <https://rscf.ru/project/18-73-10094/>.*

1. S. Chen, Q. Li, X. Wang, Y.-W. Yang, H. Gao. *J. Mater. Chem.*, 2018, **6**, 5198–5214.
2. F. Perret, A.N. Lazar, A.W. Coleman. *Chem. Commun.*, 2003, **26**, 2425–2438.

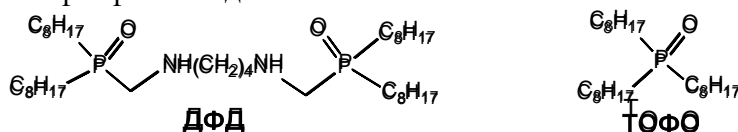
## МЕМБРАННО-ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ФОСФОРИЛИРОВАННОГО 1,4-ДИАМИНОБУТАНА

Д.Р. Султанова, Н.В. Давлетшина, Р.А. Черкасов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

diana.sultanova.02@yandex.ru

В нашей исследовательской группе было установлено, что би- и тетерафосфорилированные аминоксиды и их производные являются эффективными экстрагентами и переносчиками редкоземельных металлов (РЗМ) и органических субстратов [1,2]. Настоящая работа является продолжением исследований в этой области. В качестве переносчика использовался полученный фосфорилированный диамин ДФД и промышленный экстрагент триоктилфосфиноксид ТОФО.



В таблице 1 представлены результаты изучения активного мембранного транспорта РЗМ в оптимизированных условиях.

Таблица 1. Мембранная экстракция М(III):  $V_{\text{отд}} = 165$  мл,  $V_{\text{пр}} = 30$  мл;  $C_{0(\text{РЗМ})} = 2.2 \cdot 10^{-3}$  М,  $C_{\text{KNO}_3} = 0.25$  М,  $C_{\text{пер}} = 0.1$  М.

№	Р · 10 <sup>6</sup> м/с						
	Sm	Nd	Gd	Y	La	Dy	Eu
<b>ДФД</b>	6.8	8.1	9.6	4.6	6.2	7.5	7.6
<b>ТОФО</b>	7.0	4.9	4.3	4.0	3.0	4.6	4.1

Изучено влияние солевой добавки (аниона) на величину проницаемости для иона неодима и установлена следующая последовательность  $\text{Cl}^- > \text{Br}^- \sim \text{SO}_4^{2-} > \text{ClO}_4^- > \text{I}^- \sim \text{NO}_3^-$

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (№ 0671-2020-0063).

1. Н.В. Давлетшина, И. Р. Насыров, А. Р. Хабибуллина, Р. Р. Давлетшин, А. З. Гайнуллин, Р. А. Черкасов. ЖОХ, 2019, **89**, 12, 1915-1524.
2. N. Davletshina, R. Cherkasov, A. Garifzyanov. Phosphorus, Sulfur, Silicon Relat. Elem., 2013, **188**, 1-3, 4-6.



## ОКСИРАНЫ В СИНТЕЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ 2-ГИДРОКСИФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

Е.А. Титов<sup>a,b</sup>, А.В. Немтарев<sup>a,b</sup>, Т.Н. Паширова<sup>b</sup>, В.Ф. Миронов<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр, Казань.

EvATitov@kpfu.ru

При взаимодействии оксиранов с фосфинами в условиях кислотного катализа образуются фосфониевые соли, обладающие широким спектром биологической активности, что подтверждает большое число опубликованных работ по данной теме. В частности доказано, что многие соединения данной группы обладают митохондриально направленной противоопухолевой активностью [1], а также проявляют доказанную противомикробную активность, связанную с взаимодействием с патогенными клетками. В особенности, в настоящее время внимание обращено на соли, содержащие триарилфосфониевую группу, благодаря высокой гидрофобности и делокализованному положительному заряду, которой, собственно, и удаётся преодолевать мембраны опухолевых клеток и митохондрий, характеризующиеся большими трансмембранными потенциалами [2]. Кроме фармацевтической, фосфониевые соли широко применяются в различных отраслях в качестве катализаторов [3], ионных жидкостей, рентгеноконтрастных агентов, промежуточных соединений для получения тетра- и пентакоординированных соединений фосфора и т.д [4]. В докладе описана цитотоксичность по отношению к избранным опухолевым и здоровым линиям синтезированных из доступных реагентов в мягких условиях для ряда 2-гидроксипропил(трифенил)фосфониевых солей, являющихся производными высших карбоновых кислот, разработаны оптимальные подходы к их синтезу. Так же была определена практическая целесообразность включения синтетических фосфониевых солей, имеющих жирные фрагменты, в состав мембраны липосомальных систем, физико-химические свойства и методы получения которых были представлены.

1. A. Kulkarni, D. Fink, E. Gibbs et al. *J. Med. Chem.* 2021, **64**, 662–676.
2. J.Zielonka, J.Joseph, A.Sikora et al. *Chem. Rev.* 2017, **117**, 10043-10120.
3. J. Steinbauer, L. Longwitz, M. Frank et al. *Green Chemistry.* 2017, **18**, 4435–4445.
4. M.Selva, A. Perosa, G.Fiorani. *Organophosphorus Chemistry.* RSC. 2019, **48**, 145-198.

## КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЗОПОРИСТОГО СИЛИКАГЕЛЯ, ДОПИРОВАННОГО ЛАНТАНОМ И МОДИФИЦИРОВАННОГО НИКЕЛЕМ В РЕАКЦИЯХ ГИДРИРОВАНИЯ КСИЛОЛОВ

А.А. Токранов, Е.О. Токранова, Р.В. Шафигулин, А.В. Буланова

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева,  
Самара.*

*fileona@mail.ru*

Методом темплатного синтеза был получен образцы мезопористого силикагеля (МС), допированного лантаном и модифицированного никелем (La-Ni/МС). Наличие лантана, никеля в образцах подтверждено рентгенофлуоресцентного анализа (РФА). Концентрации никеля и лантана в образцах составили: Ni – 7%, La – 1,8 % по массе.

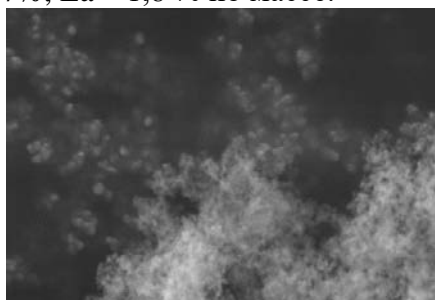


Рисунок 1 – СЭМ - фотографии образца La-Ni/МС.

Размеры и форму частиц, полученных мезопористых материалов исследовали методом электронной микроскопии (СЭМ). Установлено, что частицы материала имеют форму близкую к сферической, их средний размер составляет 100 нм (рисунок 1). Текстурные характеристики определялись методом адсорбции-десорбции азота на Quantochrome Autosorb-1. Удельная площадь поверхности рассчитывали методом БЭТ. Удельная площадь поверхности Dy-Ni/МС составляет  $215 \text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ .

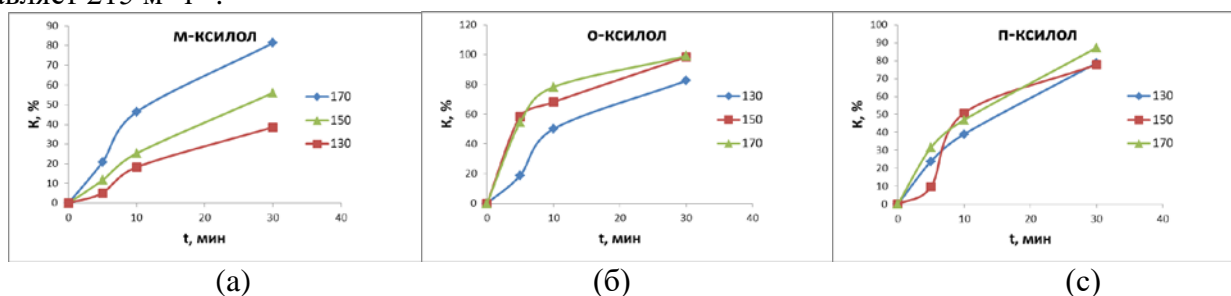


Рисунок 2 – Зависимость конверсии от времени гидрирования для а) м-ксилола; б) о-ксилола; в) п-ксилола на катализаторе La-Ni/МС.

Гидрирование о-, м- и п-ксилолов проводили в статическом режиме, в интервале температур 80 - 170 °С и давлении водорода 3 атм, на оригинальной установке, позволяющей в on-line режиме осуществлять анализ реакционной смеси.

Повышение температуры реакции оказывает наибольшее влияние при гидрировании м-ксилола. С увеличением температуры от 130°С до 170 °С конверсия м –ксилола конверсия возрастает больше чем в 2,5 раза (рисунок 2).

*Работа выполнена в рамках госзадания №\_FSSS-2020-0016.*

## ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ МЕТОД КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА ПРИМЕСЕЙ В ЖИДКИХ РАСТВОРАХ

А.С. Федоров

*ФГБОУ ВО НИУ «Московский авиационный институт», Москва, Россия.*

*feorov2001@mail.ru*

Целью экспериментальной работы является изучение возможностей установки для наблюдения и измерения угловых параметров вращения плоскостей поляризации в оптически активных жидких средах. Это нужно для количественного анализа примесей в жидких прозрачных растворах. Актуальность работы обоснована необходимостью повышения эффективности лечения с индивидуальным подбором лекарственных средств.

Принцип работы установки на оптических явлениях. Имеется два скрещенных «николя», работающих по принципу дихроизма (пленки). Между ними помещается кювета с раствором, оптическую активность которого желательно установить. Если раствор оптически активен, то на экране, расположенном за анализатором видно просвечивание. Погасить его можно, повернув анализатор на угол, равный некоторому углу вращения плоскости поляризации [1]. Для большей точности результата предполагается повторение опытов и оценка погрешности. Возможно применение фотоэлектрических устройств, регистрирующих освещенность фотоэлемента вплоть до минимума. Установка создана в лаборатории активного теплообмена кафедры физики НИУ МАИ по инициативе В.М. Анисимова и В.Б Дроботова [2]. При создании был использован опыт работы учебно-научной лаборатории оптики кафедры физики НИУ МАИ. Для обработки экспериментальных данных были задействованы компьютерные программы: система аналитических вычислений SageMath, язык программирования Python в среде разработки JupiterNotebook, программное обеспечение Blender. Методы цифровой обработки позволили выявить особенности в оптическом анализе растворов лекарств. Выявленные особенности необходимы для индивидуализации медицинских назначений специалистами.

1. Рашиков В.И., Рошаль А.С. Численные методы решение физических задач. - Издательство «Лань», 2005.
2. Анисимов В.М. Физика конденсированного состояния. - М.: Изд. дом «Наука», 2019.

## ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ АЛЬБУМИНА В ПРИСУТСТВИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ

Д.Р. Хайбрахманова, А.А. Никифорова, И.А. Седов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*diliarakhaibrakhmanova@gmail.com*

Изучение ингибирования фибриллообразования белков является важным направлением в области разработки терапии лечения амилоидозов. Альбумин является амилоидогенным белком, для которого доказано непосредственное участие в амилоидогенезе в человеческом организме, однако его фибриллообразование сравнительно слабо изучено.

Целью работы было изучение фибриллообразования альбумина в присутствии лигандов с различной аффинностью. Известно, что напроксен, ибупрофен и варфарин связываются с альбумином на 99 и более процентов, в то время как изониазид и ранитидин менее, чем на 20%.

Фибриллы бычьего сывороточного альбумина (БСА) были получены инкубированием раствора белка концентрацией  $5 \text{ мг}\cdot\text{мл}^{-1}$  в 25 мМ трис-буфере pH 7,4 при  $65^\circ\text{C}$  в течение 160 минут в присутствии различных избытков изучаемых лигандов (отношение молярных концентраций лиганда к белку 0, 1, 2 и 10). Через некоторые промежутки времени из раствора отбирались аликвоты и использовались для дальнейших исследований.

Полученные образцы были исследованы с помощью метода спектрофлуориметрии с тиофлавином Т, спектроскопии кругового дихроизма (КД) и спектрофотометрии с конго красным. Результаты показывают, что в присутствии ибупрофена, варфарина и напроксена подавляется образование фибрилл, причем их количество снижается с ростом концентрации лиганда. Ранитидин и изониазид не влияют на процесс фибриллообразования.

Лиганды, связываясь с БСА, уменьшает долю денатурированной формы при  $65^\circ\text{C}$ . По кривым денатурации альбумина в присутствии лигандов, полученным с помощью метода дифференциальной сканирующей калориметрии, были рассчитаны доли денатурированной формы альбумина при температуре эксперимента. Оказалось, что количество образующихся фибрилл коррелирует с долей денатурированной формы и не зависит от природы лиганда. Таким образом, было показано, что напроксен, ибупрофен и варфарин подавляют образование фибрилл БСА за счет уменьшения концентрации денатурированной формы белка, при этом не оказывая заметного влияния на скорость роста фибрилл и другие кинетические параметры процесса фибриллообразования.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-315-90053.*

## АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ 5-ГИДРОКСИТРИПТОФАНА, ВИТАМИНА В6 И ВИТАМИНА С НА ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА, В УСЛОВИЯХ ПРОТОЧНО-ИНЖЕКЦИОННОГО АНАЛИЗА

Д.Ю. Хайруллина, Ю.А. Лексина, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт  
им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия.*

*khairullinadarina@gmail.com*

Витамин В6, витамин С и 5-гидрокситриптофан (5-НТР) играют важную роль в работе центральной нервной системы и головного мозга. 5-гидрокситриптофан необходим для синтеза серотонина и мелатонина, адаптирует организм к смене часовых поясов и изменению режима дня, улучшает качество сна, повышает настроение, эмоциональный фон, снижает стрессовые реакции, раздражительность, утомляемость, повышает работоспособность. Витамин В6, как кофермент, участвует в более ста ферментативных реакциях метаболизма белков, углеводов и липидов. Он особенно важен для метаболизма аминокислот, его используют при лечении различных неврологических заболеваний. Витамин С укрепляет иммунную систему человека, предохраняет её от вирусов и бактерий, ускоряет процесс заживления ран, оказывает влияние на синтез ряда гормонов, регулирует процессы кроветворения и нормализует проницаемость капилляров, выводит токсины, улучшает желчеотделение, восстанавливает внешнесекреторную функцию поджелудочной и щитовидной железы. Анализ в потоке жидкости является одним из распространенных способов автоматизации процесса, обеспечивающий высокую чувствительность определения и широкий линейный динамический диапазон при относительно низкой стоимости оборудования.

Целью данной работы являлось определение возможности амперометрического детектирования 5-НТР, витамина В6 и витамина С на планарных электродах (ПЭ), модифицированном наночастицами золота, в условиях проточно-инжекционного анализа (ПИА).

На углеродных электродах 5-НТР, витамин В6 и витамин С окисляются в одной области потенциалов, поэтому их определение при совместном присутствии осложнено перекрыванием пиков. Наночастицы золота, иммобилизованные на поверхность углеродного электрода, проявляют каталитическую активность при окислении рассматриваемых соединений. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшение перенапряжения окисления субстратов на ХМЭ по сравнению с немодифицированным электродом. Каталитический отклик полученного ХМЭ отличается высокой стабильностью и воспроизводимостью.

Разработан способ амперометрического детектирования 5-НТР, витамина В6 и витамина С на ХМЭ в условиях ПИА. В качестве детектора использованы ПЭ, модифицированные наночастицами золота. Определены рабочие условия регистрации сигналов на ПЭ, модифицированных наночастицами золота в проточных условиях. При этом линейная зависимость тока пика от концентрации аналита наблюдается в интервале от  $5 \times 10^{-9}$  до  $5 \times 10^{-3}$  М для 5-НТР и от  $5 \times 10^{-8}$  до  $5 \times 10^{-3}$  М для витамина В6 и  $5 \times 10^{-8}$  до  $5 \times 10^{-3}$  М для витамина С. Разность потенциалов пиков окисления рассматриваемых соединений составляет 300-700 мВ. При использовании ХМЭ в проточной ячейке без обновления поверхности электродов в течение суток воспроизводимость сигнала достаточно устойчива ( $S_r < 2.0$  %).

Предложенный способ отличается простотой, воспроизводимостью и экспрессностью метода анализа и позволяет проводить селективное определение 5-НТР, витамина В6 и витамина С с высокой чувствительностью в лекарственных средствах.

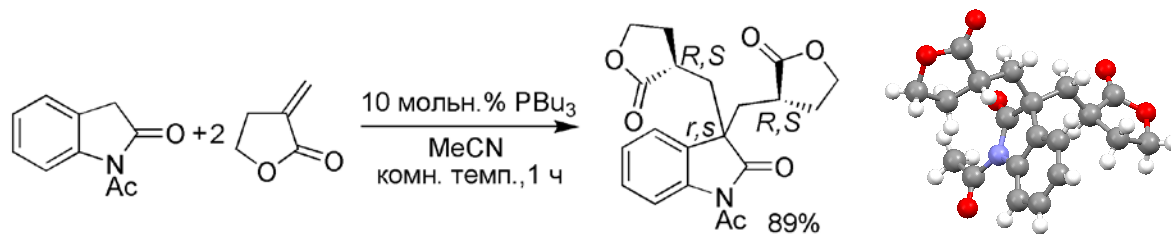
## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОКСИНДОЛА С $\alpha$ -МЕТИЛЕН- $\gamma$ -БУТИРОЛАКТОНАМИ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ТРИБУТИЛФОСФИНОМ

А.А. Шабанов, А.В. Салин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*grindaman@mail.ru*

Производные оксиндола привлекают большое внимание, поскольку данный фрагмент присутствует в структуре многих природных и синтетических соединений, обладающих биологически активными свойствами [1,2]. Особый интерес представляют конформационно жесткие 3,3-дизамещенные производные, имеющие четвертичный атом углерода, который присутствует в составе оксиндольных алкалоидов: хорсфилина, элакомина, стрихнофолина и др. Разработка эффективных методов синтеза таких производных является непростой и актуальной задачей. Ранее в нашей группе была обнаружена повышенная реакционная способность  $\alpha$ -метилден- $\gamma$ -бутиролактонов в реакциях с третичными фосфинами за счет эффекта анхимерного содействия [3], что позволило в мягких условиях проводить функционализацию данных гетероциклических соединений в условиях катализа третичными фосфинами. В настоящей работе данный эффект был использован для синтеза 3,3-дизамещенных производных оксиндола:



Реакции тулипалина А и арглабина с N-ацетилированным оксиндолом дают исключительно продукты двойного присоединения по Михаэлю. Мезо-формы и диастереомеры, полученные из тулипалина А, были разделены с помощью колоночной хроматографии и идентифицированы по отдельности; диастереомерного избытка в реакции не наблюдается. Реакция с участием арглабина протекает диастереоселективно без эпимеризации возникающих стереоцентров.

1. C.V. Galliford, K.A. Scheidt. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, **46**, 8748-8758.
2. B.M. Trost, M.K. Brennan. *Synthesis*, 2009, **2009**, 3003-3025.
3. A.V. Salin, D. R. Islamov. *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 7293-7299.

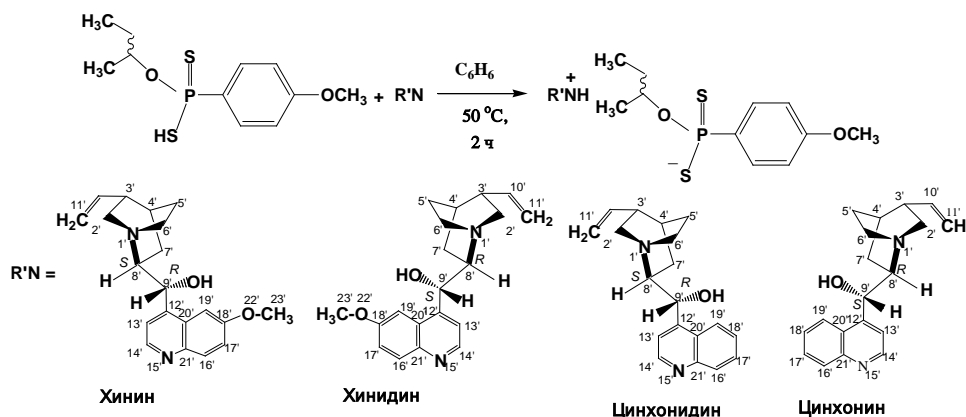
## РАЦЕМИЧЕСКИЕ СПИРТЫ В СИНТЕЗЕ ХИРАЛЬНЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЦИНХОНОВЫХ АЛКАЛОИДОВ И АМИНОКИСЛОТ

А.Р. Шаймарданов, В.Ю. Якимов, И.С. Низамов, Р.А. Черкасов, И.Д. Низамов

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*isnizamov@mail.ru*

Дитиофосфоновые кислоты и их соли с несколькими асимметрическими центрами перспективны для создания новых антимикробных препаратов. Для их синтеза можно использовать реагент Лоуссона и его гомологи, которые содержат прохиральные атомы фосфора. Для решения этой проблемы можно использовать такие рацемические спирты, как бутанол-2 и 2-этилгексанол. На их основе можно синтезировать дитиофосфоновые кислоты и ввести их в реакции с азотистыми органическими соединениями. Среди азотистых органических соединений цинхоновые алкалоиды занимают особое положение. Это связано не только с противомаларийной активностью хинина и его диастереомеров, но и присутствием стереоцентров и нескольких функциональных групп в их молекулах. Найдено, что 4-метоксифенилдитиофосфоновая кислота на основе рацемического бутанола-2 реагирует с 8*S*,9*R*-хинином, 8*R*,9*S*-хинидином, 8*S*,9*R*-цинхонидином и 8*R*,9*S*-цинхонином в бензоле при 50 °С в течение 2 ч с образованием оптически активных хинуклидиниевых солей в виде кристаллических веществ.



Синтезированы также оптически активные соли арилдитиофосфоновых кислот на основе 2-этилгексанола и протеиногенных аминокислот. Полученные соли проявили высокую антимикробную активность по отношению к *Bacillus cereus* и *Candida albicans*.

## ДИЗАЙН ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ГИДРАЗИДНЫЕ ФРАГМЕНТЫ, И ИЗУЧЕНИЕ ИХ МЕМБРАНОТРОПНЫХ СВОЙСТВ

И.Э. Шиабиев, А.А. Вавилова, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*shiabiev.ig@yandex.ru*

Транспорт анионов через клеточные мембраны играет важную роль в поддержании нормальных физиологических функций клеток. Изменение проницаемости биомембран может вызывать апоптоз, что может быть использовано для дизайна противоопухолевых препаратов, которые действуют, нарушая гомеостаз клеточных анионов. Интерес представляют органические соединения, которые способны эффективно осуществлять транспорт анионов через фосфолипидные клеточные мембраны. Таким образом, синтетические переносчики анионов имеют большой потенциал в открытии новых химиотерапевтических агентов для лечения рака [1]. Следовательно, дизайн новых анионофорных рецепторов, способных к встраиванию в фосфолипидные мембраны, является важной задачей на пути к созданию эффективных синтетических трансмембранных переносчиков анионов. (Тиа)каликсарены, благодаря лёгкости их модификации и возможности фиксации связывающих групп в пространстве, являются удобными кандидатами для решения этой проблемы.

Ранее нами были получены производные *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащие гидразидные фрагменты в конфигурациях *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*. В данной работе методом турбидиметрии была оценена мембранотропная активность синтезированных соединений (была проведена серия экспериментов с модельными фосфолипидными везикулами на основе ДПФХ (1,2-дипальмитоил-*sn*-глицеро-3-фосфатидилхолина). Также, взаимодействие полученных производных тиакаликсарена с везикулами ДПФХ было изучено методом динамического светорассеяния.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (НШ-2499.2020.3) и молодых российских ученых - кандидатов наук (МК-1279.2020.3).*

1. I. Alfonso, R. Quesada. *Chem. Sci*, 2013, **4**, 3009-3019.



## НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ФОСФОНАТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА И ИХ СЕЛЕКТИВНОЕ РАСПОЗНАВАНИЕ ЛИЗОЦИМА

К.С. Шибаева, В.Р. Султанаев, Л.С. Якимова, И.И. Стойков

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Россия, г. Казань,  
ул. Кремлёвская, 18.*

*alleoks@mail.ru*

В области биомедицинской диагностики и биотехнологии для создания наноконтейнеров для адресной доставки, защиты, хранения и пролонгированного высвобождения биологически активных соединений важно создание биосовместимых, стабилизированных в воде наноматериалов. Для использования в качестве строительных блоков таких наноматериалов в последнее время все больше внимания привлекают к себе макроциклические структуры, способные образовывать супрамолекулярные архитектуры с заданными свойствами. Среди них тиакаликс[4]арены обладают такими преимуществами, как легкий синтез, наличие сульфидных мостиковых фрагментов, способных координироваться с катионами переходных металлов, возможность функционализации верхнего и нижнего ободов группами с различными центрами связывания, конформационное разнообразие (*конус, частичный конус, 1,3-альтернат*).

В данной работе для формирования наноматериалов путем нековалентной самосборки мы предложили использовать две возможности тиакаликсареновой платформы: (1) способность сульфидных мостиков в макроциклах координировать катионы переходных металлов и, как следствие, формировать металлоорганические каркасы (MOF) и (2) направленную функционализацию тиакаликсареновой платформы с образованием интерполиэлектrolитных наноматериалов. В качестве макроциклических прекурсоров были выбраны тиакаликс[4]арены, содержащие на нижнем ободе гуанидиниевые фрагменты и фрагменты аминокислот (метиленифосфоновых кислот).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (No. 18-73-10094).*

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИОКСИДА ТИТАНА, ДОПИРОВАННОГО ЛАНТАНОМ, В РЕАКЦИЯХ ФОТООКИСЛЕНИЯ МЕТИЛОВОГО ОРАНЖЕВОГО И АЛИЗАРИНА КРАСНОГО С

А.А. Шмелев, Р.В. Шафигулин, А.В. Буланова

*Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, Самара.*

*Shmelsasha@yandex.ru*

Актуальной задачей на сегодняшний день является очистка сточных вод от органических загрязнителей. Одним из перспективных методов очистки является фотокатализ. Создание новых фотокаталитических систем на основе диоксида титана позволяет проводить фотоокисление в области видимого спектра поглощения. Целью работы являлся синтез образцов мезопористого диоксида титана, допированного лантаном, и изучение их фотокаталитических свойств на примере реакций фотоокисления метилового оранжевого и ализарина красного С.

Получение образцов чистого диоксида титана и диоксида титана, допированного лантаном, проводили методом темплатного синтеза. В качестве темплата использовали цетилтриметиламмоний бромид (ЦТАБ). Были получены образцы чистого  $\text{TiO}_2$ , и допированные образцы  $\text{La}(9,5)/\text{TiO}_2$  и  $\text{La}(17,9)/\text{TiO}_2$ , содержащие 9,5 и 17,9 масс% лантана соответственно.

Фотокаталитическую активность синтезированных образцов изучали на примере реакций фотоокисления метилового оранжевого и ализарина красного С.

Фотокаталитическая активность допированных образцов увеличивается по сравнению с активностью недопированного. Образец  $\text{La}(9,5)/\text{TiO}_2$  показал самую высокую фотокаталитическую активность, деградация ализарина красного С на этом образце через 2 часа достигла 100%, деградация метилового оранжевого через 3 часа составила 90,9%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке государственного гранта FSSS-2020-0016.*

## ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

И.И. Юсупов, Е.С. Мухаметшина

*КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, г. Казань, Россия.*

*ilnar.usupov.1999@mail.ru*

В связи с потребностью современной промышленности в новых материалах необходимо разрабатывать композиционные материалы с заранее заданным набором технических свойств, уровень и сочетание которых определяются функциональным назначением изделий и условиями их эксплуатации. К композиционным материалам предъявляются чрезвычайно разнообразные требования, зависящие от условий их получения, обработки и эксплуатации изделий. Физико-химическая модификация - основной метод регулирования свойств полимеров. Однако сильного снижения стоимости изделия за счет модификаторов добиться трудно, так как основная масса целевых добавок является экспортным. Для решения данных проблем можно улучшить и оптимизировать рецептуру композиционных материалов и режимов работы обработки оборудования.

Композиционные материалы на основе ПВХ используются в модифицированной форме и представляют собой многокомпонентные системы, содержащие различные целевые добавки для повышения прочностных характеристик, снижения вязкости расплавов, расширения температурных диапазонов применения, снижения стоимости изделий. Эффективность модификации ПВХ определяется структурой матричного полимера, природой, содержанием, соотношением и методами введения добавок, физико-химическими процессами на границе раздела компонентов [1].

Для оптимизации технологических режимов обработки композиционных материалов используются новые математические модели, методы, алгоритмы и программы для расчета характеристик соответствующих процессов с учетом сложной формы и термогидродинамической ситуации в рабочих полостях технологического оборудования, не относящихся к Ньютоновское реологическое состояние рабочих сред, изменчивость показателей концентрации и дисперсии, влияние сил массовых полей.

1. Гузев В.В. Структура и свойства наполненного поливинилхлорида. - СПб.: Научные основы и технологии, 2012.

## МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОМАТЕРИАЛАМИ БИОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕТРАЦИКЛИНА: АНАЛИТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

А.А. Явищева, Н.Ю. Лопатко, Р.М. Бейлинсон, Э.П. Медянцева

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия.*

*Alsuyav@mail.ru*

Тетрациклин – антибиотик из группы тетрациклинов. Данный препарат применяют не только при лечении людей, но и при лечении крупного рогатого скота. В связи с этим необходимо контролировать содержание тетрациклина в таких продуктах питания, как молоко, молочные продукты, мясо. Кроме того в морской воде часто превышена концентрация этого антибиотика.

Использование биосенсоров, является современным направлением в анализе лекарственных препаратов. Они способны обеспечить необходимую чувствительность и селективность определения.

Изучение действия тетрациклина на иммобилизованную тирозиназу и пероксидазу хрена, входящие в состав биочувствительной части амперометрических биосенсоров на основе печатных графитовых электродов показало, что в присутствии тетрациклина наблюдается уменьшение величины аналитического сигнала в диапазоне концентраций:  $1 \times 10^{-9}$  -  $1 \times 10^{-6}$  моль/л., т.е. этот препарат оказывает ингибирующее действие. Нижняя граница определяемых содержаний  $c_n$  составила  $8 \times 10^{-10}$  моль/л и  $5 \times 10^{-10}$  моль/л для пероксидазного и тирозиназного биосенсора соответственно.

Одним из современных подходов в развитии биосенсоров является использование различных наноматериалов с целью улучшения аналитических характеристик сенсоров.

В качестве модификатора поверхности тирозиназного биосенсора использовали углеродные нанотрубки (УНТ) и оксид графена (ГО), а также нанокompозиты на их основе: УНТ/НЧ Au и ГО/НЧ Au.

Для модификации пероксидазных биосенсоров использовали УНТ, наноалмазы (НА), а также нанокompозиты УНТ/НЧ Ni и НА/НЧ Au. Применение наноматериалов позволило расширить диапазон определяемых концентраций, снизить нижнюю границу определяемых концентраций и улучшить аналитические характеристики разработанных биосенсоров.

Разработанные биосенсоры были апробированы в анализе образцов молока и морской воды.

## ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИНТЕЗ НАНОКРИСТАЛЛОВ ФЕРРИТА ИТТРИЯ

М.А. Якимчук, В.Ф. Кострюков, А.С. Паршина

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия.

yakimchuk.720.46@gmail.com

Феррит иттрия представляет особый интерес в современной науке благодаря разнообразию своих свойств, вследствие чего становится возможным использование материалов на основе этого соединения в качестве катализаторов, сенсоров, и для изготовления устройств магнитной записи информации. Целью данной работы являлся синтез нанокристаллов феррита иттрия золь-гель методом и установление их фазового состава.

Золь готовили добавлением растворенных солей нитрата иттрия и железа к 350 мл кипящей воды. Полученный золь охлаждали до комнатной температуры, после чего по каплям добавляли осадитель – гидроксид натрия. Образовавшийся осадок фильтровали на вакуум-фильтре и высушивали. Далее отжигали в муфельной печи при температуре  $750^{\circ}\text{C}$  в течение 60 минут. Полученный мелкодисперсный, пористый порошок был исследован методом рентгенофазового анализа (РФА). Полученная дифрактограмма приведена на рис. 1.

Для расшифровки полученной дифрактограммы были использованы базовые дифрактограммы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$ , гексагонального  $\text{YFeO}_3$  и орторомбического  $\text{YFeO}_3$ . Исходя из полученных результатов следует, что синтезированный порошок представляет собой почти стопроцентную целевую фазу – орторомбический феррит иттрия с незначительной примесью оксида иттрия. Таким образом, золь-гель синтез является приемлемым методом для получения практически однофазного феррита иттрия, который предполагается использовать в качестве твердотельного элемента полупроводникового газового сенсора.

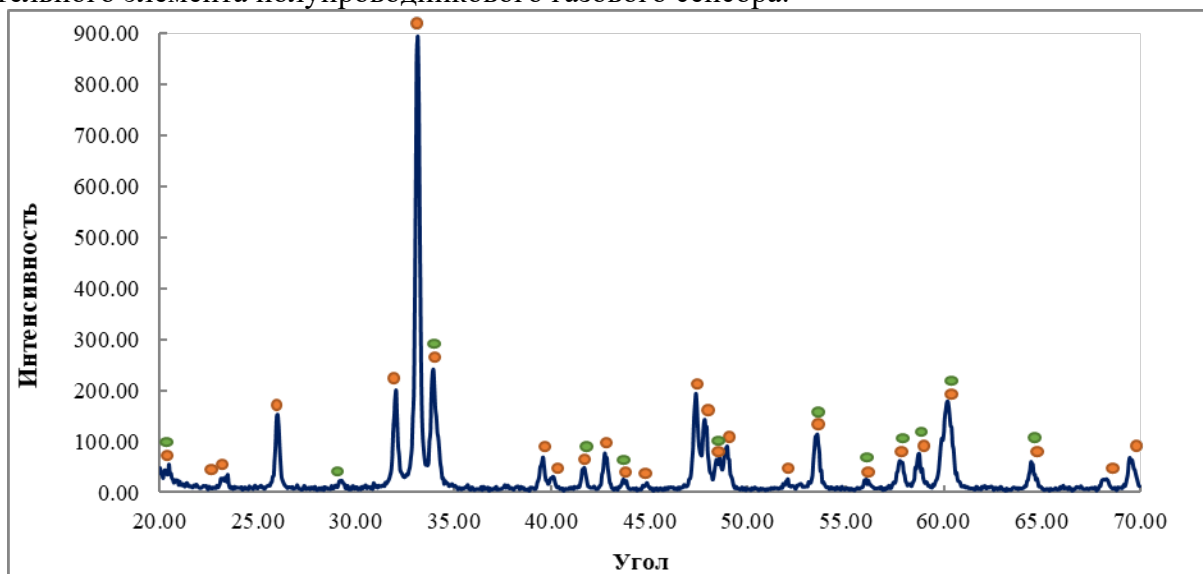


Рисунок 1 – Фазовая дифрактограмма синтезированного феррита иттрия. Красным цветом обозначена фаза феррита иттрия, зеленым – оксид иттрия.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВАНОНОВ

Э.Н. Якупова, Г.К. Зиятдинова

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*elviraakupova96@mail.ru*

Создание высокочувствительных и селективных электрохимических сенсоров на органические аналиты представляет теоретический и практический интерес в современной аналитической химии. В качестве чувствительного слоя сенсоров хорошо зарекомендовали себя наноматериалы (наночастицы металлов и оксидов металлов, углеродные наноматериалы, полимерные покрытия). Среди объектов анализа практически не рассматриваются флаваноны – природные фенольные антиоксиданты растений семейства цитрусовых, поэтому разработка электрохимических сенсоров для их определения представляет актуальную задачу.

В качестве объектов исследования рассмотрены гесперидин и нарингин. Для их определения разработаны вольтамперометрические сенсоры на основе наноматериалов (наночастиц диоксида олова, углеродных нанотрубок и поли(эллаговой кислоты)). Сенсоры охарактеризованы комплексом методов (сканирующей электронной микроскопии, циклической вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса). Установлено, что наноматериалы обеспечивают увеличение шероховатости поверхности сенсоров и их электроактивной площади, а также скорости электронного переноса по сравнению с немодифицированными электродами.

Сенсор на основе наночастиц диоксида олова, диспергированных в катионном цетилпиридиний бромиде, дает отклик на гесперидин в диапазоне 0.10-10 и 10-75 мкМ с пределом обнаружения 0.077 мкМ в условиях адсорбционной дифференциально-импульсной вольтамперометрии. Для определения нарингина предложен сенсор с послойно нанесенными многостенными углеродными нанотрубками и поли(эллаговой кислотой). Диапазоны определяемых содержаний составляют 0.05-1.0 и 1.0-100 мкМ нарингина с пределом обнаружения 14 нМ. Полученные аналитические характеристики одни из лучших среди описанных в литературе для электрохимических методов. Показана высокая селективность отклика сенсоров на флаваноны в присутствии ряда структурно родственных природных фенольных соединений. Сенсоры апробированы на апельсиновых и грейпфрутовых соках. Полученные результаты позволяют рекомендовать предложенные сенсоры для быстрого скрининга цитрусовых соков.

## **СЕКЦИЯ 4 ЭНЕРГЕТИКА 21 ВЕКА**

## ГИБРИДНАЯ ИНДУКЦИОННАЯ СИСТЕМА ПАРОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ С ВЯЗКОЙ, ВЫСОКОВЯЗКОЙ И БИТУМНОЙ НЕФТЬЮ

Р.Р. Афлятунов, П.А. Хлюпин

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия.*

*Radmir.afl@yandex.ru*

Актуально совершенствование существующих технологий по добыче и переработке углеводородных ресурсов. Применение методов функциональной интеграции при разработке эффективных устройств термического воздействия на пласт с вязкой, высоковязкой и битумной нефтью позволяет создавать гибридные компоненты, обеспечивающие повышение энергетической эффективности, надежности и снижение массогабаритных показателей [1]. Так, использование многофункционального интегрированного электромагнитного компонента (МИЭК) в качестве индуктора и системы колебательного контура индукционного парогенератора позволяет уменьшить количество дискретных компонентов в составе силовой части преобразователя, тем самым снизить массу готовой системы. Конструктивно МИЭК представляет собой две или более токопроводящих обкладок, разделенных диэлектрическим материалом и свернутых в рулон, обеспечивая тем самым наличие емкостного элемента и индуктивности в едином компоненте [2]. Снижение количества отдельных дискретных компонентов силовой части преобразователя позволяет сократить количество контактных соединений и повысить надежность системы. Функционально гибридный индуктор на базе МИЭК представляет собой одновременно часть системы силового преобразователя в виде готового колебательного контура и нагревательный элемент, что позволяет обеспечить высокую управляемость процессом термического воздействия. Использование многофункционального интегрированного электромагнитного компонента как части индукционного парогенератора позволяет организовать процесс приготовления теплоносителя непосредственно в стволе скважины.

1. Конесев С. Г., Хлюпин П. А. Оценка эффективности теплового воздействия электротермических систем // Нефтегазовое дело: науч. техн. журн. / УГНТУ, 2012. Т.10, № 3. С. 92-95.
2. Хлюпин П. А. Индукционная нагревательная система для нефтепроводов: дис. канд. техн. наук. Уфа, 2015. 194 с.



## РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ СО СТУДЕНТАМИ НАПРАВЛЕНИЯ «НЕФТЕГАЗОВОЕ ДЕЛО»

Л.Р. Секаева<sup>a</sup>, И.С. Балафендиева<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт математики и механики имени Н.И. Лобачевского КФУ, Казань*

<sup>b</sup> *Институт вычислительной математики и информационных технологий (ВМиИТ-ВМК)  
КФУ, Казань.*

*LRSekaeva@kpfu.ru*

Одно из занятий, проведенных со студентами направления «нефтегазовое дело». Решение задач:

Задача 1. Керн скважины 1 представлен тремя ящиками, в каждом из которых четыре отделения, в трех отделениях лежат алевролиты, в одном – песчаники. Керн со скважины 2 представлен пятью ящиками, в каждом из которых шесть отделений, в четырех отделениях лежат алевролиты, в двух – песчаники. Керн со скважины 3 представлен двумя ящиками, в каждом из которых имеется, пять отделений, содержащих только алевролиты. Для анализа отобран наугад керн из одного отделения одного ящика. Определить вероятность того, что проба представлена алевролитами.

Задача 2. На геологической карте данный район разбит на 25 равных по площади участков, в том числе 6 несмежных участков распространения юрских отложений. Точки для бурения двух скважин выбирают наугад поочередно, но так, чтобы на один и тот же участок не попали обе скважины. Определить вероятность того, что точка для бурения второй скважины попадет на участок юрских отложений, если точка для первой скважины попала на участок распространения юрских отложений.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОГИДРОИМПУЛЬСНОЙ ОЧИСТИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

П.И. Васильев

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа.*

*Petrvasilyev17@mail.ru*

Принцип работы электрогидроимпульсной очистительной установки построен на генерации специального высоковольтного разряда в жидкости. В зависимости от очищаемой емкости, канал разряда может формироваться либо между двумя электродами, либо между металлической стенкой и одним электродом. При прохождении стримера в жидкости образуется импульс, сбивающий отложения со стенок емкости. В месте разряда образуется большая кавитационная полость, которая смыкается с большой скоростью, создавая второй импульс. Цикл электрогидравлического эффекта может повторяться неограниченное число раз соответственно заданной частоте следования разрядов.

Прогрессивным направлением является выполнение установки в виде единого погружного блока. Но, принимая во внимание условия эксплуатации данного устройства, при его разработке необходимо решить сложные научно - технические проблемы, связанные с малыми размерами очищаемой емкости. В связи с этим целесообразно рассмотреть в качестве источника питания индуктивно-емкостного преобразователя (ИЕП) на основе многофункционального электромагнитного компонента (МИЭК) [1].

По причине того, что ИЕП имеют большие массу и габариты, исследования последних лет направлены на путь миниатюризации таких устройств. Использование МИЭК в качестве ИЕП позволяет уменьшить массогабаритные показатели, снизить материалоемкость и себестоимость изготовления, а также расширить функциональные возможности применения устройств на его основе. Поэтому совершенствование устройств на основе МИЭК является актуальной проблемой.

1. Конесев, С.Г. Функциональная интеграция как техническое средство развития электромагнитных элементов / С.Г. Конесев, Р.Т. Хазиева // Повышение надежности и энергоэффективности электротехнических систем и комплексов. – Уфа: УГНТУ, 2014.– С. 135-138.

## ЭКОНОМИКА НОВОГО ТРУБОПРОВОДА – ЧЕТЫРЕ ТРУБЫ В ОДНОЙ

А.И. Драцкая

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*ai.dratskaya@gmail.com*

Два газопровода «Северный поток» по две нитки имеют четыре трубы. Материал очень дорогой. Нельзя ли было сделать дешевле? Экономические расчёты показывают, что можно было заменить два газопровода одной трубой, внутри которой установлена перегородка Штейнера – самая короткая линия, соединяющая четыре вершины вписанного в окружность квадрата. Задача свелась к разделению сечения круглой трубы на четыре примерно одинаковые области самым выгодным способом, то есть с минимальным расходом материала. Были рассмотрены несколько вариантов, но конечным оказался вариант с перегородкой Штейнера. Плоская ячейка Штейнера – это линия, которая самым коротким способом соединяет четыре вершины квадрата, вписанного в окружность сечения трубы. Цель этой работы – создание самой лёгкой и дешёвой трубы, по которой можно перекачать четыре жидкости или газа без перемешивания. Это четыре трубы, расположенные в одной трубе [1,2]. Идея работы появилась после экскурсии на склад проката чёрного металла. Материал для газопровода стоит почти 50 млрд. руб. Нельзя ли сделать дешевле? Это цель моей работы. Я показала, как с помощью математики можно решить эту задачу [1,2]. В этой работе я изучаю не две трубы, не три, а четыре, совмещённые в одной трубе перегородкой Штейнера. Она легче и дешевле четырёх труб в 1,24 раза. На газопроводе «Северный поток» экономия денег на материале была бы равна 48,96млрд.руб.-48,96млрд.руб./1,24=9,48млрд.руб. Цель работы достигнута. Предложена новая лёгкая и экономичная труба, заменяющая четыре трубы.

1. Драцкая А.И. Труба с перегородкой Штейнера / Наука и инновации в технических университетах: Материалы Тринадцатого Всероссийского форума студентов, аспирантов и молодых учёных 23-25 октября 2019 г. - СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2019. - 169 с. - ББК 30.1 Н34. - Секция "Экономика и управление". - С.129-130.
2. Драцкая А.И. Необычная труба. Сентябрь 2019 г. Электронный ресурс (видеоролик для конкурса «Учёные будущего 2019»): <https://youtu.be/MZU5Mqvgvsc>

## ПРИМЕНЕНИЕ ЛИНИИ ШТЕЙНЕРА ДЛЯ СОЕДИНЕНИЯ ФОТОЭЛЕМЕНТОВ В СОЛНЕЧНОЙ БАТАРЕЕ

А.И. Драцкая

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*ai.dratskaya@gmail.com*

Работа выполнена по результатам образовательной смены в Центре «Сириус» 4-29.07.21 г.

Предложение основано на математике, на линии Штейнера – самой короткой линии, которая соединяет четыре вершины квадрата. К этой линии я пришла, изучая мыльные плёнки со второго класса. Но сейчас я буду говорить о совершенно другой области – электронике. В 2017 году, когда училась в 4-ом классе, я участвовала в научной конференции в Санкт-Петербургском Политехническом университете Петра Великого. Там я впервые услышала о квантовых ямах и квантовых каналах. Но больше всего меня заинтересовали квантовые точки. Какой бы электронный прибор не был придуман, эти точки надо соединять тонкими проводками. А в проводках энергия теряется. Моя идея прежняя – самые короткие проводки. Для квадрата получается всё та же линия Штейнера из пяти отрезков, а не крестик, как считают многие. Она на 3% короче крестика. Как это относится к солнечным батареям? Солнечные батареи должны давать большой ток. Значит, их сопротивление должно быть маленьким. В солнечной батарее очень много квадратиков, ещё больше проводов. Надо уменьшить длину проводов. Тогда уменьшится сопротивление. Я знаю, как это сделать. Например, линией Штейнера для соединения четырёх квантовых точек в квадрате. Ячейка Штейнера заменяет традиционное соединение фотоэлементов «змейкой». При этом экономия соединительного провода равна 9%. Это существенно для космической техники. Для проверки правильности предложенной гипотезы я изготовила демонстрационный макет. Солнечные элементы взяты из садовых светильников и соединены по линии Штейнера.

Вывод понятен всем. Энергосбережение в солнечных батареях надо начинать не только с поиска новых материалов. Надо правильно соединить эти материалы. Иначе вся энергия превратится в тепло, полупроводники испортятся. Экономия энергии 3% ячейкой Штейнера для проводов заслуживает внимания и специального исследования, которым я занимаюсь.

## МАТЕМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКОЕ ПРЕДЛОЖЕНИЕ НОВОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ ТОПЛИВНОЙ ФОРСУНКИ

А.А. Екимовская<sup>а</sup>, С.А. Николаев<sup>б</sup>

<sup>а</sup> МАОУ «СОШ №40», город Череповец, Вологодская область;

<sup>б</sup> ГБПОУ СПТ им. Б.Г.Музрукова, город Саров, Нижегородская область.

*any\_ekimovskaya03@mail.ru*

Цель работы – мелкодисперсное распыление топлива перед сгоранием в тепловой машине или нагревателе. Математическая задача была сформулирована после наблюдения капелек тумана и конденсата на холодных поверхностях [1,2], а также пузырьков в мыльной пене. Задача перешла в область математики, связанную с фракталами [3]. Математический результат применён для создания новой топливной форсунки. Новизной работы является применение математических расчётов и физического явления дробления капель конденсата на практике. В результате появилось техническое предложение новой топливной форсунки, оформленное в виде компьютерной 3D модели. Полнота сгорания топлива определяет не только экономичность двигателя, но ещё его экологичность. Например, переход автомобильного транспорта на стандарт Euro V строго ограничивает выброс с выхлопными газами ароматических циклических углеводородов, в частности, циклогексана. Такие вещества образуются при неполном сгорании нефтепродуктов и газового конденсата. Топливо выходит из центральной трубки к стенкам и углам внешнего корпуса-многоугольника и сразу же попадёт под действие двух дробящих, размельчающих факторов – скоростной струи воздуха и смачиваемости со стороны корпуса и деталей.

1. Поверхностное натяжение / Физический энциклопедический словарь. Гл. ред. А.М.Прохоров. Ред. кол. Д.М.Алексеев и др. – М.: Сов. энциклопедия, 1983. – 928 с.
2. Екимовская А.А. Какая бывает роса на траве? От литературы к математике. – Электронный ресурс (видеоролик): <https://youtu.be/IZY5K3vNgrM>
3. Екимовская А.А. Фрактальное заполнение правильного треугольника кругами / V Музруковские Чтения: Материалы Международной научно-практической конференции, 3-4 октября 2019 г. - ГБПОУ СПТ им. Б.Г.Музрукова. - Отв. за выпуск И.В.Столяров. - Саров: Интерконтакт, 2019. - 271 с. - ISBN 978-5-6043096-4-3. - С.103-105.

## ПРОЧНОСТЬ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ТРОСОВОЙ КОСМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

А.А. Екимовская

*МАОУ «СОШ №40», город Череповец, Вологодская область.*

*any\_ekimovskaya03@mail.ru*

В космической технике происходят изменения, которые заставляют пересмотреть конструкции применяемых аппаратов. В РКК «Энергия» им. С.П.Королёва предложили качающуюся тросовую систему с разрывом троса для возвращения космического аппарата на Землю [1]. Я предлагаю пойти дальше, изучить не только качающиеся, но и вращающиеся тросовые системы. Такие системы не только создают искусственную гравитацию, но и запасают энергию вращения, необходимую для орбитального маневрирования. Энергия высвобождается после искусственного разрыва троса в заданной точке орбиты, тела получают импульсы. Цель работы заключается в дополнительном энергетическом обеспечении космических аппаратов. Объект исследования – вращающаяся система «тросы-грузы» изучается на предмет силового воздействия, устойчивости формы и возможности дополнительного накопления энергии для создания искусственной гравитации и орбитального маневрирования. Изучены вращающиеся системы с различным числом грузов. Выполнен предельный переход к равномерно распределённой вращающейся массе и силе натяжения цепочки. Создана экспериментальная установка и проведена видеосъёмка быстрого процесса для получения мгновенных фотографий. Впервые начато изучение несимметричных вращающихся тросовых систем [2]. Главным выводом является принципиальное ограничение возможностей традиционных космических аппаратов и необходимость поиска новых решений в виде тросовых систем, в том числе для орбитального маневрирования.

1. Осипов В.Г., Шошунов Н.Л. Космические тросовые системы: история и перспективы / Земля и Вселенная. – РКК «Энергия» им. С.П.Королёва. - №4, 1998.
2. Екимовская А.А. Применение табличного редактора Microsoft Excel для решения задачи о космической тросовой вращающейся системе / Материалы XXXI конференции "Современные информационные технологии в образовании". Ред. группа: Алексеев М.Ю. и др. - Фонд "БАЙТИК", ИТО-Троицк-Москва: 2-3 июля 2020. - 572 с. - С.507-511.

## МЕХАНИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ ДЛЯ МАНЁВРА ТРОСОВОЙ КОСМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

А.А. Екимовская

*МАОУ «СОШ №40», город Череповец, Вологодская область.*

*any\_ekimovskaya03@mail.ru*

Идея работы появилась после критики традиционных космических аппаратов (КА). Сейчас всё чаще начинают применять малые КА. Но в таких аппаратах нельзя разместить запас топлива даже для возвращения на Землю, не говоря о межорбитальных переходах. В этой работе изучаются орбитальные переходы, требующие небольшой энергии. Например, для возвращения КА на Землю с низкой орбиты достаточно уменьшить его скорость на 80-130 м/с [1]. В традиционных КА тормозной импульс получается от двигательной установки. Это же можно сделать при вращении тросовой системы. Если два груза связать тросом и раскрутить, то скорости движения будут противоположно направлены друг другу. После выведения на орбиту грузы вращаются вокруг центра масс. Если трос разорвать в момент времени, когда один груз движется в ту же сторону, что и КА, а другой против, то первый груз получит разгонный импульс, а второй тормозной. При этом используется запасённая энергия вращательного движения. При таком условии даже пилотируемый аппарат может быть возвращён с орбиты. Второй груз тросовой системы перейдёт на эллиптическую орбиту. Расчётные формулы взяты из книги С.А.Мирера [2]. Если второй груз выполнен тоже в виде вращающейся тросовой системы, то после разрыва троса КА можно перевести на высокую круговую орбиту. Это переход Гомана. Подана авторская заявка на патент на изобретённый способ маневрирования [3].

1. Микрин Е.А. и др. Особенности бортового баллистико-навигационного обеспечения спуска в системе управления транспортного пилотируемого корабля “Союз ТМА”, Пробл. управл., 2010, выпуск 6, 58–63.
2. Мирер С.А. Механика космического полёта. Орбитальное движение. Учебное пособие. Часть 2. – М.: МФТИ (НИУ), 2013.
3. Екимовская А.А. Способ межорбитального маневрирования космического аппарата. Заявка № 2021126157 от 06.09.2021 на патент на изобретение.

## СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СПОСОБОВ ОТВОДА ВЛАГИ ВО ВЛАЖНОПАРОВЫХ ТУРБИНАХ

Л.О. Зверев, В.Г. Злобин

*Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Высшая школа технологий и энергетики, Санкт-Петербург.*

*zverevleonid28@mail.ru*

Энергоблоки АЭС и ТЭС существенно проигрывают в экономичности из-за относительно низких значений термического и внутреннего относительного КПД [1].

Снижение внутреннего относительного КПД в турбинах АЭС связано с повышенным негативным влиянием влажности в процессе расширения. Определяющим критерием надежности работы цилиндров низкого давления (ЦНД) мощных паровых турбин является последняя ступень. Наличие влажности в последней ступени ЦНД, вызывает не только эрозию, но влияет на надежность их работы. Вопросы, связанные с конденсационной нестационарностью, заставляют по-новому взглянуть на формирование отсека ступеней ЦНД и, прежде всего, отсека из двух последних ступеней, где наличие влажности значительно влияет на надежность их работы. В последних ступенях ЦНД при работе турбин на частичных режимах наблюдаются мощные срывные явления. Эти ступени работают в области влажного пара. Отрывы могут возникать под влиянием большого числа факторов. Часть из этих факторов может значительно влиять на характеристики потоков.

Эрозионный износ рабочих лопаток при ударах капель влаги о поверхность входных кромок проявляется вначале в виде шероховатости, затем на поверхности появляются углубления, кратеры, язвы, и даже искажается форма профиля лопаток.

Для защиты лопаток паровой турбины типа К-1200 от эрозионного разрушения в настоящее время на ЛАЭС используются следующие способы:

- снижение влажности пара на выходе из турбины, за счет применения промежуточного перегрева пара;
- применение влагоулавливающих устройств в проточной части турбины (внутриканальная сепарация, влагоулавливающие устройства на периферии ступени и т.п.);
- применение эрозионно-стойких материалов, упрочнение поверхности лопаток, использование защитных покрытий.

1. Филиппов Г.А., Назаров О.И., Беляев Л.А. *Известия Томского политехнического университета*. 2012, 320, 4, 5-9.



## РАЗРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ НА ПРЕДПРИЯТИЯХ ЭНЕРГЕТИКИ

Н.П. Ильин<sup>а</sup>, А.И. Назаров<sup>а</sup>, В.И. Королев<sup>а</sup>, А.И. Нургалиев<sup>а</sup>, Э.Р. Зверева<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Казанский государственный энергетический университет, Казань;

<sup>б</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

*ilyinkolya.01@mail.ru*

Промышленное производство строительных материалов – керамического кирпича и различных видов других материалов – все больше сталкивается с нехваткой доброкачественных сырьевых материалов, обеспечивающих выпуск продукции, отвечающей требованиям рынка.

Разработка и внедрение новых эффективных материалов, обладающих высокими физико-механическими и теплофизическими характеристиками, является актуальной задачей современного материаловедения. Повсеместное применение технологий по утилизации промышленных отходов в производстве строительных материалов не только снимет обременяющие бюджет расходы на утилизацию, но и станет серьезным источником пополнения бюджетных средств, стимулом к расширению производства строительных материалов.

Уровень утилизации золошлаковых отходов в России составляет около 4-5%, в ряде развитых стран – около 50, во Франции и Германии 70, а в Финляндии – около 90% их текущего выхода [1].

Отвалы ТЭС и ТЭЦ занимают значительные территории, являются источником загрязнения воздушного и водного бассейнов и увеличивают минерализацию грунтовых вод. В ряде регионов эти отвалы значительно осложнили экологическую обстановку. Если учесть, что во многих странах до 70-90% всей электроэнергии вырабатывается при сжигании твердого топлива, то рост золошлаковых отходов будет продолжаться, что отрицательно воздействует на экологию. Таким образом, утилизация золошлаковых отходов становится уже не столько вопросом экономии материальных ресурсов, сколько проблемой безопасности населения многих стран.

Известно большое количество исследований по использованию зол в строительстве, но практическое применение носит лишь эпизодический характер. В связи с этим не теряет актуальности обоснование использования золошлаковых отходов в производстве строительных материалов на региональном уровне, а именно на территории Республики Татарстан.

Целью работы была произвести оценку возможности применения золошлаковых отходов города Казани при получении строительных материалов на производственных мощностях Республики Татарстан.

1. Скрипникова Н.Л., Юрьев И.Ю. *Вестник ТГАСУ*, 2013, 2, 245-250.

## ИЗВЛЕЧЕНИЕ ЦЕННЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ ЗОЛЫ КОТЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ

В.И. Королев<sup>a</sup>, Н.П. Ильин<sup>a</sup>, А.И. Назаров<sup>a</sup>, Ю.А. Гриб<sup>a</sup>, А.Э. Гурьянова<sup>a</sup>, Э.Р. Зверева<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский государственный энергетический университет, Казань;

<sup>b</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

*eziodepakes@gmail.com*

Мазут для многих ТЭС России является резервным топливом. При сжигании мазута образуются отходы, содержащие ценные вещества, например, ванадий, никель и кобальт. После железных руд эти отходы являются наиболее доступным ванадиевым сырьем [1], поэтому направленная утилизация отходов позволит увеличить запасы ванадия и никеля и улучшить экологическую безопасность предприятий топливно- энергетического комплекса.

Порошковые дифрактограммы получены на автоматическом рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Advance, оборудованном приставкой Vario и линейным координатным детектором Vantec.

В процессе исследования было обнаружено, что анализируемый порошок достаточно хорошо магнитится, причем магнитная фаза составляет более половины массы образца. После разделения образца на две фазы, для каждой из них был выполнен порошковый дифракционный эксперимент.

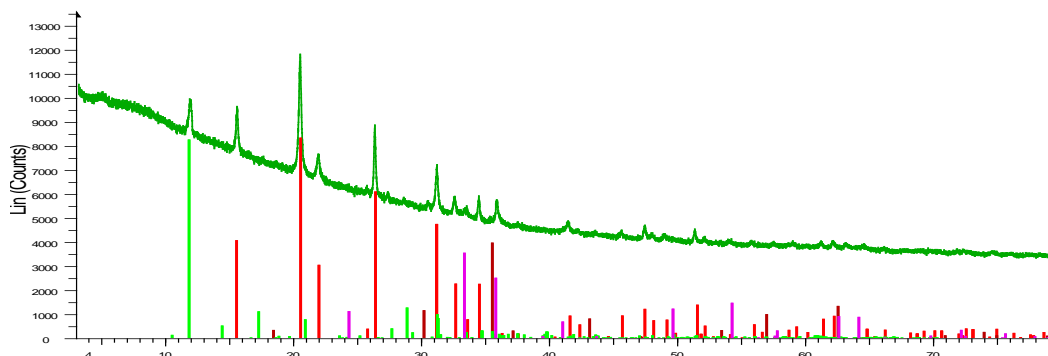


Рисунок 1 – Экспериментальная порошковая дифрактограмма для фазы 1, полученной после разделения с использованием магнита.

Преимущественно немагнитная фаза 1 представляет собой смесь нескольких кристаллических фаз, главным образом состоящая из кристаллической формы оксида ванадия  $V_2O_5$ . Также в ней присутствуют в небольших количествах гипс  $CaSO_4(H_2O)_2$ , гематит  $Fe_2O_3$ , магнетит  $Fe_3O_4$ .

Образующиеся при сжигании мазута оксиды ванадия, сорбируются на летучей золе и выбрасываются в окружающую среду через дымовую трубу, являются высокотоксичными веществами, наносящими вред окружающей среде. Поэтому улавливание оксидов ванадия и их последующая утилизация важны как для предотвращения их вредного воздействия, так и с целью дальнейшего использования в промышленности.

1. Зверева Э.Р., Дмитриев А.В., Шагеев М.Ф., Ахметвалеева Г.Р. *Теплоэнергетика*, 2017, 8, 50-57.

## РАЗРАБОТКА ЧАСТИЧНО СШИТОГО ГЕЛЯ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ПРОФИЛЯ ПРИЕМИСТОСТИ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОЙ МИНЕРАЛИЗАЦИИ

М.Д. Леухина, А.Х.С.М. Абдельрехим, А.З. Мустафин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*mashanya116@gmail.com*

**Ключевые слова.** Сшитый слабый полимерный гель, высокая минерализация, методы увеличения нефтеотдачи.

**Введение.** Полимерное заводнение — это хорошо зарекомендовавший себя метод третичного повышения нефтеотдачи для улучшения контроля подвижности при заводнении, применяемый для пластов неоднородных по проницаемости.

Однако раствор полимера, применяемый при этом, имеет недостатки, такие как, большая подверженность к механической деструкции в пласте, при которой его вязкость значительно снижается, а способность закупоривать каналы с высокой проницаемостью уменьшается. При этом растворы полимеров достаточно чувствительны к условиям высокой минерализации и не всегда способны полностью раствориться в растворе и выдержать долгосрочную термостабильность. Учитывая, что большинство разрабатываемых карбонатных месторождений Татарстана имеют сверхвысокую минерализацию 200 г/л, а средняя температура в пласте 23-24 °С, возникает необходимость в создании стабилизированного полимера, успешно выдерживающего данные условия. Одним из способов стабилизации полимера является его сшивка, придающая устойчивость полимеру в течении длительного периода времени при пластовых условиях, а также способствующую увеличению стойкости при механической деструкции.

**Цель.** Целью данного исследования был подбор эффективных реагентов на основе технологии выравнивания профиля приемистости для карбонатных коллекторов, осложнённых системой трещин при сверхвысокой минерализации пластовой воды.

**Материалы и методы.** В данном исследовании использовались частично гидролизованный полимер полиакриламид (НРАМ), органические полимеры, в частности ксантановая и гуаровая камеди. В качестве сшивающих агентов применяли неорганический сшиватель на основе  $\text{Cr}^{+3}$ , а также органические сшиватели фенольного типа.

Проводились исследования в свободном объёме, в ходе которых были определены растворимость, оценка долгосрочной стабильности, определена начальная динамическая вязкость растворов, определён тип полученного конечного геля, измерено точное время гелеобразования, оценена способность к деструкции для возможности извлечения сшитой системы. Также были проведены реологические исследования, в частности были определены характеристики растворов гелевых систем, «кривые вязкости» сшитых гелей, напряжения сдвига сшитых гелей.

**Результаты.** Были проанализированы системы с различными концентрациями полимера и различными соотношениями полимер / сшиватель для определения оптимального типа слабого геля, результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Зависимость типа геля от исходной концентрации реагентов.

Концентрация полимера	0,2		0,4		0,6	
Соотношение полимер: сшиватель	6:1	2:1	6:1	2:1	6:1	2:1
Тип геля	В	В	В	С	С	Е

Из данных результатов видно, что оптимальной концентрацией полимера является концентрация 0,6%, а соотношение полимер / сшиватель 2/1.

**Заключение.** Были оценены различные гелевые системы, устойчивые к высокой минерализации и к механической деструкции. В ходе исследования были получены данные по реологии слабых гелей, доказывающие, что данные системы успешно заменяют полимерное заводнение и при применении изолирует высокопроницаемые зоны, способствуя выравниванию фронта приёмистости.

## ПРИМЕНЕНИЕ РАСТВОРИТЕЛЕЙ В ПРОЦЕССАХ ПАРОТЕПЛООВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ

И.И. Мухаматдинов, М. Исмаел, Р.Э. Мухаматдинова, А.В. Вахин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*mc-gross@mail.ru*

Для разработки и облагораживания тяжелых нефтей и битумов требуются новые комплексные методы, позволяющие использовать, например, преимущества теплового воздействия и эффективность закачки углеводородных растворителей. С целью совершенствования технологии закачки пара, а также для снижения расхода пара и увеличения добычи нефти реализуется более эффективная технология, при которой вместе с паром закачивается растворитель [1].

Целью работы являлось исследование влияния различных растворителей (ароматических, нафтяных, промышленных и полярных) на облагораживание сверхвязкой нефти Ашальчинского месторождения при паротепловом воздействии.

Проведены исследования влияния различных растворителей на облагораживание сверхвязкой нефти Ашальчинского месторождения при паротепловом воздействии в течение 24 часов при температуре 200 °С. Использованы ароматические и промышленные растворители. Определен состав и структура газовой фазы после паротеплового воздействия с растворителями. Показано изменение компонентного состава под действием совместного воздействия пара и растворителя, свидетельствующее о снижении содержания высокомолекулярных гетероорганических соединений. Установлены вязкостно-температурные характеристики нефти с применением растворителей индивидуального состава, показано изменение элементного и структурно-группового состава нефтей. Применение растворителей при паротепловом воздействии помогает обеспечить высокий уровень энергоэффективности при паротепловом воздействии на месторождения высоковязких нефтей и природных битумов.

1. Ю.Ю. Борисова, Д.Н. Борисов, М.Р. Якубов. Нефтяная провинция, 2018, **15**, 81-95.

## КРИТЕРИИ ПОДБОРА РАСПРЕДЕЛЯЮЩЕГОСЯ ТРАССЕРА ДЛЯ ОЦЕНКИ ОСТАТОЧНОЙ НЕФТЕНАСЫЩЕННОСТИ ПО ТЕХНОЛОГИИ SWCTT

А.Р. Мухутдинова<sup>а</sup>, А.В. Болотов<sup>а</sup>, М.А. Варфоломеев<sup>а</sup>, В.А. Судаков<sup>а</sup>, А.А. Лутфуллин<sup>б</sup>,  
Б.Г. Ганиев<sup>б</sup>, И.З. Фархутдинов<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *ПАО Татнефть им. В.Д. Шашина, Альметьевск.*

*alfiya-mukhutdinova@mail.ru*

На практике нефтенасыщенность пласта определяется по данным геофизических (глубина проникновения ~80см) исследований скважин (ГИС), а также на основе керновых исследований. В сравнении с дорогостоящими операциями ГИС или комплексом керновых исследований альтернативным способом определения нефтенасыщенности применяемых на месторождении являются односкважинные трассерные исследования (SWCTT) (радиус исследования ~ 3-7 м) [1].

Целью настоящей работы было оценка факторов влияющих на подбор распределяющегося трассера подходящего для условий исследуемого месторождения. В работе проведен лабораторный анализ линейки трассеров, по результатам которого подобран трассер этилформиат. Было изучено влияние пластовой температуры, минерализации пластовой воды и состава нефти на скорость протекания реакции гидролиза и коэффициента распределения трассеров. Подобрано оптимальное время технологической выдержки скважины 24 ч. Для возможности детектирования трассеров на устье при обратной добыче гидролизу должно подвергнуться от 10 до 50% трассера [1]. По результатам полученных данных установлено, что этилформиат с учетом всех факторов удовлетворяет по скорости гидролиза условиям протекания реакции гидролиза с конверсией 10-50%. За 24ч. степень гидролиза этилформиата составила 35%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в соответствии с Соглашением № 075-11-2019-032 от 26.11.2019 г в рамках проекта "Создание высокотехнологичного программно-аппаратного комплекса на основе нейросетевых алгоритмов повышения эффективности разработки месторождений углеводородов" на поздней стадии "*

1. S. Doorwar, M. Tagavifar, A 1D Analytical Solution to Determine Residual Oil Saturations from Single-well Chemical Tracer Test, *SPE-200420-MS*, 2020.

## УЛУЧШЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ НЕФТЯНЫХ ТОПЛИВ

А.И. Назаров<sup>a</sup>, Н.П. Ильин<sup>a</sup>, В.И. Королев<sup>a</sup>, А.И. Нургалиев<sup>a</sup>, Ю.А. Гриб<sup>a</sup>, Э.Р. Зверева<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Казанский государственный энергетический университет, Казань;*

<sup>b</sup> *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*ialexnazarov@gmail.com*

С углублением переработки нефти изменяется компонентный состав мазута, и, следовательно, ухудшается его качество. В результате ухудшаются реологические свойства, повышается содержание смолисто-асфальтеновых веществ и др. Чаще всего отклонения мазута от требований ГОСТ 10585-2013 наблюдаются по седующим показателям качества: "вязкость", "содержание механических примесей", "содержание воды" и "содержание серы" [1].

Понижение качества мазута для потребителя означает, что физическая стабильность мазута и эффективность его горения ухудшится, так же во время хранения мазутов увеличится количество осадков в емкостях, при эксплуатации котлового оборудования снизится эффективность его работы, а в выбросах дымовых газов в окружающую среду увеличится содержание в них сажи, оксидов серы и углерода.

Наиболее простым и эффективным выходом из данной ситуации является использование специальных веществ – присадок. Присадки к топливам в зависимости от их состава могут обладать антикоррозионным, депрессорным, нейтрализующим, диспергирующим, пептизирующим и деэмульгирующим действием, улучшают реологические свойства топлива, и способствует образованию более рыхлой структуры отложений в зоне высокотемпературных поверхностей нагрева, что приводит к снижению их коррозии.

1. Zvereva E. R., Khabibullina R.V., Makarova A.O, Akhmetvalieva G.R., Burganova F.I., Ermolaev D.V., and Zueva O.S. *Petroleum Chemistry*, 2019, 59, 1, 106-110.

## ВЫЯВЛЕНИЕ АНОМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ НА ГЕОХИМИЧЕСКИХ МАРКЕРОВ С ПОМОЩЬЮ АНСАМБЛЕВОГО АЛГОРИТМА

А.И. Семенова

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань.*

*nilum168888@gmail.com*

Исследование свойств геохимических данных позволяет извлечь информацию о состоянии нефти в разрабатываемом месторождении. Оно может изменяться в зависимости от различных факторов, например, биологический, который был взят за основу. Его проявления оцениваются через поиск сильно отличающихся проб отдельно взятой скважины относительно других проб, то есть поиск аномалий, что является задачей бинарной классификации. По ним можно получить информацию об источниках биодеградации нефти [1]. Исходные данные – результаты анализа компонентного состава попутного газа еженедельных проб от 120 скважин за период в один год, полученные методом газовой хроматографии. Цель исследования – выявление аномальных значений коэффициента «изобутан/бутан», сопровождающееся значительным ростом содержания метана либо тяжелых компонент.

Так, разработан алгоритм поиска аномалий, основанный на ансамблевом методе. Он состоит из улучшенного ядерно-взвешенного метода ближайших соседей, учитывающего расстояния до проб и сглаженного тренда; случайного леса; линейного дискриминантного анализа и логистической регрессии. При кросс-валидации такой подход дает значения чувствительности и специфичности: 0.97 и 0.99, соответственно. Это позволяет работать над задачей кластеризации для аномалий. Также это поможет в установлении источников биодеградации на разрабатываемом горизонте.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в соответствии с Соглашением № 075-11-2019-032 от 26.11.2019 г в рамках проекта "Создание высокотехнологичного программно-аппаратного комплекса на основе нейросетевых алгоритмов для повышения эффективности разработки крупных месторождений углеводородов на поздней стадии".*

1. Nourgaliev D.K. Variation of i-butane/n-butane ratio in oils of the Romashkino oil field for the period of 1982–2000: Probable influence of the global seismicity on the fluid migration / D.K. Nourgaliev, R.Kh. Muslimov, N.N. Sidorova, I.N. Plotnikova. – Direct text. // Journal of Geochemical Exploration. – 2006. – V. 89. – P. 293-296.



## СЕЙСМИЧНОСТЬ МЕСТОРОЖДЕНИЙ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ПРИМЕРЕ АЛЬМЕТЬЕВСКОЙ ПЛОЩАДИ РОМАШКИНСКОГО НЕФТЯНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

И.Н. Огнев, А.И. Степанов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*stepanov.geo@ya.ru*

В последнее время всё шире обсуждается сейсмическая активность, связанная с деятельностью человека. Одной из важных производственных областей, в которой обсуждается связь сейсмической активности с антропогенным фактором, является сейсмичность при разработке месторождений углеводородов [1,2]. Также изучалась связь сейсмичности с процессами разработки углеводородов на эксплуатируемом с середины XX века комплексе месторождений Юго-Востока Татарстана [3].

В настоящей работе проведён анализ причинно-следственного характера взаимосвязи сейсмической активности с разработкой Альметьевской площади Ромашкинского месторождения, которая расположена в наиболее сейсмически активной области Юго-Востока Татарстана. Был проанализирован каталог сейсмических событий на исследуемой территории за период с 1996 по 2020 и определены корреляционные зависимости между сейсмической активностью и избранными параметрами разработки Альметьевской площади.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в соответствии с Соглашением № 075-11-2019-032 от 26.11.2019 г в рамках проекта "Создание высокотехнологичного программно-аппаратного комплекса на основе нейросетевых алгоритмов для повышения эффективности разработки крупных месторождений углеводородов на поздней стадии".*

1. Keranen, K. M., and Weingarten, M. Induced seismicity, *Ann. Rev. Earth Planet. Sci.* 2017. **46**:149–174.
2. Suckale, J. Induced seismicity in hydrocarbon fields. *Adv. Geophys.* 2009. **51**:55–106
3. Adushkin, V.V., Rodionov, V.N., Turuntaev, S., Yudin, A.E. Seismicity in the oil field. *Oilfield Rev.* 2000. **12** (2), 2–17.

## МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$

Т.В. Трегубова, О.В. Стогней, И.М. Трегубов, А.Г. Москаленко

Воронежский государственный технический университет, Воронеж.

*ttv1507@ya.ru*

Проведено исследование магнитных и магниторезистивных свойств тонкопленочных нанокомпозитов  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  в широком интервале концентраций металлической фазы ( $7 \leq x$ , ат. %  $\leq 55$ ). Исследованы анизотропность магнитосопротивления и величина магниторезистивного эффекта в композитах.

Для получения гранулированных нанокомпозитов металл-диэлектрик  $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF})_{100-x}$  использовался метод ионно-лучевого распыления составных мишеней в лаборатории кафедры физики твердого тела Воронежского государственного технического университета, разработанной д.ф.-м.н. Ситниковым А.В. Для исследования магнитных свойств использовалась установка для измерения магниторезистивного эффекта на основе электромагнита ФЛ-1 и вибрационный магнетометр для измерения петель магнитного гистерезиса. Элементный и фазовый состав образцов контролировался на сканирующем рентгеновском микроанализаторе JXA-840.

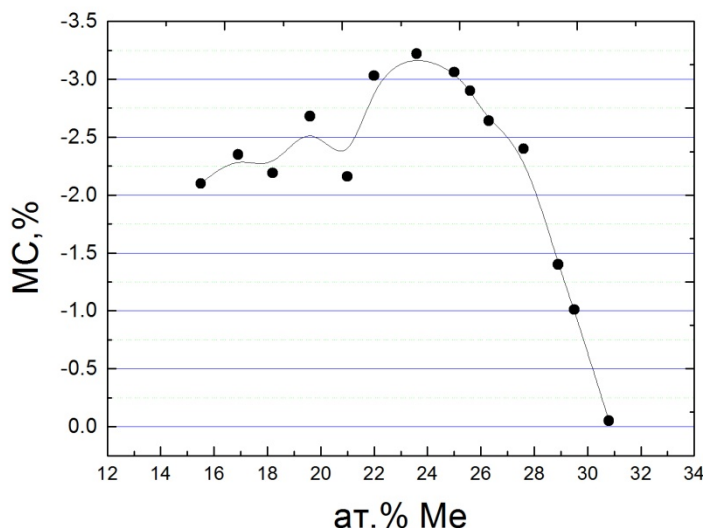


Рисунок 1 – Концентрационная зависимость магнитосопротивления композитов  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  в исходном состоянии.

Установлено, что система композитов  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  проявляет отрицательное магнитосопротивление (рис.1), обусловленное спин-зависимым туннелированием электронов между металлическими наногранулами, причем максимальное значение магнитосопротивления, которое проявляет система  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  достигает 3,25% в поле 10 кЭ.

Отсутствие положительного магнитосопротивления в композитах  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  по всей видимости связано с тем, что не происходит образования лабиринтоподобных кластеров на пороге перколяции.

Установлено, что структура композита  $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  кристаллическая, что обусловлено растворением Zr в диэлектрической матрице. Атомы Zr стабилизируют структуру.

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЁННЫХ ИСТОЧНИКОВ СВЕТА

Е.Д. Федорова

*ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов», Москва, Россия.*

*elenka.fedorova.9912@list.ru*

Новые архитектурные решения часто связаны с необычными источниками света. В работе изучается вопрос влияния формы и типа источника на освещённость помещения. Исследованы точечные, линейные распределённые и поверхностные распределённые источники света. Предложен переход к поверхностным распределённым лампам. Они наиболее эффективны и обладают бестеневым эффектом. Предложен новый инновационный светильник-штора. Актуальность исследования объясняется постепенным переходом к принципиально новым источникам света, в которых изменён не только спектр, но и распределение энергии по излучателю. В технике происходит замена точечных источников света распределёнными излучателями [1,2]. В распределённых источниках энергия излучается либо протяжённой линией, либо светящейся поверхностью. Практическая направленность работы доказана внедрением в технику распределённых подсветок поверхностей как в быту, так и в приборостроении. Для оценки энергоэффективности различных источников света был выполнен сравнительный анализ типовых устройств. Был вычислен поток интегральной лучевой энергии, падающей на пол от точечного источника, линейного и поверхностного. Математические методы связаны с вычислением поверхностных интегралов второго рода. Распределённые источники имеют явное преимущество перед точечными по интегральной освещённости поверхности.

1. Федорова Е.Д. Новый бестеневой источник света и его применение в строительстве, медицине и электронике / Сборник тезисов III Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых учёных "Материалы и технологии XXI века" 29-31 октября 2018. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2018. - 326 с.
2. Федорова Е.Д. Расчёт освещённости поверхности элемента приёмника излучения точечными и распределёнными источниками света / Материалы Международного научного форума "Ломоносов 2019" 8-12 апреля 2019 г. - М.: МГУ им. М.В.Ломоносова.

## БОРЬБА С АСФАЛЬТОСМОЛОПАРАФИНОВЫМИ ОТЛОЖЕНИЯМИ В НАСОСНО-КОМПРЕССОРНЫХ ТРУБАХ

Т.Р. Хабибуллин, П.А. Хлюпин

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа.*

*timur.hub96@gmail.com*

Современные реалии нефтедобывающей отрасли диктуют новые требования по добычи нефти. Усложняется эксплуатация месторождений на завершающей стадии разработки. Одним из неблагоприятных факторов является, образование твердых отложений на внутренних стенках НКТ.

Проблема образования асфальтосмолопарафиновых отложений решается или предотвращением или ликвидацией [2]. Для предотвращения образования АСПО применяют химические реагенты, НКТ с гладкими стенками, а также нагрев нефти до температуры выше фазовой точки. АСПО начинают откладываться на стенках НКТ при интервале температур 28-69 °С и ниже [1].

Нагревание насосно-компрессорной трубы с применением индукционной установки позволит предотвратить образования АСПО.

1. Фарляева А.Ф. Асфальтосмолопарафинистые отложения их свойства, причины и условия образования [Текст] / А.Ф. Фарляева, А.Р. Филипова, Е.Ф. Трапезникова // Вестник молодого ученого. – Уфа: Изд-во УГНТУ. - 2015. - №3. - С.101-106.
2. Галонский, П.П. Борьба с парафином при добыче нефти [Текст] / П.П. Галонский. – М.: Гостоптехиздат, 1960. – 88 с.

## ПЕПЛОВЫЕ ПРОСЛОИ В НЕФТЕМАТЕРИНСКИХ ПОРОДАХ ВОЛГО-УРАЛЬСКОЙ НЕФТЕГАЗОНОСНОЙ ПРОВИНЦИИ

А.С. Хаюзкин, В.П. Морозов, Э.А. Королёв, А.А. Ескин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*alexeykhaiuzkin@mail.ru*

В качестве объектов исследований использовались образцы доманикитов, стратиграфически приуроченных к верхнему девону и нижнему карбону Волго-Уральской нефтегазоносной провинции. Был изучен керн скважины Кутулукская 1, территориально приуроченной к Оренбургской области. Исследования минеральной компоненты пород проводились посредством микроскопического, рентгенографического методов. Исследования органического вещества проводились с использованием пиролиза. Исследования элементного состава проводились с использованием рентенофлуоресцентного анализа.

По результатам исследований в разрезе доманикитов были выявлены многочисленные пепловые прослои, мощностью до 2 см. Макроскопически они определяются цветом, отличным от остальной доманиковой толщи, — от оранжевого до коричневого. Кроме того, пепловые прослои люминесцируют под ультрафиолетовым освещением.

По данным оптико-микроскопического анализа в таких прослоях наблюдается повышенное количество рудного вещества. Это подтверждается и рентгенографическими исследованиями: в пепловых прослоях повышенное содержание пирита. Помимо кварца, кальцита, полевых шпатов и пирита, в составе пепловых прослоев обнаружены цеолиты.

В пепловых прослоях обнаружено органическое вещество, содержание которого достигает 2%. Оно отличается от органического вещества остальной толщи. По данным пиролитических исследований, проводимых методом Rock-Eval, при изучении органического вещества пепловых прослоев, происходит раздвоение пика S2, в то время как при изучении доманикитов был получен лишь один пик S2. Различными являются и показатели S1, S3 и Tmax.

По данным рентгенофлуоресцентного анализа в пепловых прослоях выявлено повышенное содержание ZrO<sub>2</sub>, MgO, FeO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>.

## НЕФТЯНЫЕ ЗАЛЕЖИ ВЕРЕЙСКОГО ГОРИЗОНТА РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

А.Ф. Хузина, А.Э. Королёв

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*al.khuzina@mail.ru*

На территории Республики Татарстан нефтяные залежи верейского горизонта относятся к сложным объектам нефтедобычи. В первую очередь это обусловлено недостаточной геологической информацией об особенностях их формирования. В рамках данной работы было проведено изучение литолого-минералогического состава пород коллекторов и степени окисленности, находящихся в них нефтей. Было установлено, что в разрезах верейского горизонта породами коллекторами являются разнофациальные известняки грейнстоуны, песчаники и алевролиты, образовавшиеся в регрессивную стадию развития морского бассейна седиментации. Потенциальные коллекторские свойства, заложенные при седиментации пород, реализовались в период миграции водонефтяных флюидов. За счет процессов выщелачивания пористость известняков грейнстоунов увеличилась до 15-20%, песчаников и алевролитов – до 10-15%. В последствие сформировавшиеся нефтеносные пласты верейского горизонта испытали процессы естественного заводнения. Проникающие в породы коллекторы пластовые законтурные воды, обогащенные активным кислородом и сульфат-ионами, приводили к неравномерному окислению нефтей в различных нефтеносных пластах разреза верейского горизонта. При слабом заводнении пластов в составе нефтей уменьшается доля легких фракций углеводородов, доминирующими становятся средние и тяжелые фракции. При этом в породах коллекторах появляются аутигенные доломит и пирит. При сильном заводнении пластов в составе нефтей преобладают тяжелые фракции углеводородов, содержание средних углеводородов существенно уменьшается, легкие – полностью исчезают. В породах коллекторах появляются аутигенные агрегаты ангидрита. Вторичные минералы существенно усложняют структуру порово-емкостного пространства пород коллекторов, сужая межзерновые каналы фильтрации. В результате окисления нефтей и отложения новообразованных минеральных фаз на некоторых объектах нефтедобычи можно ожидать сложности извлечения флюидов при разработке пластов верейского горизонта.

**СЕКЦИЯ 5 СПЕЦИАЛЬНАЯ СЕКЦИЯ  
НАУЧНОГО ЦЕНТРА МИРОВОГО  
УРОВНЯ (НЦМУ) – «РАЦИОНАЛЬНОЕ  
ОСВОЕНИЕ ЗАПАСОВ ЖИДКИХ  
УГЛЕВОДОРОДОВ ПЛАНЕТЫ»**

## ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН

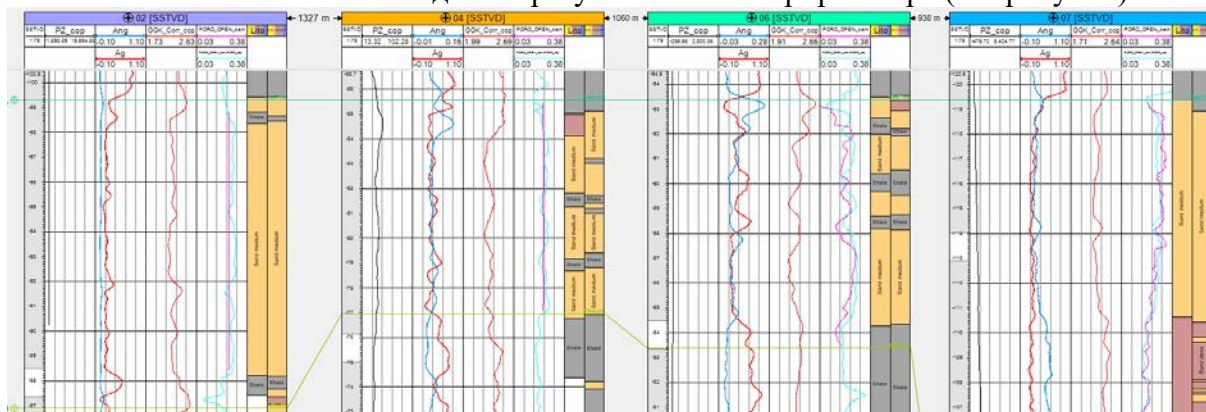
А.А. Аверьянов, Р.А. Зинюков, В.А. Судаков

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*averyanov.sashuta@mail.ru*

При поиске новых нефтеперспективных горизонтов проводят геофизические исследования скважин, интерпретация которых вручную занимает очень много времени. С целью оптимизации данного процесса было предложено использовать нейронную сеть для интерпретации каротажных данных [1].

Исследования проводились на платформе Petrel-2018. Используемая модель включала в себя 30 скважин, 13 из которых содержали газонасыщенный интервал и находились в сводовой части поднятия. Обучение нейронной сети проводилось на основе методов ГИС: плотностного каротажа, нейтронного каротажа и каротажа сопротивления. В процессе изучения изменялось количество скважин, используемых для обучения. В результате применения нейронной сети, газонасыщенный интервал был выделено только в 10/13 случаях. Причем, в 9 случаях данные интерпретации совпали с данными нейросети, в 4 случаях нейронная сеть не определила газонасыщенный пласт, и в одном случае нейронная сеть выделяет газонасыщенный пласт за внешним контуром газоносности. В остальных 17 скважинах, не содержащих газонасыщенный пласт, литология расчленяется с удовлетворительной точностью, данные полученные нейросетью почти полностью совпадают с результатами интерпретатора (см. рисунок).



Таким образом из 30 скважин в 27 (90%) результаты интерпретации и нейронной сети совпадают удовлетворительно. Следовательно, применение нейронных сетей для интерпретации данных ГИС возможно.

1. Паклин Н.Б., Мухамадиев Р.С. Использование обучающихся алгоритмов для интерпретации данных ГИС. – М.: Бурение и нефть, 2005. – № 5. – С. 12-16.



## ПРИМЕНЕНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ ПОИСКЕ ЦЕЛИКОВ НЕФТИ

А.А. Аверьянов, Р.А. Зинюков, В.А. Судаков

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*averyanov.sashuta@mail.ru*

Большинство месторождений нефти разрабатываются методом заводнения. В связи с этим увеличивается обводненность пластов нефти и увеличивается площадь зоны водонефтяного контакта. Установлено, что отдельные виды бактерий, обитающие главным образом в водной среде, способны окислять алкановые соединения нефти. Данный процесс называется биодеградацией нефти и происходит в зоне соприкосновения нефти и воды [1,2].

В процессе изучения геохимического состава проб нефти было выявлено, что пробы попутного нефтяного газа из скважин, находящихся в районах недренлируемых застойных зон (целиков), не были подвергнуты биодеградации, а значит должны отличаться по составу от проб газа из промытых участков. При исследовании соотношения изобутан/бутан было выделено 2 типа аномалий, связанных с изменением компонентного состава нефти. Аномалии 1-го типа связаны с увеличением концентрации пентана и гексана. Аномалии 2 типа сопровождаются резким повышением процентного соотношения метана. Данные геохимического анализа были сопоставлены с данными гидродинамического моделирования и в результате была получена карта вероятности нахождения остаточных запасов нефти на исследуемой территории.

Таким образом, идентифицируя скважины, в которых происходит периодическое изменение состава нефти и попутного нефтяного газа, а именно снижение отношения изобутан/бутан и рост доли тяжелых компонентов, можно локализовать зоны с максимальной вероятностью нахождения целиков нефти.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в соответствии с Соглашением № 075-11-2019-032 от 26.11.2019 г в рамках проекта "Создание высокотехнологичного программно-аппаратного комплекса на основе нейросетевых алгоритмов для повышения эффективности разработки крупных месторождений углеводородов на поздней стадии".*

1. Milkov, A.V. Methanogenic biodegradation of petroleum in the West Siberian Basin (Russia): Significance for formation of giant Cenomanian gas pools – AAPG Bulletin. – 2010. – № 10. – P. 1485-1541.
2. Геомикробиология поиска и разработки нефтяных месторождений: сб. статей. / АН СССР, Урал. науч. Центр; Отв. ред. В.Н. Большаков, В.П. Коробов – Свердловск, 1979. – 156 с

## МЕТОДЫ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ 3D КАРТИРОВАНИЯ МИНЕРАЛОВ В ОБЪЕМЕ ОБРАЗЦА КЕРНА

В.В. Алексеев, Д.М. Орлов, Д.А. Коротеев

*Сколковский институт науки и технологий, Москва.*

*vladislav.alekseev@skoltech.ru*

При работе с керновым материалом важной информацией является состав минерального скелета и структура пустотного пространства. Экспертный анализ структуры пустотного пространства на изображениях, полученных с помощью электронного микроскопа или компьютерного томографа ( $\mu$ СТ), является длительным и часто дорогостоящим процессом, подверженным влиянию человеческого фактора. Алгоритмы для работы со снимками, такие как пороговая обработка снимков [1] и ее модификация на основе маркеров [2] не подходят для качественной многоклассовой сегментации изображений  $\mu$ СТ. Основным минусом этих методов является ограниченный набор критериев для выполнения сегментации.

В последнее десятилетие активно развиваются более сложные алгоритмы – свёрточные нейронные сети (Convolutional neural networks, CNN), которые успешно применяются в различных областях компьютерного зрения. Целью нашей работы является оценка предсказательной способности различных CNN, таких как LinkNet и U-Net и их модификаций для минерального картирования трехмерных изображений  $\mu$ СТ реальных образцов горных пород.

В ходе работы были предварительно обработаны изображения с помощью различных фильтров и алгоритмов, обучены CNN и проанализированы их предсказательные способности для целей построения трехмерных минеральных моделей образцов горных пород.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-10-2020-119 в рамках программы развития НЦМУ.*

1. M. Sezgin, B. Sankur. *Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation*, 2004. Journal of Electronic Imaging, **13(1)**, 146-168.
2. P. Iassonov, T. Gebrenegus, M. Tuller. *Segmentation of X-ray computed tomography images of porous materials: A crucial step for characterization and quantitative analysis of pore structures*, 2009. Water Resources Research, **45**.

## ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ

А.А. Ахмадияров<sup>a,b</sup>, А.А. Петров<sup>a</sup>, М.А. Варфоломеев<sup>a,b</sup>, И.Т. Ракипов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань;*

<sup>b</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*AAAhmadiyarov@kpfu.ru*

Задача увеличения нефтеотдачи из недр известных нефтяных месторождений стала в последние десятилетия не только актуальной и острой проблемой нефтяной промышленности, но и одной из важных экономических проблем. При этом большая часть известных запасов нефти характеризуется высокой величиной вязкости нефти, которая является причиной неудовлетворительной эффективности извлечения. Увеличение температуры приводит к понижению вязкости, по этой причине на практике применяются различные подходы для искусственного теплового воздействия на пласт. Одним из таких методов является внутрислоевого горение, основанное на способности нефти окисляться кислородом воздуха с выделением большого количества теплоты. Помимо нагнетания в пласт воздуха, недавно предложено добавление катализаторов на основе оксидов металлов, способствующих изменению кинетических параметров процесса окисления тяжелой нефти.

В данной работе с помощью метода адиабатической реакционной калориметрии исследовано влияние количественного и качественного состава газовой фазы на каталитическое окисление тяжелой нефти с Ашальчинского месторождения в присутствии оксида кобальта  $\text{Co}_3\text{O}_4$ . Показано, что увеличение концентрации кислорода вдвое относительно воздуха приводит уменьшению энергии активации окисления, причем порядок реакции одинаков. Обнаружено, что процесс каталитического окисления нефти имеет разный порядок реакции при проведении в атмосфере бинарных газовых смесей кислорода (40 % об) с азотом или углекислым газом, что означает разный механизм протекания реакций окисления.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-35-80024.*

## ЦИФРОВАЯ ОБРАБОТКА ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ ШЛИФОВ

Р.Ф. Ахметов<sup>а</sup>, В.П. Морозов<sup>а</sup>, Т.А. Муртазин<sup>а</sup>, В.А. Судаков<sup>а</sup>, З.Д. Каюмов<sup>б</sup>, Д.Н. Тумаков<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань.*

*axmetov19999@mail.ru*

Актуальность. Одним из важнейших полезных ископаемых современности считается нефть. При бурении нефтяных скважин извлекается керн, из образцов которого изготавливаются шлифы. Производится их анализ и построение модели геологического строения месторождений. В настоящее время сегментация изображений изготовленных шлифов пород-коллекторов обычно выполняется вручную, что требует значительных временных затрат, при этом результаты анализа в большей степени зависят от квалификации специалиста.

Целью данного исследования является разработка автоматизированной методики анализа изображений петрографических шлифов. В частности, определение участков порового пространства, определение границ и основных параметров минеральных зерен (сегментация и гранулометрический анализ).

В качестве объектов исследований использовались образцы (шлифы) терригенных пород пашийского горизонта верхнего девона Волго-Уральской нефтегазоносной провинции, а именно – керн скважин, территориально приуроченных к Южно-Татарскому своду. В работе использованы следующие выделенные литотипы: I – кварцевые песчаники мелкозернистые; II – алевролиты крупнозернистые; III – алевролиты среднезернистые.

Для достижения поставленной цели в данной работе были определены задачи работы: 1) изучение керна; 2) отбор представительных образцов; 3) изготовление петрографических шлифов; 4) микроскопическое изучение петрографических шлифов; 6) фотографирование представительных участков шлифов при одном и двух николях; 7) обработка изображений, посредством наложения изображений в поляризованном свете при различных углах; 8) ручная разметка изображений шлифов в программе Microscopy Image Browser; 9) создание архитектуры нейронной сети, подбор гиперпараметров; 10) процесс обучения модели нейронной сети; 11) проведение гранулометрического анализа и определение значения пористости.

Методика работы. Исследования минеральной компоненты пород проводились посредством микроскопии с дальнейшей ручной разметкой зерен минералов в программе Microscopy Image Browser. Создание архитектуры нейронной сети, подбор гиперпараметров. Процесс обучения нейронной сети – модель учится воспроизводить разметку, которую ранее сделал эксперт. Классифицируется каждый пиксель исходных изображений на классы - фон, граница и типы минеральных зерен. В итоге, зная геометрию зерен и их "минеральную" принадлежность, можно провести гранулометрический анализ. Значение пористости на изображениях шлифов определяется как отношение общей площади изображения на площадь темных (почти черных) областей анализируемой области шлифа.

Результатом исследования является сравнение значений пористости, гранулометрического анализа и разметки минералов на изображении участка шлифа нейронной сети и эксперта.

## ДИНАМИЧЕСКАЯ АДСОРБЦИЯ МЕТОДОМ ВЭЖХ КОМПОЗИЦИИ ПАВ ПРИ СВЕРХВЫСОКОЙ МИНЕРАЛИЗАЦИИ

А. Выков, А. Malakhov, Е. Saifullin

*Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия.*

*AOBykov21@gmail.com*

**Ключевые слова.** Высокоэффективная жидкостная хроматография, динамическая адсорбция, поверхностно-активное вещество, композиция, минерализация, фильтрационный эксперимент

**Цель.** Целью данной работы являются лабораторные исследования динамической адсорбции ПАВ при сверхвысокой минерализации.

**Материалы и методы.** Исследования проводились в условиях близких к пластовым для Ивенского месторождения на двух горизонтах: верейский и башкирский. Тип коллектора – карбонатный. Пластовая температура составляет 21-22 °С, для тестов принята температура 23 С. Нагнетаемая вода является сильным рассолом с минерализацией 267,98 г/л, и относится к хлоридно-кальций-натриевому типу. Целевая концентрация ПАВ 0,3% масс. Проведено исследование растворимости и стабильности: растворы ПАВ были приготовлены на воде поддержания пластового давления (ППД), растворимость определялась визуальным методом. Стабильность растворов исследовалась в течение 14 дней с визуальной оценкой гомогенности и выпадения осадка. Далее была проведена оценка межфазного натяжения исследуемых ПАВ и композиций на их основе. По итогам тестов были отобраны две лучшие композиции ПАВ, у которых была оценена динамическая адсорбция: получены величины динамической адсорбции, аддитивной адсорбции и показана скорость адсорбции для двух горизонтов.

В работе использован высокоэффективный жидкостной хроматограф Shimadzu Prominence, детектор по светорассеянию ELSD-LT II и разделительная колонка фирмы «Thermo Scientific» Acclaim Surfactant Plus LC Columns. Получены калибровочные кривые на основе 4 точек различной концентрации для каждого раствора композиции ПАВ, получены уравнения калибровочной кривой, которые используются в ходе определения концентрации ПАВ при фильтрационных экспериментах.

**Результаты.** В результате проведенных экспериментов в свободном объеме была установлена совместимость представленных композиций с пластовыми флюидами. Проведены фильтрационные эксперименты с оценкой динамической адсорбции ПАВ для двух горизонтов. Определены величины адсорбции, аддитивной адсорбции и показана скорость адсорбции. Согласно результатам измерений, адсорбция композиции ПАВ №1 для башкирского горизонта немного меньше (1,24 мг/г), чем для верейского (1,73 мг/г), в то время как у композиции ПАВ №2 результаты имеют противоположный характер: 1,97 мг/г для башкирского и 0,96 мг/г для верейского. Все составы удовлетворяют требованию – значение максимальной адсорбции не превышает 5 мг/г.

**Заключение.** Важным фактором, оказывающим существенное влияние на процесс адсорбции ПАВ на твердой поверхности, является время контакта. На основе полученных результатов, адсорбция поверхностно-активного вещества характеризуется коротким периодом быстрой адсорбции с последующим длительным периодом медленной адсорбции..

## ПОДБОР ГРАФА ОБРАБОТКИ СЕЙСМИЧЕСКИХ ДАННЫХ МОГТ-2Д ДЛЯ ПЛОЩАДИ N СЕВЕРНОГО РАЙОНА ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ

Ф.Н. Гараев

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*fagim.n.garayev@gmail.com*

В данной работе рассматривается площадь N, расположенная в Северном районе Оренбургской области. В плане тектонического строения, территория площади расположена в зоне сочленения Серноводско-Абдуллинского авлакогена, осложненного на северном борте Пашкинско-Фоминовским выступом

Целью работы является подбор графа обработки сейсмических данных для получения качественных временных разрезов с хорошим прослеживанием основных отражающих горизонтов.

Граф обработки метода ОГТ состоит из следующих основных этапов: предварительная обработка, ввод и оптимизация статических поправок, ввод и оптимизация кинематических поправок, суммирование трасс по ОГТ.

Обработка сейсмических данных 2D проведена с использованием пакета программ ECHOS компании Paradigm Geophysical.

Основной задачей на этапе предварительной подготовки является подавление волн помех для улучшения прослеживаемости отраженных волн. С этой целью проведены процедуры подавления аномальных амплитуд, проведена полосовая фильтрация в полосе частот 8-12-100-120 Гц. Для подавления среднескоростных волн помех путем тестирования подобраны параметры двумерного F-K фильтра. С целью увеличения разрешенности для сейсмограмм, полученных вибрационным источником, применена процедура нуль-фазовой деконволюции сжатия.

Процедура ввода и коррекции статических и кинематических поправок выполняется в несколько итераций, и продолжается до получения качественного временного разреза. Скоростной анализ происходит в интерактивном режиме на основе одновременного анализа спектра скоростей и фрагментов временных разрезов. При каждой последующей итерации происходило уточнение скоростного закона.

Таким образом, подобран граф обработки для площади, применение которого позволяет получить качественные временные разрезы, с прослеживанием отражающих горизонтов Кл, В, У, Д. По результатам тестирования, для подавления низко- и среднескоростных волн заданы оптимальные параметры для двумерного F-K фильтра.

Подбор правильного графа обработки позволяет в дальнейшем получить более достоверную структурную интерпретацию.

## ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОРАЗРЫВА ПЛАСТА С ЦЕЛЬЮ ОПТИМИЗАЦИИ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ДОБЫЧИ НЕФТИ

Э.Р. Зиганшин, Е.С. Быстров

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия.*

*Eduard-ziganshin@mail.ru*

Гидро разрыв пласта (ГРП), наряду с мерами по поддержанию пластового давления, является основным методом интенсификации добычи нефти. На Российском рынке в 2019 году впервые за последние десять лет произошёл переход от отрицательной динамики к положительной по успешным операциям гидро разрыва пласта. Так, по сравнению с 2018 годом, количество успешных операций в 2019 году выросло на 8 %. 2020 год оказался довольно кризисным для нефтяного рынка, что вызвало снижение объемов проведения ГРП на 15 % в физическом выражении. Однако, по прогнозам экспертов, в ближайшие годы ожидается рост спроса на проведение гидро разрыва пласта, в частности на такие операции как многостадийный гидро разрыв в горизонтальных скважинах. [1].

При использовании технологии гидро разрыва возникает ряд проблем и задач, которые необходимо решить, например, оценить требуемое давление нагнетания и предсказать геометрию трещин. Существует множество теоретических и экспериментальных исследований возникновения и распространения трещины гидро разрыва [2-4]. Все известные модели имеют ограничения, оценить которые можно только проводя эксперименты. Эксперименты в реальных условиях, на месторождениях, проводить или невозможно, или очень сложно и дорого. Поэтому требуется проводить эксперименты на образцах реальных пород или на искусственных образцах. Исходя из опыта ранее проводимых лабораторных экспериментов на песчаниках Fontainebleau и глинистых песчаниках Vosges можно говорить о хорошей согласованности результатов лабораторных данных с реальными операциями в скважине [5].

В лаборатории геомеханики института геологии и нефтегазовых технологий Казанского (Приволжского) федерального университета был проведен ряд экспериментов по физическому моделированию гидро разрыва пласта на реальных образцах песчаников, отобранных из нефтяной скважины. В цилиндрических образцах просверливалось отверстие диаметром 8 мм (модель скважины), в которое нагнеталась жидкость под высоким давлением. Образцы при этом находились в камере трехосного сжатия в условиях, приближенных к пластовым. При помощи датчиков фиксировалось давление разрыва породы, используемое в дальнейшем при построении дизайна ГРП. После проведения теста на гидро разрыв определялась геометрия трещины ГРП при помощи компьютерной томографии. В результате лабораторных тестов на гидро разрыв были измерены значения градиента гидро разрыва горных пород и изучена геометрия полученных трещин. Данная информация является ценным материалом, позволяющим увеличить точность моделей дизайна ГРП.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-15-2020-931 в рамках программы развития НЦМУ «Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты».

1. RPI: Research and consulting. Российский рынок гидро разрыва пласта: текущее состояние и сценарии его развития до 2030 г., 2021, 118 с.
2. Economides M.J. and Nolte K.G. / Reservoir Stimulation (3rd Edition). Willey, 2000.
3. Stanchits S., Mayr S., Shapiro S., Dresen G. Fracturing of porous rock induced by fluid injection // Tectonophysics. 2011. 503: 129–145.
4. Zoback M.D., Rummel F., Jung R. and Raleigh C.B. Laboratory hydraulic fracturing experiments in intact and pre-fractured rock / Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr. 1977 14(2): 49–58.
5. Le Tirant P., Baron G. Fracturation hydraulique des roches sédimentaires en conditions de contraintes de fond. Comptes rendus 3 Colloque de l'A.R.T.F.P., Paris, 1969, p. 361-420

## ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ ПАВ В СОСТАВЕ КОМПОЗИЦИИ МЕТОДОМ ВЭЖХ

Д.И. Валишева, А.О. Малахов, Э.Р. Сафиуллин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*valisheva.dinara@mail.ru*

**Вступление.** В настоящее время перспективным направлением исследования химических МУН становится оценка динамической адсорбции ПАВ при внутрислоевой обработке коллектора. Экспериментально был обнаружен эффект неравномерной сорбции ПАВ в составе композиции.

**Материалы и методы.** В работе рассматривается композиция на основе анионных ПАВ. Композиция ПАВ представлена реагентом №1 и №2 соотношением 9/1, соответственно, концентрацией 0,5% масс. Для данной композиции ПАВ проведены тесты свободного объема, а также фильтрационные эксперименты.

**Результаты.** В ходе работы были получены данные о динамической адсорбции, определена аддитивная величина и ее скорость. Аддитивная адсорбция композиции ПАВ №1/№2 для высокопроницаемого ядра оказалась в 2 раза выше, чем для низкопроницаемого ядра. Отмечено несоразмерное изменение концентрации компонент №1 и №2 при адсорбции в составе композиции (рисунок 1).

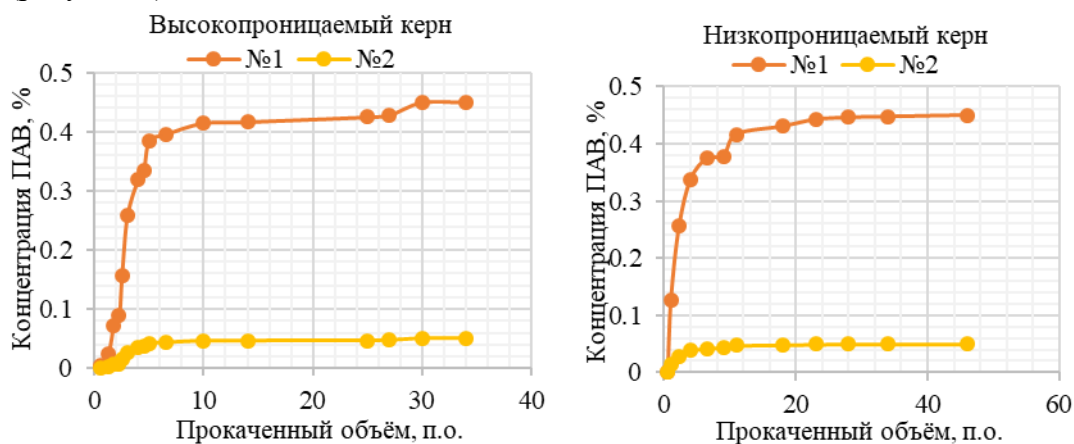


Рисунок 1 – Кривая восстановления концентрации от порового объема компонент №1 и №2 в составе композиции ПАВ.

**Выводы.** По результатам определения динамической адсорбции композиции ПАВ №1/№2 (9/1) концентрацией 0,5% масс. значение адсорбции составляет менее 5 мг/г, что является хорошим результатом. Наблюдаемое явление различной динамики восстановления концентрации компонент в композиции ПАВ говорит о разной скорости адсорбции и площади контакта с внутренним объемом пор.

Оценка динамической адсорбции методом ВЭЖХ имеет ряд преимуществ: большой объем и скорость обработки получаемой информации, наглядность данных при измерении концентрации каждого компонента в композиции (время выхода, площадь, форма и интенсивность пиков ПАВ). Все это позволяет отследить изменение структуры ПАВ в ходе химической деструкции.



## ПРОБЛЕМЫ И ВОЗМОЖНОСТИ ПОИСКОВ И РАЗВЕДКИ ЗАЛЕЖЕЙ НЕФТИ ТЕРРИГЕННОГО ДЕВОНА ПРИ ОСВОЕНИИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ТАТАРСТАНА

Р.Р. Гиниятуллин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань.*

*radel0099@gmail.com*

На сегодняшний день, в условиях высокой опоскованности недр на востоке Татарстана, объектами поиска и разведки становятся более мелкие нефтяные месторождения. Особый интерес представляют залежи терригенного девона, при освоении которых возникает ряд проблем. Девонские ловушки нередко связаны с поднятиями малых размеров и амплитуд, в придачу характеризующиеся погребенными условиями залегания, что существенно осложняет процесс их выделения. При их опосковании возникает проблема несовпадения структурных планов по отражающим горизонтам «Д» и «У», которая во многих случаях приводила к отрицательным результатам бурения. Внедрение сейсморазведки МОГТ кардинально не улучшило ситуацию с поисками нефти в терригенном девоне. Проанализировав геологическую изученность некоторых площадей, можно отметить, что девонские ловушки следует рассматривать как самостоятельный поисковый объект, при выделении которого на большинстве площадей требуется совершенствование технологии сеймопрофилирования путем доведения плотности сети до кондиционных значений (3,5-4 пог.км/км<sup>2</sup>), а также массового внедрения сейсморазведки МОГТ-3Д, как более достоверного метода за счет высокой детальности и равномерности исследований. Углубление отдельных краевых скважин, пробуренных на вышезалегающие объекты, также является возможным решением при поиске девонских залежей.

Изучение тектоники, генезиса и морфологии поднятий, контролирующих залежи нефти, позволит уточнить перспективы их нефтеносности. Первоочередными для опоскования должны являться поднятия сквозного типа тектонического генезиса. Сегодня также следует уделять внимание погребенным ловушкам тектонического типа, а также ловушкам тектоно-седиментационного происхождения. В частности, последние характеризуются развитием верхнедевонских биогермных построек, которые могут создать ложную волновую картину при интерпретации сейсморазведки.

При разведке малоамплитудных поднятий не стоит ограничиваться лишь сейсмическими исследованиями: актуальным является применение таких новейших методов как, например, комплекс геофизико-геохимических методов (ГГХМ), который эффективен при поисках залежей неструктурного типа, или скважинная сейсморазведка (НВСП), разрешающая способность которой позволяет скорректировать результаты традиционной сеймики. Опыт применения этих и других методов при разведке залежей терригенного девона в Татарстане доказывает их эффективность.

Комплексная интерпретация сейсмических данных с новейшими методами прогноза нефтеносности позволит рассчитывать на повышение эффективности геологоразведочных работ.

## ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В СВОБОДНОМ ОБЪЕМЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЛИЯНИЯ СВОЙСТВ НЕФТИ НА ПЕНООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ РАСТВОРОВ ПАВ

Ш.К. Жанбосынова, Э.Р. Сайфуллин, С.Ю. Иванов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;  
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*sk.zhanbossynova@gmail.com*

Эффективность применения пены для повышения нефтеотдачи пластов доказана во многих научных исследованиях [1,2,3]. В настоящее время выравнивание профиля приемистости в пластах с высокой неоднородностью является актуальной проблемой для многих компаний. Одним из предлагаемых решений является ПАВ заводнение. В то же время важным моментом становится стабильность пены при ее закачке в пласт. Во время этого метода пена непосредственно контактирует с пластовыми жидкостями, такими как пластовая вода и нефть. В этом исследовании представлены механизмы и теории, объясняющие влияние различных видов нефти на пену.

Настоящее исследование посвящено изучению влияния нефти с различной вязкостью и плотностью на стабильность пены для прогнозирования поведения ПАВ заводнения в присутствии нефти.

В ходе исследования были изучены 5 пенообразующих агентов (ПАВ) и 3 вида нефти с различными свойствами.

В таблице 1 представлены результаты тестирования ПАВ без добавления нефти. Все тесты проводились 3 раза для получения средних значений.

Таблица 1 – Средние кратность и полураспад пены.

ПАВ	Средняя кратность пены	Средний полураспад пены, с
1	5,85	502
2	5,13	501
3	6,19	364
4	6	254
5	5,17	483

Далее тесты проводились в присутствии нефти.

Согласно полученным результатам, были предложены теории влияния нефти с различным составом и свойствами на качество образующейся пены. В целом кратность пенообразования постепенно уменьшается с увеличением объема нефти, в то же время полураспада увеличивается. Последнее можно объяснить с точки зрения образования пены из раствора нефти + поверхностно-активного вещества с более высокой вязкостью по сравнению с пеной, образующейся без нефти, что, в свою очередь, значительно снижает дренаж жидкости в ламелях пены.

1. Guo H. et al. A novel alkaline-surfactant-foam EOR process //SPE Enhanced Oil Recovery Conference. – OnePetro, 2011.
2. Jones S. A. et al. Surfactant screening for foam EOR: Correlation between bulk and core-flood experiments //Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2016. – Т. 500. – С. 166-176.
3. Andrianov A. et al. Immiscible foam for enhancing oil recovery: bulk and porous media experiments //Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2012. – Т. 51. – №. 5. – С. 2214-2226.

## МЕСТОНАХОЖДЕНИЕ БЕССКЕЛЕТНЫХ ОРГАНИЗМОВ И МЯГКИХ ТКАНЕЙ БЕСПОЗВОНОЧНЫХ В АРГИЛЛИТАХ ТИМАНСКОГО ГОРИЗОНТА (ФРАНСКИЙ ЯРУС, ДЕВОН) ЮЖНО-ТАТАРСКОГО СВОДА

В.В. Силантьев, Д.Н. Мифтахутдинова, Н.Г. Нургалиева, В.В. Жаринова, М.Н. Уразаева

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*Veronika.Zharinova@kpfu.ru*

Тиманский горизонт представляет собой терминальную часть Девонского терригенного комплекса Южно-Татарского свода (ЮТС). Он представлен карбонатно-глинистым разрезом, включающим репер «верхний известняк». Ниже и выше «верхнего известняка» присутствуют пачки аргиллитов, алевролитов и песчаников с морской фауной и/или следами жизнедеятельности (ихнофоссилиями) морских организмов. На территории Волго-Уральской области снование тиманского горизонта принято условно сопоставлять с началом морской трансгрессии и нижней границей франского яруса [1].

В 2021 г при изучении керна серии скважин в аргиллитах, залегающих непосредственно выше репера «верхний известняк» обнаружено уникальное по степени сохранности захоронение бесскелетной фауны (Konservat-Lagerstätten), включающее отпечатки многощетинковых червей-полихет, проблематичных остатков и мягких тканей беззамковых брахиопод лингулид.

Кроме этих остатков данный уровень включает отпечатки (!) конодонтов, раковины остракод, раковины морских двустворчатых моллюсков с сохранившейся первичной микроструктурой раковинного вещества. Здесь же встречены раковины конхострак *Glyptoasmussia*, которые традиционно считаются пресноводными обитателями [2]. В морских отложениях девона конхостраки известны из разрезов Бельгии [3].

На поверхностях напластования аргиллитов, включающих остатки мягкотелой фауны, часто наблюдается фрамбоидный пирит, указывающий на бескислородные условия осадка (и придонного слоя воды), и на глубину бассейна ниже базиса нормальных (и, возможно, штормовых) волн или на условия закрытых лагун.

Сохранение мягких тканей организмов возможно в бескислородной среде при быстром захоронении и консервации осадка.

Захоронение первично фосфатных конодонтов в виде отпечатков свидетельствует о специфических физико-химических условиях диагенеза, при которых поведение растворимых реактивных концентраций фосфора, вероятно, контролировалось содержанием ионов кальция при Eh<0 мВ и рН=5÷6 (например, [4]). Возможно, кислая среда в осадке возникала, благодаря поступлению органических кислот.

Интервал с остатками мягкотелой фауны прослежен в пределах нескольких площадей ЮТС и может служить региональным макро-маркером тиманского горизонта.

1. Фортунатова Н.К., Зайцева Е.Л., Карцева О.А. *Строение девонского терригенного комплекса и положение границы среднего и верхнего девона на западе Татарстана*, Бюлл. МОИП. Отд. геол., 2013, Т. 88, вып. 2, 22–49.
2. Новожилов Н.И. *Двустворчатые листоногие девона*, Труды Палеонтологического института, 1961, Т. LXXXI, 1–182.
3. Webb J.A. *A Reappraisal of the Palaeoecology of Conchostracans (Crustacea: Branchiopoda)*, Geol. Palänt. Abh., 1979, Vol. 158, no. 2, 259–275.
4. Moore P.A.Jr., Reddy K.R. *Role of Eh and pH Phosphorus Geochemistry in Sediments of Lake Okeechobee, Florida*, J. of Environmental Quality, 1994, Vol. 23, no. 5, 955–964.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО КАЧЕСТВА ПЕНЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ПРОФИЛЯ ВЫТЕСНЕНИЯ

Д.А. Жарков, Э.Р. Сайфуллин

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*dm-zharkov@yandex.ru*

На некоторых месторождениях, в настоящее время происходит прорыв газа из газовой шапки в эксплуатационные скважины из-за сильной неоднородности пласта. Пена считается одним из эффективных методов для блокирования газа [1]. Для эффективной блокировки газа в добывающей скважине пена должна обладать значительным временем полураспада для поддержания стабильной пены. Для увеличения стабильности пены применялись полимерные системы.

Цель исследования определить оптимальное качество пены – доля азота в общем газожидкостном потоке ( $f_g$ ) и оценить эффективность добавления полимера к раствору пенообразующего агента.

Оценить газоблокирующую способность пены можно по кажущейся вязкости пены, которую можно определить при прокачке вспененного раствора через пористую среду [2]. Для определения оптимального соотношения газ/жидкость в потоке, а также определения кажущейся вязкости были проведены фильтрационные эксперименты с использованием однородных терригенных образцов искусственного керна (не содержащих нефть). Исследования проводились на фильтрационной установке «М-1» при пяти соотношениях объемного расхода газа к общему расходу газожидкостной смеси. Эксперименты показали, что кажущаяся вязкость пены в керне сначала увеличивается, а затем уменьшается с изменением качества пены. Оптимальный режим закачки составил 0,65. Кроме того фильтрационные эксперименты показали, что газоблокирующая способность пены, образованной из раствора поверхностно-активного вещества с полимером лучше.

1. Svorstol, I., 1996. Laboratory studies for design of a foam pilot in the Snorre field. *OnePetro*
2. Rudyk, S., Al-Khamisi, S., Al-Wahaibi, Y., & Afzal, N. 2019. Internal olefin sulfonate foam coreflooding in low-permeable limestone at varying salinity. *Energy & Fuels* 33 (9): 8374-8382.

## ИССЛЕДОВАНИЯ КЕРНА СКВАЖИН СРЕДНЕФАМЕНСКИХ ОТЛОЖЕНИЙ В СОСТАВЕ ДАНКОВО-ЛЕБЕДЯНСКОГО ГОРИЗОНТА

И.И. Идрисов, А.Н. Кольчугин, В.П. Морозов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*illyas\_irekovich@mail.ru*

Целью проводимых исследований было выявление закономерностей литологического строения нескольких разрезов крайней юго-восточной части Татарстана, в составе данково-лебедянского горизонта среднего фамена. Исследования проводились на основании литологического изучения керна 4-х скважин.

Полученные по материалам исследования керна данные показали, что изученные отложения представляют собой нормально морские известняки, сформированные в условиях обширной карбонатной платформы. Условия осадконакопления были во многом унаследованы от раннефаменского времени (задонско-елецкое время). Предполагается, что в данково-лебедянское время режим бассейна несколько изменился в сторону более подвижных обстановок [1], на что указывают появляющиеся в отложениях горизонта брекчиевые и брекчиеподобные текстуры, вероятно связанные с активностью бассейна вследствие волнового и штормового воздействия на формирующиеся карбонатные осадки. При этом глубины согласно изучению литологического и палеонтологического состава были незначительными и составляли в среднем 30-40 м.

Основными типами известняков, слагающих разрезы, выступили вакстоуны и пакстоуны, с незначительной долей псевдобрекчированных известняков. Анализируя данные литологической сменяемости по разрезу, можно отметить, что преобладающими литотипами являются кальцисферово-остраковдовые вакстоуны, пелоидно-комковатые пакстоуны встречаются несколько меньше. Однако, в скважине, находящейся на севере-востоке, именно пакстоуны являются преобладающим литотипом.

Пустотно-поровое пространство в изученных разрезах представлено порами и трещинами. При этом поры имеют важное значение лишь в интервалах развития пакстоунов, где они образованы вследствие вторичного процесса выщелачивания. Однако не все пакстоуны повсеместно обладают промышленно значимой пористостью. В этой связи плотные пакстоуны с пористостью до 3-5% были обозначены в качестве условного типа Пакстоун-1, пористые с межзерновой вторичной пустотностью, с пористостью до 20% – Пакстоун-2.

Трещиноватость и микротрещиноватость пород плохо различима в керне, однако, представляется, что именно такой тип пустотности является решающим в обеспечении общей емкости пород-коллекторов данково-лебедянского горизонта. Вероятнее всего, пористость плотных вакстоунов и плотных пакстоунов связана именно с трещиноватостью, природа которой может быть как литологической (границы литологических типов, субгорионтальные трещинки на контакте с более глинистыми разностями, трещинки облегания обломков в псевдобрекчиевых известняках и др.) так и тектонической.

1. РС Хисамов, АА Губайдуллин, ВГ Базаревская, ЕА Юдинцев «Геология карбонатных сложно построенных коллекторов девона и карбона Татарстана», Казань: ФЭН, 2010

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОСТОВЕРНОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ГРАВИРАЗВЕДКИ МЕТОДОМ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

М.С. Корнилов, А.Г. Харисов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*MakSKornilov@kpfu.ru*

Решение обратных задач гравirazведки относится к некорректным и неоднозначным задачам. Одним из методов решения обратных задач гравirazведки является метод непрерывного вейвлет-преобразования.

Для оценки достоверности решения обратной задачи методом вейвлет-преобразования было построено более 90 упрощённых петроплотностных моделей с различными параметрами геологической среды. В основу моделирования положены такие данные месторождений Республики Татарстан, как глубина залегания продуктивных отложений, а также виды геологических структур.

По построенным моделям были решены прямые задачи гравirazведки. По полученным результатам были решены обратные задачи гравirazведки методом вейвлет-преобразования. Решение прямых задач осуществлялось в программе «G\_Prizm», и обратных задач в программе «Gravimagik»

Исходя из анализа полученных данных видно, что абсолютные и относительные значения ошибки определения параметров источника уменьшаются с увеличением глубины его залегания. Для оценки достоверности решения обратной задачи методом вейвлет-преобразования предлагается использование расчетного параметра  $M$ , определяемого как отношение мощности слоя к глубине его залегания. Между параметром  $M$  и отклонением определения глубины источника прослеживается логарифмическая зависимость (рисунок 1).

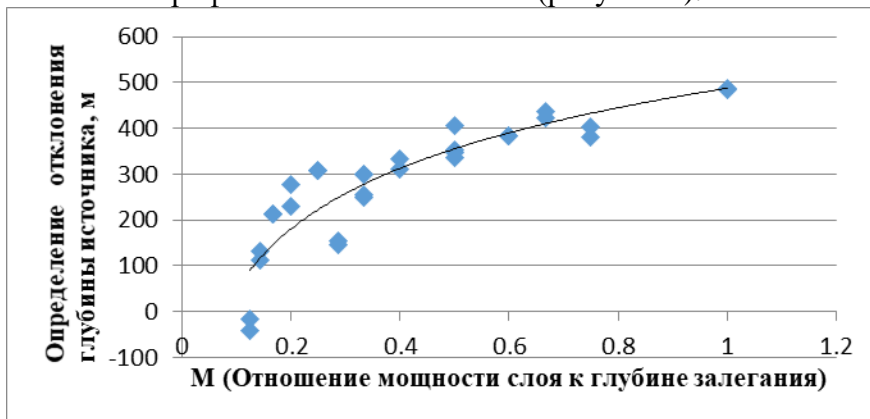


Рисунок 1 – Зависимость отклонений определения глубины источника от отношения мощности слоя к глубине залегания.

Исходя из этого можно сделать вывод, что чем меньше  $M$ , тем достовернее будет решение обратной задачи методом вейвлет-преобразования. Применение данного параметра при анализе решения обратной задачи является эффективным инструментом для корректировки данных обратной задачи гравirazведки, полученных путем вейвлет-преобразования, в особенности при отсутствии априорной геологической информации.

## ПРИМЕНЕНИЕ КОФЕИНА И ОТХОДОВ ЕГО ПРОИЗВОДСТВА В РАЗЛИЧНЫХ ПРОЦЕССАХ ИНТЕНСИФИКАЦИИ НЕФТЕГАЗОДОБЫЧИ

Л.А. Магадова, Л.Ф. Давлетшина, М.Д. Пахомов, С.А. Бородин, К.К. Мерзляков

*Научный Центр Мирового Уровня (НЦМУ) «Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты», Москва.*

*luchiad@mail.ru*

В настоящее время большая часть месторождений нефти на территории Российской Федерации находятся на поздних этапах разработки, которые характеризуются низкими дебитами. Наиболее известными технологиями по увеличению и интенсификации притока пластовых флюидов к скважине являются кислотных обработки (КО) призабойной зоны пласта (ПЗП) и гидравлический разрыв пласта (ГРП). В последнее время все более актуальным вопросом становится экологичность применяемых технологических жидкостей и наличие в них хлорорганических соединений. Целью данной исследовательской работы являлась возможность применение кофеина, как чистого вещества, или растительных отходов с его содержанием в качестве реагентов для технологических жидкостей для КО и ГРП.

Известны работы [1], где кофеин применяется в качестве ингибитора коррозии для растворов серной кислоты, где механизм адсорбции данного вещества на поверхности металла объясняется наличием атомов азота в молекуле. Данные выводы говорят о возможности ингибирования коррозии в сухокислотных составах, применяемых для кислотных обработок. Также стоит отметить, что данный механизм может быть применен для ингибирования набухания глин при проведении ГРП.

Лабораторные исследования показали, что кофеин в растворах гликолевой кислоты может снижать скорость коррозии до требуемых отраслевыми стандартами значений, как при 20°C, так и при 120°C. В растворах сульфаминовой кислоты также наблюдается значительное снижение скорости коррозии. Тестирование ингибирования глин в свободном объеме показало, что кофеин проявляет действие сопоставимое с наиболее распространёнными реагентами, которые относятся к классам хлорорганических соединений.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-15-2020-936 в рамках программы развития НЦМУ.*

1. Souza F. S., Gonçalves R. S., Spinelli A. Assessment of caffeine adsorption onto mild steel surface as an eco-friendly corrosion inhibitor //Journal of the Brazilian Chemical Society. – 2014. – Т. 25. – №. 1. – С. 81-90

## ИХНОФАЦИАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ И РЕКОНСТРУКЦИЯ ОБСТАНОВОК ОСАДКОНАКОПЛЕНИЯ ОТЛОЖЕНИЙ ПАШИЙСКОГО И ТИМАНСКОГО ГОРИЗОНТОВ ДЕВОНА ЮЖНО-ТАТАРСКОГО СВОДА

Д.Н. Мифтахутдинова, В.В. Силантьев

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*Dinara.Miftakhutdinova@kpfu.ru*

Изучен керн 12 скважин, пробуренных в пределах Южно-Татарского свода (ЮТС). Изучение ихнологических признаков сопровождалось фиксацией литологических особенностей, степени биотурбации, состава фауны и флоры.

Девонский терригенный комплекс ЮТС характеризуется отчетливой ритмичностью, обусловленной развитием морской трансгрессии в живете – фране [1,2]. Согласно схеме, приведенной Межведомственным стратиграфическим комитетом 2008 г. [3] основание франского яруса совпадает с подошвой верхнетиманского подгоризонта. Авторы вслед за Н.К. Фортунатовой и др. [2] принимают границу живета и франа в основании тиманского горизонта, которое условно сопоставляется с началом морского трансгрессивного цикла.

Тиманский (кыновский) горизонт ЮТС представлен карбонатно-глинистым разрезом. Традиционно тиманские отложения начинаются с репера «верхний известняк», согласно залегающим на пашийских отложениях; выше следует пачка аргиллитов, включающая прослой алевролитов и песчаников. Пашийский горизонт представлен только терригенными породами: песчаниками, алевролитами и аргиллитами.

Породы тиманского горизонта характеризуются разнообразными ихнофоссилиями и высокой степенью биотурбации – перемешиванием осадка живущими в нем организмами, в результате чего первичная слоистость породы нарушается и формируется новая, биотурбационная, текстура. Степень биотурбации тиманских пород варьирует от 60 до 100%. Наиболее разнообразны ихнофоссилии в тонкопереслаивающихся аргиллитах и песчаниках, где представлены ходами ихнофагии *Skolithos*. В морских песчаниках встречены вертикальные спиральные норы *Spirophyton* (элемент ихнофагии *Zoophycos*).

Ихнофагия *Skolithos* приурочена к морским прибрежным обстановкам, расположенным в зоне сильного волнового воздействия с высоким уровнем энергии волнения и течения. Ихнофагия *Zoophycos* приурочена к морским относительно глубоководным условиям, расположенным далеко от береговой линии ниже уровня штормового воздействия.

Пашийские отложения представлены двумя типами разреза – мелководным и глубоководным. В мелководных отложениях биотурбация наблюдается редко, преимущественно в интервалах переслаивания песчаных и глинистых пород. Глубоководные отложения часто сильно биотурбированы. Установлено прямое влияние биотурбации на нефтенасыщение песчаных коллекторов: в биотурбированных песчаниках нефтенасыщения не наблюдается.

1. Данилова Т.Е. Терригенные породы девона и нижнего карбона. М-во экологии и природных ресурсов Респ. Татарстан, Акад. наук Респ. Татарстан. - Казань : Плутон, 2008. С.18.
2. Фортунатова Н.К., Зайцева Е.Л., Карцева О.А. Строение девонского терригенного комплекса и положение границы среднего и верхнего девона на западе Татарстана // Бюлл. МОИП. Отд. геол. 2013. Т. 88. № 2. С. 22–49.
3. Состояние изученности стратиграфии докембрия и фанерозоя России. Задачи дальнейших исследований. Постановления Межведомственного стратиграфического комитета и его постоянных комиссий. Вып. 38. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ, 2008. 131 с.



## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ЗЕМНОЙ КОРЫ ВОЛГО-УРАЛЬСКОГО СУБКРАТОНА НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ И ОБРАТНОЙ ЗАДАЧ ГРАВИРАЗВЕДКИ

И.Н. Огнев<sup>a</sup>, Й. Эббинг<sup>b</sup>, П. Хаас<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>b</sup> *Кильский университет имени Кристиана Альбрехта, г. Киль, Германия.*

*IgNOgnev@kpfu.ru*

В данной работе мы представляем новую модель земной коры Волго-Уральского субкратона. Создание модели выполнялось в 2 этапа: (1) решение обратной задачи гравirazведки с предварительной оценкой глубины Мохо, за которым следовало (2) детальное моделирование земной коры в процессе решения прямой задачи гравirazведки.

В соответствии с итоговой моделью, мощность земной коры на территории Волго-Уралии изменяется от менее 32 до более чем 55 км в некоторых регионах. Наименее мощная кора с мощностью менее 32 км находится в области Прикаспийской впадины. Относительно маломощная земная кора была также определена вдоль Центрально-Русской рифтовой системы и Предуральского краевого прогиба. Сравнительно мощные участки земной коры находятся в пределах Уральской горно-складчатой системы и центральной части Волго-Уральского субкратона, где мощность земной коры превышает 50 км. В процессе моделирования, в центральной части Волго-Уральского субкратона было обнаружено расхождение измеренной и рассчитанной аномалий гравитационного поля в редукции Буге, достигающее 95 мГал. Такое расхождение было интерпретировано и смоделировано как высокоплотный материал в основании нижней коры, который мог являться результатом произошедшего ранее андерплейтинга, подтверждая гипотезу Артемьевой и Тибо [1].

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-15-2020-931 в рамках программы развития НЦМУ «Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты».*

1. Thybo, N., and Artemieva, I. M. Moho and magmatic underplating in continentallithosphere. *Tectonophysics*, 2013. - **609**, 605–619. doi:10.1016/j.tecto.2013.05.032.

## ПОСТРОЕНИЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ МОДЕЛЕЙ ЦИФРОВОГО КЕРНА ДЛЯ СЛОЖНОПОСТРОЕННЫХ КОЛЛЕКТОРОВ

Д.М. Орлов

*Сколковский институт науки и технологий, Москва.*

*D.Orlov@skoltech.ru*

Технологии цифрового ядра (ЦК) появились относительно недавно как альтернатива обычным лабораторным ядровым исследованиям и являются сегодня стандартным инструментом характеристики пластовых систем. Использование ЦК для расчета течений ограничивается высокопроницаемыми коллекторами относительно простого строения (хорошо отсортированные песчаники с распределением пор по размеру в микронном диапазоне) [1]. Применение ЦК для коллекторов более сложного строения требует учета в единой модели разномасштабного порового пространства и различного минерального состава поверхности пор при сохранении ее достаточно большого физического размера (1-10 мм).

Новый подход, разработанный в Сколтехе, объединяет в единой мультиклассовой модели информацию о структуре порового пространства из различных источников данных: микрокомпьютерной томографии (разрешение – 1-10 мкм), сканирующей электронной микроскопии (разрешение – 10-40 нм) и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (разрешение – 1-2 мкм). Финальная трехмерная цифровая модель имеет размеры, сопоставимые с размерами стандартного образца ядра, включает 100 классов пористости для учета эффектов субмикронного масштаба и от 3 до 6 классов минералов для учета различной смачиваемости поверхности пор при расчете многофазного течения.

Для моделирования многофазных течений на мультиклассовых моделях решается уравнение Навье-Стокса-Бринкмана на воксельных сетках, которое эффективно применяется при расчете течений в комплексных средах, содержащих и открытое пространство, и пористые структуры.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-10-2020-119 в рамках программы развития НЦМУ.*

1. Orlov, Denis, et al. "Different methods of permeability calculation in digital twins of tight sandstones." Journal of Natural Gas Science and Engineering 87 (2021): 103750.

## ИССЛЕДОВАНИЕ НЕФТИ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

И.З. Рахматуллин, С.В. Ефимов, В.В. Клочков

*Институт физики КФУ, Казань.*

*ilfat89rakhmatullin@gmail.com*

В последние годы растет интерес к использованию ЯМР-спектроскопии для исследования различных объектов нефтехимии. В случае нефти и нефтепродуктов, содержащих обычно сотни соединений, в основном углеводородов, важной особенностью ЯМР-спектроскопии высокого разрешения является строгая корреляция интегральных интенсивностей отдельных групп сигналов в определенных диапазонах химических сдвигов в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  с содержанием соответствующих молекулярных фрагментов [1]. Современная ЯМР-спектроскопия высокого разрешения основана не только на повышенной чувствительности и разрешающей способности, но и на двумерных методах, дающих дополнительную информацию о составе исследуемых образцов.

Спектроскопия ЯМР  $^1\text{H}$  - относительно быстрый метод, не требующий сложной пробоподготовки. Доступный спектральный диапазон протонных резонансов невелик, поэтому прямое сравнение спектров  $^1\text{H}$  дает мало информации. Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  сырой нефти содержат большое количество сигналов, отражающих их химическую сложность.

Спектры ЯМР  $^{13}\text{C}$  содержат множество различимых сигналов, которые могут быть отнесены к разным типичным областям и, таким образом, дают информацию о долях ароматических, первичных ( $\text{CH}_3$ ), вторичных ( $\text{CH}_2$ ) и третичных ( $\text{CH}$ ) типов атомов углерода. Комбинация спектров ЯМР высокого разрешения  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  также позволяет оценить среднюю длину и разветвленность алифатических цепей [2,3].

ЯМР-спектроскопия может быть быстрым методом (занимающим несколько минут экспериментального времени и обработки, если мы ограничиваемся спектроскопией  $^1\text{H}$ ) для получения базовой информации о химическом составе сырой нефти и продуктов нефтепереработки. Легко обнаруживается присутствие олефинов, воды и количества ароматических соединений. Более подробная информация требует измерения спектров  $^{13}\text{C}$  и использования различных предположений о химическом составе. Поэтому разработка технологий распознавания нефтепродуктов должна основываться на статистическом анализе, а не на простом интегрировании спектральных полос. По данным ЯМР  $^{13}\text{C}$  масел различного происхождения, вязкости и обработки, можно сделать следующие выводы: снижение концентрации третичных углеродных групп наблюдается в образцах нефтей, не подвергавшихся термической обработке; при переходе от легкой нефти к тяжелой наблюдается уменьшение концентрации первичных и увеличение концентрации ароматических углеродов. Эти характеристики определяют как свойства объектов, так и стратегию различных технологических схем обогащения нефти или извлечения различных фракций и групп. Методы ЯМР-спектроскопии позволяют легко установить количественное присутствие основных углеводородных компонентов в любой фракции нефти. ЯМР также может быть полезен для быстрого прогнозирования изменения свойств сырой нефти при различных типах обработки, включая термические методы для увеличения нефтеотдачи [4]. Кроме того, количественные соотношения функциональных групп, полученные с помощью ЯМР, могут быть одним из критериев для разработки метода «отпечатков пальцев».

1. I.Z. Rakhmatullin, S.V. Efimov, B.Y. Margulis, V.V. Klochkov. *J. Petrol. Sci. Eng.*, 2017, **156**, 12-18.
2. I.Z. Rakhmatullin, S.V. Efimov, V.A. Tyurin, A.A. Al-Muntaser, A.E. Klimovitskii, M.A. Varfolomeev, V.V. Klochkov, *J. Petrol. Sci. Eng.*, 2018, **168**, 256-262.
3. I.Z. Rakhmatullin, S.V. Efimov, V.A. Tyurin, M.R. Gafurov, A.A. Al-Muntaser, M.A. Varfolomeev,

V.V. Klochkov, *Processes*, 2020, **8**, 995.

4. A.A. Al-Muntaser, M.A. Varfolomeev, M.A. Suwaid, C. Yuan, A.E. Chemodanov, D.A. Feoktistov, I.Z. Rakhmatullin, M. Abbas, E. Dominguez-Alvarez, A.A. Akhmediyarov, V.V. Klochkov, M.I. Amerkhanov, *J. Petrol. Sci. Eng.*, 2020, **184**, 106592.

## ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИИ ДАННЫХ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН И КАРБОНАТНЫХ ФАЦИЙ ВЫДЕЛЕННЫХ НА КЕРНОВОМ МАТЕРИАЛЕ

Э.А. Сабитов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казанью*

*emilsabitovkzn@gmail.com*

Выделение карбонатных фаций возможно только по результатам исследования кернового материала, однако отбор полноразмерного керна либо очень дорог, либо практически не осуществим. С целью оптимизации данного процесса было предложено использовать нейронную сеть для выделения карбонатных фаций на основе каротажных данных [1].

Исследования проводились с применением инструментов платформы Petrel-2018. Используемая модель включала в себя 30 скважин, в которых производился отбор полноразмерного керна в карбонатных отложениях турнейского яруса. При макроописании керна выделение карбонатных фаций основывалось на классификации Данхэма. Обучение нейронной сети проводилось на основе методов ГИС: плотностного каротажа, акустического каротажа, ядерно-магнитного каротажа в поле земли, нейтронного каротажа и каротажа сопротивления. В процессе изучения изменялось количество скважин, используемых для обучения. В результате применения нейронной сети были выделены фации карбонатных отложений только в 21/30 случаях. Причем, в 17 случаях данные макроописания совпали с данными нейросети, в 4 случаях нейронная сеть расчленила карбонатные отложения с неудовлетворительной точностью. В остальных 7 скважинах, данные получены при макроописании кернового материала и данные нейросети не совпали.

Таким образом, успешность применения нейронной сети по выделению литологии можно оценить только субъективно. Из 30 скважин в 21 (73%) результаты макроописания и нейронной сети совпадают удовлетворительно. В 7 скважинах интерпретация выполнена безуспешно. Следовательно, применение нейронных сетей при интерпретации данных ГИС, а именно выделения карбонатных фаций возможно, но для лучшего результата необходим большой набор входных данных при обучении нейронной сети, а это дорогостоящая работа.

1. Паклин Н.Б., Мухамадиев Р.С. Использование обучающихся алгоритмов для интерпретации данных ГИС. — М.: Бурение и нефть, 2005. — № 5. — С. 12-16.
2. К. Макфи, Дж. Рид, И. Зубизаретта. Лабораторные исследования керна: гид по лучшим практикам. — Издательство «ИКИ» 2018. 924 с.
3. Dunham R.J. Classification of carbonate rocks according to depositional texture / R.J.Dunham // Classification of carbonate rocks: Simp. Amer. Assoc. Petrol. Geol. Mem. – Ed. W.E.Ham, 1962. – V.1 – P. 108-121.

## СОПОСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ ГАММА КАРОТАЖА И ГАММА СПЕКТРОМЕТРИИ КЕРНА НА ПРИМЕРЕ ОДНОГО ИЗ МЕСТОРОЖДЕНИЙ РТ

Э.А. Сабитов, Ф.Н. Гараев

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*emilsabitovkzn@gmail.com, fagim.n.garayev@gmail.com*

В данной работе рассматривается одно из месторождений юго-востока Татарстана.

Целью работы является увязка глубин отбора кернового материала на основе сопоставления данных скважинного ГК и интегральной составляющей гамма-каротажа по вынесенному керну.

Принцип гамма-каротажа (ГК) основан на регистрации прибором естественной радиоактивности горных пород, слагающих разрез скважины. Радиоактивность пород обусловлена содержанием в них таких элементов, как уран (U), торий (Th) и продукты их распада, а также изотопа калия  $^{40}\text{K}$ . [2]

Максимальной радиоактивностью в осадочных породах обладают глины, минимальной – чистые карбонатные разности и песчаники. [3]

Замеры плотности вдоль оси полноразмерного керна возможно получить с помощью радиометрических исследований. В аппаратуре для данного исследования кернового материала располагается кристалл цезия ( $\text{Cs}^{137}$ ).  $\text{Cs}^{137}$  претерпевает бета-распад с промежуточным образованием ядерного изотопа бария-137, который в свою очередь переходит в основное состояние с испусканием гамма-кванта. Показания метода определяются комптоновским рассеянием и зависят только от плотности среды, взаимодействующей с гамма-квантами. Чем больше плотность, тем меньше показания метода. [3]

Для определения содержания естественных радиоактивных элементов (ЕРЭ), а также плотности горной породы используется установка спектрометра-радиометра гамма-излучений «КРАТОР». Скорость перемещения керна при проведении исследования составляла 25 мм в минуту.

В ходе работы проведен расчет ФЕС в лабораторных условиях, измерено распределение концентраций естественных радиоактивных элементов и плотности вдоль оси керна, а также увязка результатов с данными ГИС. Произведен анализ зависимостей ФЕС в интервалах, где отбор кернового материала не производился.

В итоге были получены результирующие планшеты с петрофизическими моделями и были определены петрофизические зависимости.

Проведение данного комплекса исследований по полноразмерному керну дает возможность привязать полноразмерный керн к разрезу, а также выявить неоднородность распределения фильтрационно-емкостных свойств по длине отобранного керна с целью более представительного отбора образцов для стандартного комплекса петрофизических исследований.

1. Добрынин В.М., Вендельштейн Б.Ю, Резванов Р.А., Африкян А.Н. Промысловая геофизика: Учеб. для вузов / под ред. В.М. Добрынина, Н.Е. Лазуткиной // М.: ФГУП Издательство «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина. – 2004. – 400 с.

2. Мартынов В. Г. и др. Геофизическое исследование скважин: справочник мастера по промысловой геофизике / под ред. В.Г. Мартынова, Н.Е. Лазуткиной, М.С. Хохловой // М.: Инфра-Инженерия. – 2009. – 960 с.

## УТОЧНЕНИЕ ПЕТРОФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ВЕРЕЙСКИХ ОТЛОЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ИССЛЕДОВАНИЙ КЕРНА

Э.А. Сабитов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*emilsabitovkzn@gmail.com*

При интерпретации геофизические исследования скважин, а именно расчета пористости по данным плотностно каротажа и акустического каротажа, применяют справочные данные плотности скелете и интервального времени продольной волны в скелете исследуемых отложений. С целью уточнения расчета  $K_p$  по методам ГИС, были получены петрофизические зависимости по данным исследования кернового материала [1].

Исследования проводились на платформе Techlog-2018. Интерпретация производилась по 10 скважина месторождения Юго-Востока Республики Татарстан. Исходные данные включали себя расширенный комплекс ГИС, произведенный в данных скважинах, полноразмерный керн, отобранный из 7 скважин по отложениям верейского горизонта. Петрофизические зависимости включали в себя соотношения «коэффициент открытой пористости– плотность» и «коэффициент открытой пористости – интервальное время продольной волны», замеры скорости продольной волны, пористость и плотность. Измерения производились на стандартных керновых образцах при атмосферных условиях. После получения искомым коэффициентов был рассчитан коэффициент открытой пористости по плотностному каротажу и акустическому каротажу в известняках верейского горизонта. Для подтверждения достоверности выполненной интерпретации произведено сопоставление « $K_p$  керн-  $K_p$  ГИС», получена линейную зависимость для плотностного каротажа  $R^2 = 0.82$ , а для акустического каротажа  $R^2 = 0.85$ .

Таким образом, получилось уточнить петрофизическую интерпретацию данных ГИС, основываясь на исследования кернового материала. Полученные зависимости позволят без отбора керна.

1. Методические рекомендации по подсчету геологических запасов нефти и газа объемным методом. Под ред. В.И. Петерсилье, В.И. Проскурина, Г.Г. Яценко. - Москва-Тверь: ВНИГНИ, НПЦ «Тверьгеофизика», 2003.
2. К. Макфи, Дж. Рид, И. Зубизаретта. Лабораторные исследования керна: гид по лучшим практикам. – Издательство «ИКИ»2018. 924 с.
3. ГОСТ 21153.0-75. Породы горные. Отбор проб и общие требования к методам физических испытаний.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЖИДКОСТИ ДЛЯ ГИДРАВЛИЧЕСКОГО РАЗРЫВА ПЛАСТА НА ОСНОВЕ ДИМЕРНОГО ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА

Л.А. Магадова, П.К. Крисанова, С.А. Бородин, А.А. Филатов, Д.А. Крюков

*Научный Центр Мирового Уровня (НЦМУ) «Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты», Москва.*

*filatovandrew104@gmail.com*

В настоящее время в качестве водных жидкостей для гидравлического разрыва пласта (ГРП) наиболее часто используют системы на основе гуара, которые обладают рядом недостатков. Помимо многокомпонентного состава, такие жидкости приводят к ухудшению фильтрационных свойств коллекторов, за счет коагуляции порового пространства пласта и образованных трещин остатками полимерного геля [1]. Исходя из этих факторов, очевидна актуальность исследование систем для ГРП, не обладающих подобными недостатками. Такими композициями могут выступать составы на основе димерных поверхностно-активных веществ (ПАВ). В работе проведено исследование жидкости для ГРП на основе бесхлорного ПАВ димерного строения. Определялись реологические параметры составов на реометре Grace M5600 Rheometer при комнатной температуре. Песконесущая способность составов оценивалась по уровню осаждения пропанта в цилиндре от времени. При сравнительно низких значениях вязкости составы обладают необходимой способностью удерживать пропант. Воздействие исследуемых композиций на глины оценивалось с помощью приборов Жигача-Ярова. По полученным результатам сделан вывод, что ПАВ из данных композиций способен адсорбироваться на глинах, препятствуя их набуханию. Исследуемые составы подвергаются деструкции при контакте с углеводородами, что выявлено при смешении составов с нефтью при различном соотношении, следовательно, данные композиции не нуждаются в использовании деструктора.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-15-2020-936 в рамках программы развития НЦМУ.*

1. Sullivan P.F. et al. Optimization of a Viscoelastic Surfactant (VES) fracturing fluid for application in high-permeability formations//Proc. - SPE Int. Symp. Form. Damage Control. 2006. Vol. 2006. P. 753–760.



## АМПЛИТУДНЫЕ И ФАЗОВЫЕ АНОМАЛИИ ПРИЛИВНЫХ ВАРИАЦИЙ СИЛЫ ТЯЖЕСТИ

А.Г. Харисов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*Ayrat.Kharisov@kpfu.ru*

Одним из типов гравитационных аномалий, которые могут наблюдаться над нефтегазоносными залежами и которые могут быть использованы для оценки перспективности, являются аномалии вариаций силы тяжести, вызванные твердотельными лунно-солнечными приливами. Для оценки величины вариаций используется статическая теория, которая была предложена Ньютоном [1, 2]. Для расчёта приливных вариаций силы тяжести как правило используется модель твёрдой Земли:

$$Z = 3G \frac{m}{s^3} R \left( \cos^2 \psi - \frac{1}{3} \right) \quad (1)$$

где  $s$  – среднее расстояние от центра Земли до центра светила (Луны или Солнца),  $m$  – масса светила,  $\psi$  – зенитное расстояние,  $R$  – радиус Земли,  $G$  – гравитационная постоянная.

Можно выделить два типа аномалий приливных вариаций силы тяжести:

1) Отдельные блоки могут не только подниматься и опускаться под воздействием приливных сил, но и совершать микродвижения относительно своего центра масс. Это приводит к появлению фазовых временных задержек приливных аномалий силы тяжести. Фазовые задержки  $\tau$  можно вычислить по максимумам графиков взаимно корреляционной функции:

$$\tau = \arg \sup \left[ \sum_i Z_{л+с}^{теор}(t_i) Z_{набл}(t_i + \tau) \right] \quad (2)$$

где  $Z_{л+с}^{теор}(t_i)$  – теоретически рассчитанное значение прилива в момент времени  $t_i$ ;

$Z_{набл}(t_i + \tau)$  – фактически наблюдаемое значение поля в момент времени  $t_i + \tau$ ;

2) Второй тип аномалий приливных вариаций силы тяжести проявляется в амплитудных аномалиях приливной волны. Амплитуда приливного сигнала напрямую зависит от чисел Лява, которые характеризуют реологические свойства пород, слагающих земную кору и верхнюю мантию непосредственно в районе пункта наблюдения. В этом случае разные блоки земной коры могут проявлять разный отклик на приливные силы. Амплитудный коэффициент  $a$  может быть определён с помощью метода наименьших квадратов по формуле

$$a = \frac{\sum Z_i^{теор} \sum Z_i^{набл} - n \sum Z_i^{теор} Z_i^{набл}}{n \sum (Z_i^{набл})^2 - (\sum Z_i^{набл})^2} \quad (3)$$

где  $Z_i^{теор}$  – теоретически рассчитанное значение прилива в момент времени  $t_i$ ;

$Z_i^{набл}$  – фактически наблюдаемое значение поля в момент времени  $t_i$ .

1. М. Клайн. Математика. Поиск истины. М.: Мир, 1988. – С.295.

2. I.M. Longman. Formulas for Computing the Tidal Acceleration Due to the Moon and the Sun. *J. Geophys. Res.*, 1959. –V. 64, №12. – P. 2351–2355.

**ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ МИГРАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И ГЕОЛОГО-ПРОМЫСЛОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕСТОРОЖДЕНИЯ НА ГЕОХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ДОБЫВАЕМОЙ НЕФТИ НА ПРИМЕРЕ РОМАШКИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН**

А.Е. Чемоданов

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань*

*Chemodanov41659@mail.ru*

Ромашкинское месторождение республики Татарстан является одним из самых крупных в России и разрабатывается с середины 50-х годов прошлого столетия, хотя и по сегодняшний день общая добыча углеводородов остается существенной [1]. Однако геохимические особенности состава нефти даже в пределах одного месторождения или даже одной площади может существенно отличаться от скважины к скважине. Такие различия могут быть обусловлены не только геологическими особенностями формирования залежи (например, процессами миграции углеводородов или их микробиологического разрушения), но и самим процессом добычи – объемом закачиваемой воды, применением технологии ГРП и др. [2,3] В настоящей работе проведены комплексные геохимические исследования нефти на исследуемой площади. Методами ГХМС-анализа, группового фракционного анализа изучены образцы нефти, добытые из действующих скважин Ромашкинского месторождения республики Татарстан, характеризующиеся различными геолого-промысловыми характеристиками. Автором сопоставлен геохимический состав нефти с этими данными, а также оценены вероятные площади скопления нефти и потенциальные варианты притоков нефти, что позволяет добиться увеличения дебита скважин.

1. Р.С. Хисамов, Р.Р. Ибатуллин. Георесурсы, 5(47), 2012
2. В.О. Екпо, N. Essien, P.A. Neji, R.O. Etsenake. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2018, 160, P. 452-464
3. Bennett, B., Larter, S.R. Organic Geochemistry, 2018, 125, P. 243–259

## ЭКСПРЕСС-МЕТОД ОЦЕНКИ КОЛИЧЕСТВА И СОСТАВА ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА В ГОРНЫХ ПОРОДАХ НИЗКОЧАСТОТНОЙ ЯМР РЕЛАКСАЦИЕЙ

И.Н. Шаманов, Р.И. Галеев

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*insafsh77@gmail.com, ranel.galeev@mail.ru*

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) – мощный физический эффект, широко используемый в различных областях научных исследований для изучения состава и структуры веществ, а также его состояния. За последние десятилетия этот метод нашел широкое распространение в нефтегазовой отрасли. Определение содержания и состава органического вещества в породе, изучение его распространения, моделирование миграции и накопления дает информацию нефтегазодобывающим компаниям для построения плана разработки месторождений. Определение группового состава органического вещества (SARA) является основополагающим при моделировании процессов, влияющих на повышение нефтеотдачи пластов (полимерное заводнение, химические воздействия на пласты, применение ПАВ).

В этой работе был разработан новый метод низкочастотной ядерного магнитного резонанса (ЯМР) релаксации, основанный на комбинации измерений распада свободной индукции (FID) и модифицированных измерений Карра-Перселла-Мейлбума-Гилла (CPMG) [1]. Способ позволяет определить содержание и групповой состав углеводородов (фракций SARA) в горной породе [2]. Этот метод был использован для исследования 15 образцов горных пород, отобранных из продуктивного пласта, расположенного на глубине 601–708 м ствола скважины нефтяного месторождения Республики Куба. Амплитуды и времена релаксации были определены с использованием функций Войта и экспоненциальной модели для компонентов жидкой фазы, функций Абрахама и экспоненциальной модели для компонентов твердой фазы. Значения содержания битума в образцах были получены методом ЯМР, ТГА и пиролиза по методу Rock-Eval. Была показана высокая корреляция результатов ЯМР с TGA и пиролизом Rock-eval ( $R^2 \geq 0,90$ ).

Наконец, предложенный метод ЯМР был применен для определения фракций SARA экстрагируемого битума в образцах. Для оценки точности определения фракций SARA методом ЯМР был проведен анализ SARA экстрактов из образцов Кубинского месторождения в соответствии с ASTM D4124-09. Результаты анализа SARA, полученные в соответствии с ASTM D4124-09 и методом ЯМР, имеют аналогичные значения. С помощью микро-КТ и FIB-SEM было установлено, что после экстракции часть битума остается в порах, что искажает результаты анализа SARA в соответствии с ASTM D4124-09.

1. V. Volkov, A. Al-Muntaser, M. Varfolomeev, N. Khasanova, B. Sakharov, M. Suwaid, R. Djimasbe, R. Galeev, D. Nurgaliev (2021). Low-field NMR-relaxometry as fast and simple technique for in-situ determination of SARA-composition of crude oils. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 196, 107990.
2. K. Yang, P. Connolly, M. Li, S. Seltzer, D. McCarty, M. Mahmoud, A. El-Husseiny, E. May, M. Johns (2020). Shale rock core analysis using NMR: Effect of bitumen and water content. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 195, 107847.

## ИЗУЧЕНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТАВА МАСЛЯНЫХ ФРАКЦИЙ МЕСТОРОЖДЕНИЙ УГЛЕВОДОРОДОВ

М.С. Шипаева<sup>а</sup>, В.А. Судаков<sup>а</sup>, А.А. Шакиров<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *ООО «Геоиндикатор».*

*mariasipaeva@gmail.com*

В последнее время всё шире обсуждается использование геохимических особенностей нефтей с целью установления подпитки гигантских месторождений углеводородов и с целью установления отличий между пластами, так как гигантские месторождения являются часто многопластовыми.

Цель настоящей работы – сравнительная характеристика нефтей с различных месторождений и пластов на обширной площади исследования. Образцы были охарактеризованы методом хроматомасспектрометрии (ГХ-МС). Методы ГХ-МС широко используются в органической геохимии нефти. Экстракты из различных геологических образцов (нефть, уголь, нефтематеринская порода, сланец) представляют собой сложные смеси органических соединений, которые являются биомаркерами. Эти соединения могут дать информацию о происхождении нефти и угля и условиях отложения пород, так как биомаркеры это углеводороды, сохранившие углеродный скелет находящихся на большой глубине древних организмов, претерпевших физико-химические превращения [1]. Биомаркерами являются изопреноиды, тритерпаны, стераны, порфирины и другие соединения [2]. В работе проведено исследование нефтей порядка 25 образцов, захватывающих территории Республики Татарстан, Самарской и Оренбургской области. Проведена корреляция нефть-нефть и сравнительный анализ полученных образцов.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по соглашению № 075-15-2020-931 в рамках программы развития НЦМУ «Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты».*

1. Гладилович В.Д. Возможности применения метода ГХ-МС (Обзор) // Научное приборостроение. 2010. Т. 20, № 4. С.36-49.
2. Peters K.E., Moldowan J.M. The biomarker guide. NJ: Prentice-Hall, 1993. 363 p.

**СЕКЦИЯ 6 СОВРЕМЕННЫЕ ИТ-  
ТЕХНОЛОГИИ, РОБОТОТЕХНИКА И  
ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ  
СИСТЕМЫ 21 ВЕКА**

## ЦИФРОВАЯ ОБРАБОТКА ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ ШЛИФОВ

Р.Ф. Ахметов<sup>а</sup>, В.П. Морозов<sup>а</sup>, Т.А. Муртазин<sup>а</sup>, В.А. Судаков<sup>а</sup>, З.Д. Каюмов<sup>б</sup>, Д.Н. Тумаков<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань.*

*axmetov19999@mail.ru*

Актуальность. Одним из важнейших полезных ископаемых современности считается нефть. При бурении нефтяных скважин извлекается керн, из образцов которого изготавливаются шлифы. Производится их анализ и построение модели геологического строения месторождений. В настоящее время сегментация изображений изготовленных шлифов пород-коллекторов обычно выполняется вручную, что требует значительных временных затрат, при этом результаты анализа в большей степени зависят от квалификации специалиста.

Целью данного исследования является разработка автоматизированной методики анализа изображений петрографических шлифов. В частности, определение участков порового пространства, определение границ и основных параметров минеральных зерен (сегментация и гранулометрический анализ).

В качестве объектов исследований использовались образцы (шлифы) терригенных пород пашийского горизонта верхнего девона Волго-Уральской нефтегазоносной провинции, а именно – керн скважин, территориально приуроченных к Южно-Татарскому своду. В работе использованы следующие выделенные литотипы: I – кварцевые песчаники мелкозернистые; II – алевролиты крупнозернистые; III – алевролиты среднезернистые.

Для достижения поставленной цели в данной работе были определены задачи работы: 1) изучение керна; 2) отбор представительных образцов; 3) изготовление петрографических шлифов; 4) микроскопическое изучение петрографических шлифов; 6) фотографирование представительных участков шлифов при одном и двух николях; 7) обработка изображений, посредством наложения изображений в поляризованном свете при различных углах; 8) ручная разметка изображений шлифов в программе Microscopy Image Browser; 9) создание архитектуры нейронной сети, подбор гиперпараметров; 10) процесс обучения модели нейронной сети; 11) проведение гранулометрического анализа и определение значения пористости.

Методика работы. Исследования минеральной компоненты пород проводились посредством микроскопии с дальнейшей ручной разметкой зерен минералов в программе Microscopy Image Browser. Создание архитектуры нейронной сети, подбор гиперпараметров. Процесс обучения нейронной сети – модель учится воспроизводить разметку, которую ранее сделал эксперт. Классифицируется каждый пиксель исходных изображений на классы - фон, граница и типы минеральных зерен. В итоге, зная геометрию зерен и их "минеральную" принадлежность, можно провести гранулометрический анализ. Значение пористости на изображениях шлифов определяется как отношение общей площади изображения на площадь темных (почти черных) областей анализируемой области шлифа.

Результатом исследования является сравнение значений пористости, гранулометрического анализа и разметки минералов на изображении участка шлифа нейронной сети и эксперта.

## СИСТЕМА РАСПРЕДЕЛЕННОГО СИНХРОННОГО СБОРА ДАННЫХ

А.Д. Баранов, Р.Р. Латыпов, Ю.В. Давыдов, М.М. Чупин, Р.Ф. Бабаев

*Институт физики, КФУ, Казань.*

*a.baranov97@gmail.com*

Работа описывает комплекс, реализующий синхронный сбор данных с геофизического оборудования. Он включает в себя множество блоков, каждый из которых состоит из блока сбора данных и блока микрокоммутатора. Взаимодействие между блоками осуществляется при помощи протокола UDP по витой паре категории 5 EIA-568. По каналу передачи данных осуществляется питание системы +48 В и передача тактирующих сигналов частотой 1 кГц. Комплекс состоит из восьми последовательных блоков.

Целью работы является создание проводной системы синхронного сбора данных наземных датчиков Вертикального Сейсмического Профиля.

Разработан комплекс синхронного сбора данных. Блок сбора данных позволяет регулировать усиление и затухание аналогового сигнала с датчиков вибрации, оцифровывать полученные сигналы, используя 24-битное АЦП. Блок микрокоммутатора обеспечивает последовательную передачу данных без коллизий в сторону управляющего процессора. Для идентификации узлов сети, настройки затухания сигналов датчиков и сохранения данных АЦП создана программа, содержащая графический интерфейс.

Для подключения источника воздействия на основе платы блока микрокоммутатора создан блок модуля синхронизации. Комплекс может быть использован для исследования верхних слоёв земной коры с целью обнаружения природных ресурсов. Проведены успешные лабораторные испытания системы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение от 26.11.2019 г. № 075-11-2019-038 «Разработка многофункционального аппаратно-программного комплекса на основе беспилотных воздушных судов для планирования и сопровождения сейсморазведочных работ»).*

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

## КОМПЬЮТЕРНОЕ И НАТУРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КУЛАЧКОВОЙ ШАГАЮЩЕЙ МАШИНЫ

А.А. Васильева<sup>a</sup>, С.А. Николаев<sup>b</sup>

<sup>a</sup> МБОУ «Гимназия №5», город. Королёв, Московская область;

<sup>b</sup> ГБПОУ СПТ им. Б.Г.Музрукова, город Саров, Нижегородская область.

*nastena.wasilyewa@gmail.com*

Интерес к шагающим машинам возрастает. Это связано с освоением новых северных областей. Тем не менее, в настоящее время почти нет шагающего транспорта, даже отдельные опытные образцы не разработаны. Это связано с тем, что предложенный способ шагающего перемещения и разработанная в конце 19-го века машина русского инженера и учёного Пафнутия Львовича Чебышева остаются единственным техническим предложением в этой области [1]. Недостатком шагающей машины П.Л.Чебышева является верхнее расположение рабочих опорных точек в четырёх механизмах. Русский учёный сместил рабочую траекторию вниз с помощью вертикальных рычагов-опор. Как ещё можно сместить шагающую траекторию ниже корпуса транспортного средства? Цель работы заключается в смещении рабочей траектории опорной точки шагающего механизма вниз относительно корпуса. Перевернуть механизм нельзя. Предлагается не дополнять кинематическую схему новыми механизмами, а напротив, уменьшить линейный размер шатуна, но выполнить это звено в виде кулачкового механизма с опорой на поверхность земли [2]. Форму кулачка-опоры можно подобрать очень просто – это часть круга с центром в рабочей точке шатуна механизма П.Л.Чебышева. Так как центр круга-шатуна двигается по прямолинейному отрезку, то рабочая опорная точка нижней части этого кулачка тоже будет двигаться прямолинейно. Незначительное скольжение является недостатком предлагаемого механизма, но зато значительно упрощает кинематическую схему. Созданы действующий макет предлагаемого механизма, работающая машина и компьютерная 3D модель в программе КОМПАС-3D.

1. Артоболовский И.И., Левитский Н.И. Механизмы П.Л.Чебышева / Научное наследие П.Л.Чебышева. Вып. II. Теория механизмов. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
2. Васильева А.А. Кулачковая опора для шагохода. <https://youtu.be/sEm65463HaU>



## ШАГАЮЩАЯ МАШИНА С ОПОРНЫМИ ПЛАСТИНАМИ

А.А. Васильева, А.И. Драцкая

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*nastena.wasilyewa@gmail.com*

Модель новой шагающей машины была изучена и создана на основе имеющегося опыта сборки восьми предыдущих аналогов в школьном кружке «Юный физик – умелые руки» при Гимназии №5 города Королёва (мкр. Юбилейный) Московской области. При этом основным требованием было точное соблюдение шагающей траектории движения опоры транспорта без возникновения даже незначительных касательных напряжений на грунт. Испытания модели новой шагающей машины позволили сформулировать ближайшие цели исследования, главная из которых заключается в разработке в перспективе принципиально новой системы управления новым транспортным средством с возможностью поворота шагающей машины во время движения. Цель работы заключалась в смещении шагающей рабочей траектории вниз, то есть ниже корпуса машины. Просто шарнирно прикрепить опору в рабочей точке шатуна нельзя, потому что появятся две степени свободы. Второй лямбдаобразный механизм П.Л.Чебышева тоже добавить нельзя, опять появляется вторая степень свободы. Но если к паре лямбдаобразных механизмов добавить синхрошатун, то остаётся единственная степень свободы, например, угол поворота ведущего кривошипа. Основу новой кинематической схемы механизма составляет дополнительный пассивный опорный синхрошатун. Все точки этого шатуна двигаются по рабочей шагающей траектории. В лямбдаобразном механизме П.Л.Чебышева по рабочей шагающей траектории двигается только одна точка шатуна. В этом заключается принципиальное отличие предлагаемого нового технического решения от известного механизма. На созданной модели шагающей машины установлены четыре таких механизма. На этой модели начато изучение системы управления. Новая система управления, основанная на плавной регулировке хода, позволяет уменьшить удары в шагающих механизмах. Опорные пластины позволяют перейти к схемам «двуногих роботов»

1. Васильева А.А., Драцкая А.И. Новый шагочод. 12 апреля 2021 г. – Электронный ресурс (видеоролик 5:01): <https://youtu.be/xuLo4lkvgRg>

## СПОСОБ УМЕНЬШЕНИЯ УДАРОВ В ШАГАЮЩЕЙ МАШИНЕ

А.И. Драцкая

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*ai.dratskaya@gmail.com*

Для школьного исследования был предложен конкретный вопрос: «Почему все шагающие механизмы стучат?» Для начала работы мне было предложено изучить графики движения рычагов в шагающем механизме [1]. В шагающих машинах обычно применяют механизм Пафнутия Львовича Чебышева [1]. Мне было предложено изучить этот механизм, изготовить модель, а потом предложить способ уменьшения ударов. В механизме П.Л.Чебышева крайние участки имеют очень быстрые развороты траектории, поэтому в крайних положениях удары будут ощутимы. Так и оказалось. Для дальнейшего изучения ударов мне нужно было изготовить лабораторную установку. Я уже включилась в работу по изучению таких механизмов [2]. Моя роль в создании моей первой шагающей машины была связана не столько с рычагами, сколько с системой управления. Это оказалось очень кстати при создании новой лабораторной установки для изучения ударов [3]. Для уменьшения ударов я предлагаю замедлить вращение двигателя, когда опора приближается к крайним точкам. Появились два вопроса. Во-первых, как узнать, что опора приближается к краю? Во-вторых, как замедлить вращение электродвигателя? Первая задача была решена с помощью стандартного концевого выключателя. Вторая задача была решена с помощью резисторов. Для лабораторной установки были выбраны регулируемые реостаты. В процессе создания установки регулировка и автономные испытания отдельных узлов выполнялись постоянно [3]. Для этого к двигателю был присоединён осциллограф АКПП-4115/1А. Шагающая модель была запущена как в обычном режиме без уменьшения, так и с различными сглаживаниями ударов [4]. Цель достигнута.

1. Скворцова А.А. Кинематический расчёт шагающего механизма / Гении Подмосковья: Сборник статей. 28 ноября 2020 г. - М.: Изд. "Научный консультант", 2020. - С.140-173.
2. Васильева А.А., Драцкая А.И. Новый шагohод. 12.04.21. <https://youtu.be/xuLo4lkvgRg>
3. Альбина Драцкая. Идея управления шагohодом. 14.05.21. <https://youtu.be/QUUawhhBgT4>
4. Альбина Драцкая. Удары в шагohоде. 24 мая 2021 г. <https://youtu.be/aobfBDct0TY>

## ДРОБЛЕНИЕ ОПАСНОГО АСТЕРОИДА

Екимовская В.А.

*ФГБОУ ВО НИУ «Московский государственный строительный университет».*

*lera.ek00@mail.ru*

При защите Земли от опасных астероидов часто предлагают применить схему искусственного разрушения космического объекта. При реализации такой схемы надо учитывать, что центр масс исходного тела и множества образовавшихся взрывных фрагментов будет продолжать двигаться по прежней траектории. В работе показано, как можно практически реализовать разрушение опасного астероида для защиты Земли от столкновения. В частности, решена задача о фрагментации исходного объекта на две части, безразлично, одинаковые или разные по массе и размерам. Проблема защиты Земли от опасных астероидов тесно связана с антропогенным засорением околоземного космического пространства фрагментами космического мусора [1]. Общими чертами этих двух проблем являются большие относительные скорости столкновения объектов. Даже при сравнительно небольших размерах космического тела, например, астероида, порядка ста метров, последствия его столкновения с Землёй будут катастрофическими. Обе проблемы начали изучаться как в организациях науки и промышленности, так и в военных организациях более двадцати лет назад. Для однократного дробления тела задача решается в один этап определением угла отклонения траектории фрагмента в сторону от Земли. В результате такого дробления образуются два фрагмента, траектории которых не пересекаются с Землёй. Вторая задача заключается в следующих двух дроблениях двух новых фрагментов – половинок исходного опасного объекта, которые продолжают двигаться в направлении Земли, но уже не центрально. Требуется определить второй угол отклонения фрагментов, чтобы те не пересекли поверхность Земли. С геометрической точки зрения доказана рациональность однократного целенаправленного дробления опасного объекта, при которой необходимый суммарный угол отклонения фрагментов будет минимальным. Энергетическая эффективность требует отдельного обоснования.

1. Меньшиков В.А., Перминов А.Н., Урличич Ю.М. Глобальные проблемы человечества и космос. – М.: ОАО «Издательство «МАКД», 2010. – 570 с.

## КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЁТ РАДИУСА ШАГАЮЩЕГО КОЛЕСА

В.С. Жукова

*ФГБОУ ВО НИУ «Московский государственный технический университет  
им. Н.Э.Баумана», Москва, Россия.*

*viktoriajukova1@yandex.ru*

Цель работы заключается в расширении возможностей транспортного средства. Для этого предлагается совместить преимущества колёсного движителя с особенностями шагающего движения. Особенность шагающего способа передвижения связана не только с уменьшением давления опоры на грунт за счёт увеличения площади соприкосновения, но и с жёсткими требованиями к траектории движения этой опоры относительно корпуса машины и относительно опорной поверхности [1]. Для пересечённых поверхностей есть смысл совместить энергоэффективный для ровных дорог колёсный движитель с намного более затратным, но зато более проходимым шагающим способом передвижения. Для этой цели предложено новое перспективное транспортное средство в виде шагающего колеса, на которое получен авторский патент на изобретение [2]. Появилась задача расчёта характеристик нового механизма. Отличительная особенность шагающего колеса заключается в роторной конфигурации нескольких механизмов П.Л.Чебышева. Рабочая точка шатуна в шагающем колесе совершает сразу два движения. Во-первых, вращается вместе с колесом, потому что корпус шагающего механизма совмещён с колесом, жёстко закреплён на колесе. Во-вторых, рабочая точка шатуна движется по шагающей траектории, приближаясь или отдаляясь от центра колеса. Для синтеза роторной конфигурации потребовалось сначала изучить траекторию рабочей точки. Следующей задачей стал выбор рабочих опорных точек в семействе траекторий. Заключительной задачей геометрического проектирования стало определение радиуса колеса транспортного средства, на котором по роторной схеме закрепляются механизмы П.Л.Чебышева.

1. Артоболевский И.И., Левитский Н.И. Механизмы П.Л.Чебышёва / Научное наследие П.Л.Чебышёва. – Вып. II. – Теория механизмов. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1945. – С.52-56. 2. Жукова В.С. Шагающее колесо. Заявка на патент №2018504370 от 09.10.2018 г. Патент на изобретение RU 2734175. – Бюлл. №29 от 13.10.2020 г.

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕХАНИЗМА ЛИПКИНА В АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

М.Э. Конорева

*МБОУ «Гимназия №5», город Королёв, Московская область.*

*maryakonor@mail.ru*

Техническая задача направлена на решение важной проблемы. Надо увеличить скорость работы принтеров. Для обычных принтеров проблемы нет. Проблема есть в аддитивных технологиях. Предлагаю посчитать вместе. Максимальная скорость печати 3D принтера 150 мм/с. Примерно за 6 секунд он выдаст линию длиной около метра и шириной не более 0,5 мм. Для детали площадью 1 квадратный метр надо 2000 таких линий. Умножаю на 6 секунд, получаю 12000 секунд на один слой. Это больше трёх часов на один слой. Для детали высотой 1 метр надо 2000 слоёв. Умножаю на 3 часа – это 6000 часов, то есть 250 суток. Один из способов увеличения скорости печати заключается в одновременной работе нескольких печатающих головок, но для этого нужен специальный точный механизм. Я предлагаю применить классический механизм Липкина-Посселье [1]. Чтобы шатун не раскачивался надо сделать четыре механизма Липкина. Если смотреть на конструкцию сверху, то четыре механизма Липкина установлены в углах прямоугольника [2]. На этот прямоугольник можно установить намного больше печатающих головок 3D принтера, чем на один рычаг-шатун. Скорость печати увеличивается. Например, если установить 100 печатающих головок, то в первом примере время изготовления детали уменьшится от 250 суток до 2, 5 суток, то есть в 100 раз. Значит, есть смысл от одной печатающей головки переходить к большим печатающим матрицам. Это похоже на экран монитора, который состоит из множества точек-пикселей, или похоже на матрицу электронного фотоаппарата. Изготовлена модель качелей Липкина с площадкой для установки печатающих головок. Перспектива работы изготовление точного механизма в заводских условиях.

1. Артоболевский И.И., Левитский Н.И. Механизмы П.Л.Чебышева / Научное наследие П.Л.Чебышева. Вып. II. Теория механизмов. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1945. Электронный ресурс: <https://www.tcheb.ru/27>
2. Конорева М.Э. Новое пряило на основе механизма Липкина. 6 апреля 2021 г. – Электронный ресурс (видеоролик 6:17): <https://youtu.be/prZQhj0g1wA>

## РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНОГО ОБУЧАЮЩЕГО ПРИЛОЖЕНИЯ

М.Л. Минеев

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань.*

*Min-max2000@mail.ru*

В современном глобальном мире существует потребность в саморазвитии по самым различным областям. Этому способствует все более увеличивающийся с каждым годом объем знаний, необходимый человеку. Важную роль в развитии играет география[1], в частности, знания о флагах государств. К сожалению, большому проценту людей данная информация покажется скучной, а процесс обучения сведется к зубрежке. Чтобы увлечь человека и сделать обучающий процесс более интересным было разработано обучающее приложение с элементами геймификации, которое поможет с интересом изучать страны и их характеристики. Кроме того, обучающие игровые приложения уже прочно закрепились в сознании людей, ведь они имеют множество тем для обучения и помогают развивать концентрацию, внимание, память и т.д. Приложения доступны в любое время, не зависимо от того, где находится человек – в общественном транспорте или на отдыхе.

Для разработки приложения были использованы среда разработки Visual Studio с языком C# и игровой движок Unity.[2] Игровое приложение базируется на угадывании флагов стран. Цель игры – правильно выбрать как можно большее количество стран по флагу за одну попытку. При верно угаданной стране игроку дается 1 очко, в противном случае игрок теряет 2 очка. Всего дается 5 возможностей ошибиться, после чего игра завершается. Лучший результат игрока записывается в таблицу рекордов. Приложение имеет несколько режимов сложности: легкий, где предстоит выбрать флаг из двух вариантов ответа; викторина, где количество вариантов увеличивается до четырех; сложный, где название страны требуется написать самостоятельно. Значительная часть разработки была уделена тестированию графического интерфейса, так как он является одним из важных факторов вовлечения пользователя в игру на этапе знакомства с приложением.[3] В игре присутствует обучающий элемент – раздел со списком стран. В нем можно узнать краткие характеристики каждой из стран (столица, население, валюта и т.п.). Информация записывается в виде плиток. Каждая плитка отвечает за одну страну, на ней находятся флаг страны и её характеристики. Также возможен выбор списка стран в соответствии с материком.

Благодаря этому игровому приложению люди разных возрастов смогут получить или освежить знания по географии. В дальнейшем можно развивать проект. Например, могут быть добавлены новые режимы игры и дополнительные разделы дисциплины, такие как угадывание столиц государств, денежной валюты или добавлен поиск, для более удобного перехода к интересующей игрока информации и т.п.

1. Мукаева, Л. А. Внеклассная работа и ее роль в формировании географических знаний в условиях современной школы / Л. А. Мукаева, Л. Т. Солтахмадова, М. Т. Гайрабекова. — Текст : непосредственный // Теория и практика образования в современном мире : материалы VI Междунар. науч. конф. (г. Санкт-Петербург, декабрь 2014 г.). — Санкт-Петербург : Заневская площадь, 2014. — С. 47-50. — URL: <https://moluch.ru/conf/ped/archive/145/6872/> (дата обращения: 01.10.2021).
2. Руководство Unity – [Электронный ресурс] <https://docs.unity3d.com/ru/530/Manual/> (дата обращения: 02.10.2021).
3. Аббаров, Р.Д. Тестирование графического интерфейса (GUI testing) / Р. Д. Аббаров, В.О. Пак. — Текст: непосредственный // Техника. Технологии. Инженерия. — 2017. — № 3.1 (5.1). — С. 3-4. — URL: <https://moluch.ru/th/8/archive/62/2630/> (дата обращения: 03.10.2021).

## СКРИПТ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ

Д.В. Мистриков, М.А. Рудакова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт Физики, 420008, Россия, РТ, г. Казань, ул. Кремлевская, д.16а.*

*MistikovDV@yandex.ru*

Моделирование динамики молекулярной системы в программном пакете «ORCA» подразумевает наличие начальных условий, которые являются основой для дальнейшего изменения состояния системы. Целью работы было написание небольшой программы на Python 3.9, которая бы автоматически равномерно располагала в пространстве молекулы растворителя и растворённого вещества.

Для повышения эффективности работы программы использовались модули numpy, math и сору. Были созданы два класса, один из которых представляет молекулы, а второй - пространство, в котором мы эти молекулы располагаем. Пространство представляет собой кубическую сетку, такую что каждая молекула занимает несколько её клеток. Вначале в сетке располагаются молекулы растворённого вещества, затем растворителя, а ячейки сетки в соответствующих местах помечаются как заполненные. Одновременно с заполнением клеток во входной файл для программного пакета «ORCA» прописываются координаты атомов соответствующих молекул.

Исходя из принципов работы программы получаем равномерно заполненный молекулами (но с небольшими флуктуациями плотности) объём пространства, с заданным количеством молекул растворителя в нём. Будучи сохранённым в формате входного файла для «ORCA», файл можно сразу направить на расчёт.

## ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГЕОИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ARCGIS PRO ДЛЯ СОЗДАНИЯ БАЗЫ ДАННЫХ ПАЛЕОЛИМНОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СЕВЕРА РОССИИ

Е.Ю. Сальникова, Н.М. Нигматуллин, Г.Р. Нигаматзянова, Л.А. Фролова, Э.А. Валиева,  
А.А. Фролова

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань.*

*kate.salnikova2012@gmail.com*

В связи с актуализацией глобальных климатических проблем возрос интерес к палеолимнологическим исследованиям [1,2]. В ходе проведения многолетних исследований особенно остро встает вопрос систематизации, визуализации и хранения массивов разнородных данных, полученных в ходе полевой работы. Создание баз данных (БД) является наиболее распространённым решением этой проблемы [3]. Широко используемые для реализации этой задачи программы (например, MS Excel), не предполагают единых шаблонов оформления полностью исключают быструю визуализацию полученных, поэтому без сторонних ГИС-программ затруднено. Вышеперечисленные недостатки усложняют процесс обработки, систематизации и каталогизации массивов эмпирических данных, не позволяют быстро создать качественный и, что немаловажно, эффектный иллюстративный материал.

В ходе ранее проведенных полевых экспедиционных работ сотрудниками НИЛ Палеоклиматологии, палеоэкологии и палеомагнетизма Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ было исследовано более 150 разнотипных водоёмов и отобрано более 250 проб поверхностных донных отложений и кернов озёр. На основе полученных образцов нами была создана база данных в системе ArcGIS Pro содержащая координаты и визуализацию озёр сведения о морфометрических (тип водоема, глубины, форма котловины и др.) и гидрохимических (рН, удельная электропроводность, солёность, редокс-потенциал, содержание кислорода и др.) параметрах водоёмов, краткие сведения о грунте и береговой растительности. БД объединяет в себе не только результаты наших исследований, но и актуальные данные спутниковых снимков плотности растительного покрова, полученные в результате реализации международного проекта Global Forest Change 2000–2019 [4] и рельефа [5], дополнена 3D-моделями прилегающего рельефа для некоторых водоемов. Полученная БД дополняет аналогичные базы водоемов Евразии, концентрирует наработанную информацию в одном месте, значительно упрощает доступ к ней и ученых экологов, геологов, географов, и специалистов смежных областей.

1. Frolova L.A., Nazarova L., Pstryakova L., Herzs Schuh U (2013) Analysis of the effects of climate-dependent factors on the formation of zooplankton communities that inhabit Arctic lakes in the Anabar River Basin. *Contemp Probl Ecol* 6:1–11.
2. Intergovernmental Panel on Climate Change (2014) *Climate Change 2013—the physical science basis: working group I contribution to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change*. Cambridge University Press, Cambridge.
3. Греков И.М., Сырых Л.С., Кошелева Е.А., Назарова Л.Б., Субетто Д.А. Применение геоинформационных баз данных в исследовании озёр Евразии // Астраханский вестник экологического образования. – 2018, №1 (43). – С. 134–141
4. Hansen M.C., Potapov P.V., Moorem R., Hanchers M., TURUBANOVA S.A., Tyukavina A.A., Thau D., Stehman S.V., Goetz S.J., Loveland T.R., Kommareddy A., Egorov A., Chini L., Justice C.O., Townshend J.R.G. (2013) High-Resolution Global Maps of 21st-Century Forest Cover Change. *SCIENCE* Vol 342, Issue 6160 pp. 850-853
5. ALOS Global Digital Surface Model "ALOS World 3D - 30m (AW3D30)" <https://www.eorc.jaxa.jp/ALOS/en/aw3d30/>



## ПОЛНАЯ КИНЕМАТИКА ШАГАЮЩЕГО МЕХАНИЗМА

А.А. Скворцова

*ФГБОУ ВО НИУ «Московский авиационный институт», Москва, Россия.*

*saa2509@mail.ru*

Научно-исследовательская работа посвящена изучению шагающего способа передвижения и шагающих механизмов. Основным шагающим механизмом является четырёхзвенный, если считать неподвижный корпус, шарнирно рычажный механизм П.Л.Чебышева. По результатам выполненных исследований получен патент на изобретение [1]. Работа выиграла конкурс и получила грант конкурса НИР «УМНИК-РАН-2016», подана заявка на инновационный конкурс НИОКР «СТАРТ-1». Однако во всех предыдущих работах в основном изучалось конструкционное направление. Мало внимания уделялось исследованию фундаментальных основ и особенностей природной траектории рабочей точки шагающего механизма. Цель этой работы является частной и конкретной, даже более методической, чем практической, - разработать методический, алгоритмический и программный материал для продолжения дальнейшего изучения шагающих движителей. Первой задачей стало компьютерное моделирование траектории движения рабочей точки шагающего механизма. Сформулированная в этой работе цель была достигнута, результаты сразу же были применены для расчёта скорости и ускорения рабочей точки шагающего механизма. При выполнении этой части работы была обоснована опасность микроударов, вызывающих вибрации в шагающих машинах. Одновременно работа развивается в педагогическом направлении. Школьнице было предложено разработать устройство для уменьшения микроударов в шагоходах. Результат – заявка на патент на изобретение, поданная ученицей 8-го класса, а также подготовленная вторая заявка. Конечная практическая цель и перспектива исследования заключаются в изучении нагрузок во время движения шагающей машины, построенной на основе механизмов П.Л.Чебышева. Это нужно для конечного проектирования образца техники.

1. Скворцова А.А. Механизм Шагающей машины. Патент на изобретение № 2712370. Заявка № 2017138076. Приоритет 01.11.2017. Рег. 28 .01.2020. Электронный ресурс: [https://yandex.ru/patents/doc/RU2017138076A\\_20190506](https://yandex.ru/patents/doc/RU2017138076A_20190506)

**СЕКЦИЯ 7 ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И  
ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ,  
МЕЗО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ**

## СИНТЕЗ НОВОЙ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СТЕРИЧЕСКИ ЗАТРУДНЕННОЙ СОЛИ ФОСФОНИЯ

Г.Р. Баембитова<sup>a,b</sup>, В.В. Ермолаев<sup>a</sup>

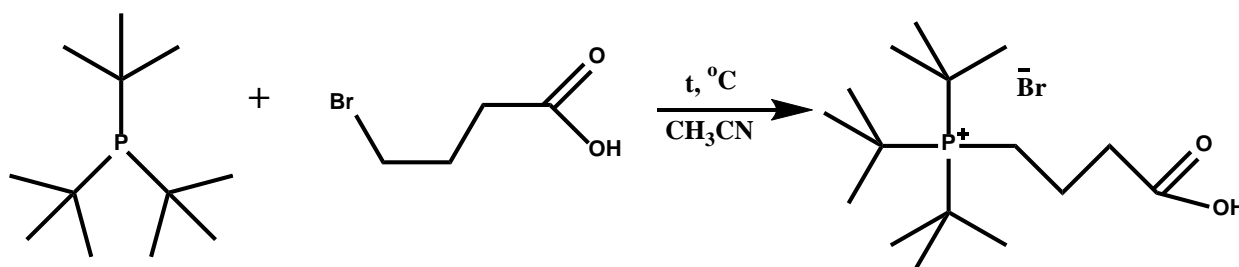
<sup>a</sup> ИОФХ им.А.Е.Арбузова КазНЦ РАН, Казань;

<sup>b</sup> Химический институт им.А.М.Бутлерова, КФУ, Казань.

*gulnaz.baembitova@mail.ru*

В настоящее время исследование ионных жидкостей представляет большой интерес вследствие сочетания их уникальных свойств: негорючесть, низкая летучесть, широкий интервал температур жидкого состояния, электропроводность. [1] Дизайн ионных жидкостей основан на разработке новых катионов и анионов, которые позволяют настраивать свойства для применения в решении конкретных задач: растворитель для реакций, в органокатализе, стабилизации наночастиц, электрохимии и др. Данные о биологической активности ионных жидкостей, включая их антибактериальные, цитотоксические и противогрибковые свойства, обсуждаются с учетом возможного применения в синтезе лекарственных средств. [2]

Целью данного исследования является синтез новых стерически затрудненных солей фосфония и изучение их физико-химических свойств. Нами был синтезирован первый представитель ряда три-*трет*-бутил(3-карбоксивпропил) фосфоний бромид. и изучен с помощью ЯМР-спектроскопии (<sup>1</sup>H, <sup>31</sup>P).



Четвертичный фосфониевый ион благодаря стерической затрудненности тетраэдрического катиона обеспечивает широкое электрохимическое окно, высокую термическую и химическую стабильность.

1. T. Welton, Ionic liquids: A brief history. *Biophys. Rev.*, 2018, **10**, 691–706.
2. K.Egorova, E.Gordeev, V.Ananikov Biological Activity of Ionic Liquids and Their Application in Pharmaceuticals and Medicine. *Chem. Rev.*, 2017, **117(10)**, 7132–7189.

## УПРАВЛЕНИЕ СПЕКТРОМ ИЗЛУЧЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ С ПОМОЩЬЮ АКТИВНОЙ ТЕРМОПЛАЗМОНИКИ

Э.И. Батгалова<sup>a</sup>, А.В. Харитонов<sup>a</sup>, С.С. Харинцев<sup>a</sup>, А.М. Димиев<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Кафедра оптики и нанофотоники, Институт физики КФУ, Казань;

<sup>b</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.

*elbatt@rambler.ru*

В последние годы неорганические галогенидные перовскиты  $\text{CsPbX}_3$  ( $X = \text{Cl, Br, I}$ ) привлекли широкий интерес как новые материалы для фотонных и оптоэлектронных приложений [1]. Перспективность данных материалов обусловлена их уникальными оптическими свойствами: высокая эффективность фотолюминесценции, возможность управления шириной запрещённой зоны, большой показатель преломления и др. [1].

Управление шириной запрещённой зоны перовскитов осуществляется за счет изменения их химического состава. Это позволяет настраивать длину волны фотолюминесценции/поглощения на этапе синтеза [2]. В настоящей работе исследуются механизмы активного управления спектром фотолюминесценции галогенидных перовскитов. Для этого были синтезированы нанокристаллы перовскитов  $\text{CsPbBr}_3$  с помощью метода горячей инъекции [2]. Для реализации перестройки длины волны излучения нанокристаллы высаживались на плазмонную тепловую метаповерхность. Тепловая метаповерхность представляет собой двумерный массив металлических наночастиц, которые разогреваются под действием падающего света и играют роль тепловых пикселей [3]. Каждый отдельный пиксель разогревается до некоторой наперёд заданной температуры в диапазоне от 0 до 1000 °С, что определяется размерами и формой наночастиц, их диэлектрической проницаемостью, длиной волны возбуждения и тепловыми свойствами окружения. Помещая нанокристаллы перовскитов на такие локализованные источники тепла, можно контролируемым образом их разогревать и, тем самым, изменять ширину запрещённой зоны. В результате, при освещении светом каждый пиксель может излучать свет с разной длиной волны. Особое внимание в работе уделено изучению тепловой стабильности перовскитов.

1. S. Makarov, et al. *Adv. Opt. Mater.*, 2019, **7**, 1800784.
2. L. Protesescu, et al. *Nano Lett.*, 2015, **15**, 3692-3696.
3. D. Liu, et al. *Adv. Sci.* 2018, **5**, 1800836.

## ХИРАЛЬНЫЙ КОМПОЗИЦИОННЫЙ УГЛЕРОДНЫЙ АДсорбЕНТ, МОДИФИЦИРОВАННЫЙ БИСЛОЯМИ «АССОЦИИРОВАННЫЙ ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ - $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИН»

Е.С. БЫКОВ<sup>a,b</sup>, К.А. Копытин<sup>a</sup>, Л.А. Онучак<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева», Самара;

<sup>b</sup> ООО «СамараНИПИнефть», Самара.

*bykov\_es@mail.ru*

В работе проведено изучение энантиоселективных свойств композиционного углеродного адсорбента Carborack Y (СрУ), модифицированного бислоями «ассоциированный (супрамолекулярный) жидкий кристалл (ЖК) -  $\beta$ -циклодекстрин ( $\beta$ -ЦД)» в условиях газо-адсорбционной хроматографии. В качестве ориентантов слоя  $\beta$ -ЦД использовали полярные ЖК: 4-(2-гидроксиэтилокси)-4'-цианоазоксибензол (ГЭОЦАБ) и 4,4'-октилоксицианобифенил (8ОЦБ). Построение подобных бислоевых структур за счет послойной сборки Layer-by-Layer позволяет получить самоорганизованные пленки, которые могут использоваться как катализаторы в хиральном синтезе, при производстве биосенсоров и т.д. Установлено, что для бислоевого адсорбента СрУ/ГЭОЦАБ/ЦД за счет сольватации «ГЭОЦАБ –  $\beta$ -ЦД» на углеродной поверхности отсутствует энантиоселективность к малополярным камфенам. При этом для бутандиолов получены уникальные высокие значения энантиоселективности для газо-адсорбционной хроматографии ( $\alpha_{-/ +} = 1,15$ ; 100 °С – бутандиолы-1,3;  $\alpha_{+/ -} = 1,25$ ; 150 °С – бутандиолы-2,3) за счет внешнесферных взаимодействий с  $\beta$ -ЦД. Для адсорбента СрУ/8ОЦБ/ЦД с последовательно нанесенными монослоями 8ОЦБ и  $\beta$ -ЦД получена высокая селективность как к камфенам ( $\alpha_{-/ +} = 1,09$ ; 160 °С), так и к бутандиолам-2,3 ( $\alpha_{-/ +} = 1,12$ ; 180 °С). В данном случае плотный монослой 8ОЦБ, образованный димерами мезогена [1], обеспечивает практически вертикальную ориентацию осей молекул  $\beta$ -ЦД, что выражается усилением внутри- и внешнесферных взаимодействий «адсорбат – макроцикл».

*Работа выполнена при поддержке гранта № FSSS-2020-0016 в рамках выполнения госзадания Министерства образования и науки Российской Федерации.*

1. S. Taki, S. Kai // *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2001, **40**, 4187-4192.

## СИНТЕЗ МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПИРОЛИЗА ФОСФАТА ИТТРИЯ, ДОПИРОВАННОГО ВИСМУТОМ

П.Д. Васильева<sup>a</sup>, Е.С. Худякова<sup>a</sup>, Д.А. Ласточкин<sup>a</sup>, Е.В. Томина<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж;

<sup>b</sup> Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г. Ф. Морозова,  
Россия, Воронеж.

vassilek-2000@mail.ru

Фосфат иттрия  $YPO_4$  – люминесцентный материал, востребованность которого обусловлена его термостойкостью, химической стабильностью и низкой токсичностью. Он считается отличной матрицей для ионов активаторов [1]. В работе в качестве допанта  $YPO_4$  использовали ионы висмута, которые могут выступать в качестве активаторов и сенсibilизаторов люминесценции [2]. Образцы синтезировали методом спрей-пиролиза, позволяющим получать частицы с узким распределением по размерам, равномерным распределением ионов активатора в решетки хозяина [3].

Фазовый состав исследовали методом рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре Empyrean, тип анода – Cu ( $\lambda=0.154060\text{nm}$ ). Съёмку проводили с шагом 0.0200. Размер и морфологию частиц определяли с использованием просвечивающей электронной микроскопии (CarlZeiss Libra-120).

Согласно данным РФА (рисунок 1а), синтезированный порошок  $Y_{0,95}PO_4:Bi_{0,05}$ , содержит преимущественно фосфат иттрия. Однако на дифрактограмме фиксируются рефлексы малой интенсивности, отвечающие оксиду иттрия ( $Y_2O_3$ ) и оксиду висмута ( $Bi_2O_3$ ). Малая ширина рефлексов говорит о высокой степени кристалличности порошка. Отмечается смещение углов  $2\theta$  в сторону уменьшения угла по сравнению с чистым фосфатом, что связано с внедрением большего по размеру иона  $Bi^{3+}$  (102 пм) в положение меньшего по размеру  $Y^{3+}$  (89,2 пм). Частицы имеют преимущественно сферическую форму, практически не агломерированы, размер не превышает 25-30 нм (рисунок 1б).

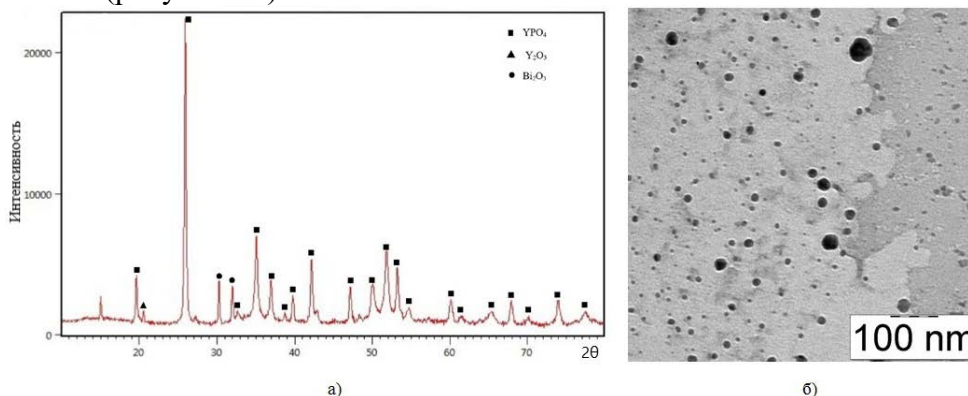


Рисунок 1 – Рентгеновская дифрактограмма образца  $Y_{0,95}PO_4:Bi_{0,05}$  (а) и ПЭМ изображения образца (б).

1. Tian J. [et al.]. Colloid sand Surfaces A: Physico chemica land Engineering Aspects. Vol. 568. 2019. P. 195-203.
2. Roy Awater H. P., Niemeijer-Bergnuijs L. C., Dorenbos P. Optical materials. Vol. 66. 2017. P. 351 – 355.
3. Томина Е. В., Ласточкин Д. А., Мальцев С. А. Конденсированные среды и межфазные границы. Т. 22. 2020. С. 496-503

## АНОМАЛЬНЫЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МИКРО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ DyF<sub>3</sub>

А.М. Гараева<sup>a</sup>, Е.М. Алакшин<sup>a,b</sup>, Е.И. Кондратьева<sup>a,b</sup>, И.В. Романова<sup>a</sup>, А.С. Сахацкий<sup>c</sup>,  
М.С. Тагиров<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики КФУ, Казань;*

<sup>b</sup> *Академия наук Республики Татарстан, Казань;*

<sup>c</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург.*

*adeliagaraeva84@gmail.com*

Соединение DyF<sub>3</sub> обладает уникальными свойствами, благодаря которым возможно его применение в качестве МРТ контрастного агента [1] и электрокатализатора [2]. DyF<sub>3</sub> представляет собой ферромагнетик с осью легкого намагничивания вдоль оси 010 кристаллической решетки; пространственная группа симметрии Pnma (орторомбическая); температура Кюри 2.55 К вдоль оси 010 для монокристалла [3].

Нанопорошки DyF<sub>3</sub> со средним размером 16нм x 30нм, 50нм x 30нм, 70нм x 40нм, 220нм x 150нм получены методом гидротермального синтеза при помощи хлоридной реакции [4], микроразмерный порошок размером до 45 мкм - путем дробления монокристалла. Контроль химического состава и подтверждение кристалличности осуществлялись посредством рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Bruker D8 Advance Cu K $\alpha$ ,  $\lambda=1.5418 \text{ \AA}$ . По фотографиям, полученным с помощью просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе HitachiHT Exalens, определялась форма и средний размер частиц в полученных порошках.

В работе измерены температурные (1.8 – 300 К) и полевые (0 - 7 Тл) зависимости намагниченности полученных образцов с помощью СКВИД-магнетометра MPMS XL-7 (Quantum Design), СПбГУ. Проведено моделирование намагниченности в модели обменных зарядов [3] в полном базисе электронной конфигурации Dy<sup>3+</sup> 4f<sup>9</sup> в DyF<sub>3</sub>. Из температурных зависимостей намагниченности определена температура фазового перехода в ферромагнитное состояние для всех образцов. Наблюдается понижение температуры Кюри с уменьшением размеров частиц в порошке. Обнаружены петли магнитного гистерезиса в ферро- и парамагнитной фазе. Рассматривается зависимость насыщения магнитного момента в сильных магнитных полях от размера частиц в образцах.

Работа выполнена за счет средств, субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

1. González-Mancebo D. et al. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2017, 34, 10, 1700116.
2. Li Y. et al. *Chemistry—An Asian Journal*, 2020, 15, 4, 487-489.
3. Savinkov A. V. et al. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, 20, 48, 485220.
4. Yi G. S., Chow G. M. *Journal of Materials Chemistry*, 2005, 15, 41, 4460-4464.

## ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ $\text{Pd}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$

Г.Ф. Гиззатуллина, И.В. Янилкин, А.И. Гумаров, Р.В. Юсупов, Л.Р. Тагиров

*Институт физики КФУ, Казань*

*gulnaz\_gizatullina\_98@mail.ru*

Магнитные тонкие пленки в качестве объектов исследований продолжают привлекать внимание многих исследователей, занимающихся в области физики магнитных явлений. С научной точки зрения интерес обусловлен исследованием процессов перемангничивания магнитных пленок. Одним из удобных способов для этого является измерение анизотропного магнитосопротивления (АМС).

Синтез магнитной эпитаксиальной пленки  $\text{Pd}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$  толщиной 20 нм был проведен на сверхвысоковакуумной установке методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В качестве подложки использовался монокристалл MgO (100). Для измерения магниторезистивных свойств были нарезаны образцы прямоугольной формы  $5 \times 1.5 \text{ мм}^2$  (торцы вдоль [100] и [010] пленки  $\text{Pd}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ ) и трапецевидной формы  $4 \times 1.5 \text{ мм}^2$  (основания вдоль [110], боковые стороны вдоль [100] и [010]). На первом образце ток протекал вдоль направления [100] пленки  $\text{Pd}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ , на втором - под углом к оси [100]. Измерение проводилось методом Ван дер Пау на установке PPMS-9 (Quantum Design).

В работе были получены полевые зависимости сопротивления для различных направлений поля и тока. Для моделирования данных использовалась модель однодоменного равновесного состояния, которая хорошо описала экспериментальные кривые, кроме углов близких к тяжелой оси. Анализ данных показал, что в системе наблюдается одноосная анизотропия, наличие которой характерно для всех пленок сплава PdFe. Наличие одноосной анизотропии привело к тому, что в системе ось намагничивания [-110] более легкая, чем ось [110]. Это повлияло на процессы перемангничивания образца. В зависимости от угла приложенного поля перемангничивание происходит в две стадии [1]. Первая стадия – это движение 90-градусной доменной стенки, а вторая - движение  $\varphi$ - градусной доменной стенки, где  $\varphi$  зависит от угла приложенного поля.

1. Zhan Q. F. et al. Magnetic anisotropies of epitaxial Fe/MgO (001) films with varying thickness and grown under different conditions. *New Journal of Physics*, 2009, **11**, 063003.



## МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НОВОГО МАТЕРИАЛА-АУКСЕТИКА

В.А. Екимовская

*ФГБОУ ВО НИУ «Московский государственный строительный университет».*

*lera.ek00@mail.ru*

Ауксетика – это материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона [1]. Физическая суть ауксетика заключается в расширении образца при его растяжении, а не в сужении, как это обычно наблюдается. Актуальность ауксетиков обоснована созданием материалов с принципиально новыми свойствами, например, бетона, работающего на растяжение. Специалисты часто обосновывают актуальность ауксетиков примером гвоздя, который легко забить, но почти невозможно вынуть [1]. В настоящее время известны в основном двумерные ауксетика. Менее изучены трёхмерные структуры ауксетиков для нанотрубок [1]. Цель работы заключается в создании механической аналогии для синтеза новых ауксетических структур. Новая структура основана на конфигурации известного пространственного шарнирного механизма Саррюса с внутренним сложением звеньев [2]. Объект изучения - новая трёхмерная структура материала, полученная на основе доработки указанного механизма, исследуется на предмет ауксетических свойств. Выводом из первого опыта стало обоснование следующего положения: трёхмерная ауксетичность единичной ячейки материала не означает перенос этого свойства на множество ячеек, то есть из микроауксетичности не следует макроауксетичность. Не только отдельные звенья механизма не должны мешать его движению в единичной ячейке, но и сами механизмы-ячейки не должны мешать друг другу в смещении, сохраняя при этом ауксетические свойства трёхмерной структуры. Доработка звена структуры была проведена поиском и приданием плоским складывающимся рычагам механизма Саррюса специальной формы. Начато изучение коэффициентов Пуассона для модели ауксетика.

1. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С., Волков М.А. Отрицательный коэффициент Пуассона для кубических кристаллов и нано/микротрубок. – ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН. – Физическая мезомеханика. - №16 (6). – 2013. – С.13-31.

2. Екимовская В.А. Механизм Саррюса с внутренним сложением - модель ауксетика / "Гагаринские чтения - 2020": Сборник тезисов докладов. - М.: МАИ, 2020. - С.1150-1152.

## РАЗРАБОТКА ТЕПЛОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ ДЛЯ УПРАВЛЯЕМОГО ХИМИЧЕСКОГО КАТАЛИЗА С НАНОМЕТРОВЫМ ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Э.А. Избасарова

*Институт физики КФУ, Казань.*

*Izbasarova.E.A@mail.ru*

В последнее время все большую актуальность приобретают оптические методы управляемого нагрева наноразмерных структур. Высокоэффективное преобразование оптической энергии в локализованное тепло играет важную роль в таких прикладных областях, как фототермическая терапия рака [1], термо-фотовольтаика [2], магнито-ассистируемая запись информации [3], биосенсинг [4] и др. Настоящая работа посвящена разработке тепловой метаповерхности для управляемого химического катализа с нанометровым пространственным разрешением. Данное устройство, представляющее собой двумерный массив металлических наночастиц, позволяет создавать неоднородный профиль распределения температуры на поверхности при освещении светом. Как показано в настоящей работе, каждая отдельная наночастица – тепловой «пиксель» – может контролируемо разогреваться вплоть до 1000 °С благодаря возбуждению плазмонного резонанса. Данный эффект может быть использован для ускорения скорости химической реакции реагентов, помещенных на метаповерхности. При этом, катализ осуществляется в локальной наноразмерной области, определяемой размерами теплового пикселя. Оптический нагрев металлических наноструктур представляет собой многоступенчатый процесс, эффективность которого зависит от многих факторов: добротность плазмонного резонанса, скорость теплоотвода, эффективность генерации теплового излучения. Таким образом, особое внимание в работе уделено разработке физических механизмов управления потоками тепловой энергии на наномасштабах для усиленного фотонагрева.

1. Bucharskaya, A.; Maslyakova, G.; Terentyuk, G.; Yakunin, A.; Avetisyan, Y.; Bibikova, O.; Tuchina, E.; Khlebtsov, B.; Khlebtsov, N.; Tuchin, V. *Int. J. Mol. Sci.* 2016, **17**, (8), 1295.
2. Kharintsev, S. S.; Chernykh, E. A.; Shelaev, A. V.; Kazarian, S. G. *Acs Photonics* 2021, **8**, (5), 1477-1488.
3. Okamoto, S.; Kikuchi, N.; Furuta, M.; Kitakami, O.; Shimatsu, T. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2015, **48**, (35).
4. Wu, C. H.; Neuner, B.; John, J.; Milder, A.; Zollars, B.; Savoy, S.; Shvets, G. *J. Optics-Uk.* 2012, **14**, (2).

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР МЕТОДОМ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

А.В. Казанцева, С.С. Харинцев

*Институт Физики КФУ, Казань, Россия.*

*nastyakazantseva13@gmail.com*

Лаборатории на одном чипе, микрофлюидные сенсоры и подобные им устройства могут быть синтезированы с помощью двухфотонной полимеризации [1,2]. Двухфотоннополимеризуемые структуры пространственно ограничены в двух или трёх плоскостях, поэтому в них проявляются размерные эффекты: флуктуации степеней конверсии, изменение локальной температуры стеклования [3].

Впервые исследование неоднородности заполимеризованности материала на наномасштабе с помощью локально усиленного комбинационного рассеяния света было проведено нашей командой. Выбран этот метод, так как спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) обеспечивает пространственное разрешение порядка 10 нм [5]. Были просканированы полимерные наноструктурированные дорожки, изображённые на рисунке 1а. Сравнивались спектры в двух точках, расположенных на расстоянии 100 нм друг от друга, рисунок 1б. Различие в интенсивности левых пиков свидетельствует о субмикронной пространственной неоднородности полимерной дорожки. Степень конверсии в первой и второй точках 55% и 50% соответственно.

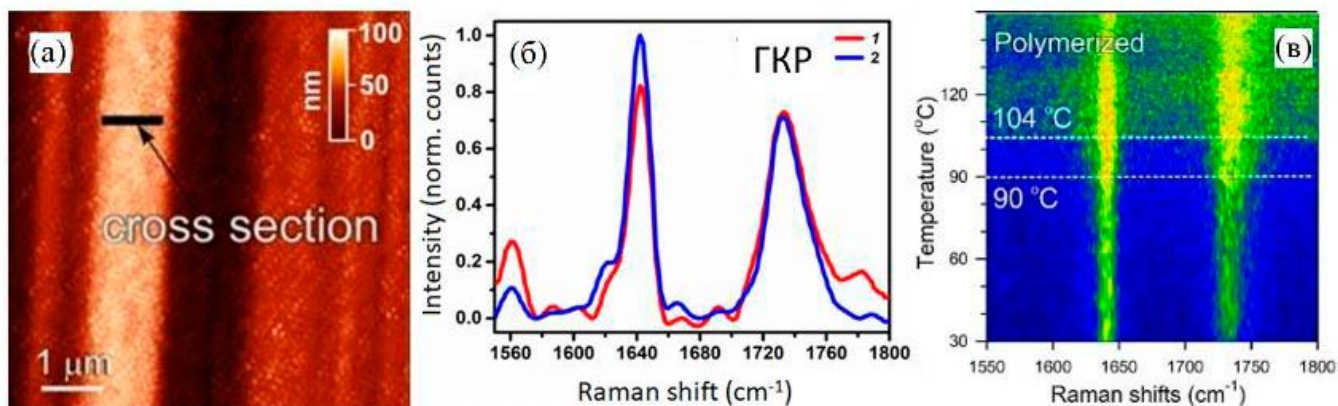


Рисунок 1 – а) АСМ-изображение нанодорожки; б) спектры TERS; в) спектры ГКР в зависимости от температуры

Также одной из важных характеристик полимера является температура стеклования, которую можно определить по скачку интенсивности, отслеживая зависимость спектров ГКР от температуры [5]. Локальная температура стеклования исследуемого акрилового полимера равна 90 °С, рисунок 1в.

В данной работе была продемонстрирована возможность использования спектроскопии ГКР для изучения двухфотоннополимеризованных микроструктур с субволновым пространственным разрешением.

1. Alsharhan A. T. et al. *J. of Micromech. and Microeng.*, 2021, **31**, 1-11.
2. Koppaka S. et al. *Micromachines*, 2021, **12**, 1005, 1-10.
3. Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах, 2010, 352.
4. Meyer R. *Trends in Analytical Chemistry*, 2018, **102**, 250–258.
5. Abiad M. G. et al. *Food Eng Rev*, 2009, **1**, 105–132.

## СИНТЕЗ НАНОПОРОШКОВ $\text{La}_{x-1}\text{Cd}_x\text{FeO}_3$ ( $x=0.05; 0.1$ )@C СО СТРУКТУРОЙ «ЯДРО-ОБОЛОЧКА» МЕТОДОМ СООСАЖДЕНИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

М.А. Китаева<sup>a</sup>, Е.И. Копейченко<sup>a</sup>, В.О. Миттова<sup>b</sup>, И.Я. Миттова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ВГУ, Воронеж, 394036, Университетская пл., 1;

<sup>b</sup> ВГМУ им. Н.Н. Бурденко, Воронеж, 394036, ул. Студенческая, 10.

kitaevamaria.00@mail.ru

В настоящее время предметом наиболее интенсивных исследований в материаловедении являются материалы с неравновесной метастабильной структурой, особое внимание заслуживают наночастицы типа «ядро–оболочка», которые характеризуются способностью комбинировать свойства нескольких материалов в одной частице [1]. Метод соосаждения обладает рядом преимуществ: возможность управлять составом, размером и структурой получаемых материалов, химическая однородность продуктов, относительно низкая температура процесса и продолжительность термообработки, экономичность [2].

Синтез осуществлялся согласно следующей методике:

К 350 мл кипящей воды добавляли 50 мл исходных солей – нитрата лантана, железа и кадмия. Кипячение продолжали ещё 4–5 минут, при этом раствор приобретал коричнево-красный цвет. Полученный золь охлаждали до комнатной температуры. Затем по каплям добавляли осадитель – КОН. Полученный порошок подвергали термическому отжигу при 950°C в течение 60 минут. Полученный на первом этапе порошок феррита лантана диспергировали в ультразвуковой ванне в течении 15 минут лимонная кислота  $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (Х.Ч.) и этиленгликоль  $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$  (ЧДА), винная кислота  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$  (ЧДА) и глицерин  $\text{C}_3\text{H}_5(\text{OH})_3$  (ЧДА). Синтезированный гель отфильтровывали, сушили в сушильном шкафу при 50°C в течение 30 минут.

Для образцов  $\text{La}_{1-x}\text{Cd}_x\text{FeO}_3$  ( $x = 0.05; 0.1$ ) в композиции с углеродом обнаружена структура «ядро-оболочка»: диаметр «ядра» – 65–108 нм с толщиной углеродной оболочки, равной 4 нм (ПЭМ, рис.).

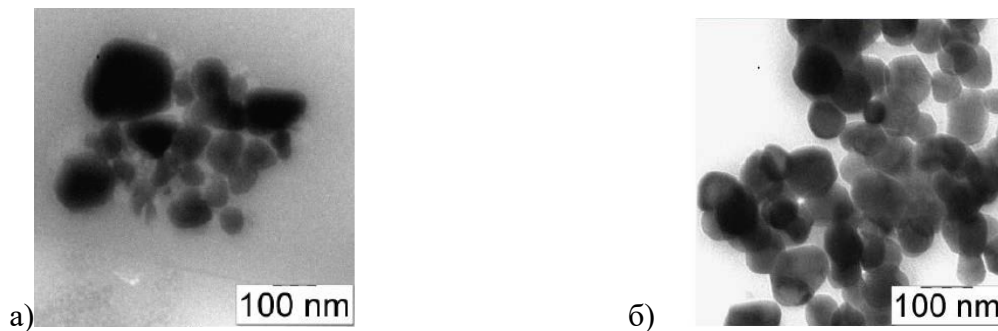


Рисунок 1 – ПЭМ-изображение (а) порошка состава  $\text{La}_{0.95}\text{Cd}_{0.05}\text{FeO}_3$ @C ( $x=0.05$ ; лимонная кислота + этиленгликоль), (б) порошка состава  $\text{La}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{FeO}_3$ @C ( $x=0.1$ ; винная кислота + глицерин)

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90048 Аспиранты.*

*Проведенные исследования выполнены на приборе ЦКПНО ВГУ.*

1. Денисова Е. А., Кузовникова Л. А., Исхаков Р. С., Кузовникова А. А., Немцев И. В., Мальцев В. К. // Журн. Известия Российской Академии наук, 2016, **80**, 1555 – 1558.
2. Шабанова Н. А., Попов В. В., Саркисов П. Д. Учеб. пособие – М. : ИКЦ Академкнига, 2006. – 309 с.

## ВЛИЯНИЕ ПРОШЕДШИХ РАЗЛИЧНУЮ ОБРАБОТКУ НАНОРАЗМЕРНЫХ СЛОЕВ ДИОКСИДА ТИТАНА НА ПРОЦЕСС ТЕРМООКСИДИРОВАНИЯ ФОСФИДА ИНДИЯ

А.С. Ковалева, В.Ю. Газин, Н.Д. Пряхин, С.А. Титов, И.Я. Миттова

*Воронежский государственный университет, Воронеж.*

*nkovaleva.vsu@yandex.ru*

Потребность в новых материалах для создания инновационных микроэлектронных устройств растет, и, следовательно, актуальна технологическая задача синтеза наноразмерных оксидных функциональных пленок с определённым составом, структурой и свойствами на поверхности полупроводников типа  $A^{III}B^V$  методом их хемостимулированного термоокисления (ТО), являющимся одним из самых технологичных и экономичных методов.

На базе исследований процессов формирования оксидных пленок возникла идея физической активации хемостимулятора-модификатора  $TiO_2$  для изучения его фотокаталитических способностей. Объектами исследования выступали тонкие пленки, синтезированные ТО в различных режимах магнетронно сформированных гетероструктур (ГС)  $TiO_2/InP$  с предварительной импульсной фотонной обработкой (ИФО) (оптимальный режим  $50 \text{ Дж/см}^2$ ,  $0,5 \text{ с}$ ) и без неё.

Необработанный слой  $TiO_2$  не проявляет хемостимулирующего эффекта (замедление роста пленок по сравнению с собственным ТО  $InP$ ), а слой диоксида титана, прошедший предварительную ИФО, позволяет добиться ускорения процесса роста пленки на 24% (ЛЭ). В случае как обработанных, так и необработанных ГС  $TiO_2/InP$  наблюдается зависимость времени формирования пленки от температурного режима синтеза (при  $570^\circ\text{C}$  процесс протекает в 1,5–2 раза быстрее, чем при  $530^\circ\text{C}$ ). По результатам исследования морфологии поверхности магнетронно сформированного и прошедшего ИФО образца  $TiO_2/InP$  (СТМ) видно, что ИФО нарушает гладкую поверхность ГС, что свидетельствует об образовании активационных центров и коррелирует с результатами исследования морфологии поверхности  $InP$  после ИФО. После ТО при  $530\text{--}570^\circ\text{C}$  поверхность обработанной ГС приобретает ярко выраженную зернистую структуру (латеральный размер зерна в среднем  $600 \text{ нм}$ ), а высота рельефа не превышает  $1 \text{ нм}$ . Зависимость характеристик поверхности от режима синтеза выявлена при исследовании морфологии поверхности необработанных термоокисленных ГС  $TiO_2/InP$ , которая с повышением температуры синтеза пленки становилась более зернистой (диаметр зерна от  $100$  до  $700 \text{ нм}$ ), но при этом более гладкой (высота рельефа снижалась с  $40$  до  $20 \text{ нм}$ ); для ГС, подвергавшихся ИФО, такой зависимости нет.

Таким образом, введение на поверхность  $InP$  хемостимулятора-модификатора  $TiO_2$  с последующей ИФО обуславливает ускоренное формирование гладких оксидных пленок с нанодисперсной структурой поверхности.

## МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ПЕЧИНИ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ОРТОФЕРРИТА ИТТРИЯ («ЯДРО»)@ ГРАФИТ («ОБОЛОЧКА»)

Е.И. Копейченко<sup>a</sup>, В.Б. Дядиков<sup>a</sup>, В.О. Миттова<sup>b</sup>, И.Я. Миттова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж;

<sup>b</sup> Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко, Воронеж.

*korejchenko00@mail.ru*

Наночастицы со структурой «ядро-оболочка» имеют широкий спектр применения в качестве компонентов покрытия для электроники, а также в биомедицине [1-2]. Преимущества метода Печини - возможность управления стехиометрией, образование гомогенной смеси компонентов и однофазных порошков, невысокие температуры и незначительное время синтеза. Модифицирован классический метод Печини за счёт внедрения винной кислоты в предварительную стадию взаимодействия исходных компонентов в растворе. Формирование наноразмерного слоя углерода в порошках на основе феррита иттрия реализовано за счёт введения в систему глицерина в роли гелеобразователя.

По результатам рентгенофазового анализа (РФА) было обнаружено наличие двух целевых фаз:  $\text{YFeO}_3$  и С (графит). По результатам просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ, рисунок) образцы имеют структуру «ядро-оболочка»: размер «ядра» варьируется в диапазоне от 18 до 160 нм, а толщина «оболочки» в диапазоне 5-22 нм. «Ядро» частиц ортоферрита иттрия на ПЭМ-изображениях выглядит более контрастным, так как состоит из более тяжелых элементов (Y, Fe, O), в отличие от «оболочки», состоящей из достаточно легкого элемента-углерода.

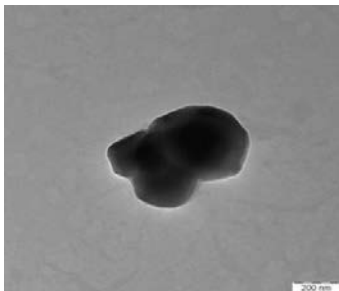


Рисунок 1 – ПЭМ-изображение образца  $\text{YFeO}_3$ @C.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90048 Аспиранты.*

*Результаты исследований получены на оборудовании Центра коллективного пользования Воронежского государственного университета.*

1. Е. Я. Анастасова, А. Н. Пономарева, Е. Г. Земцова. *Естественные и математические науки в современном мире*, 2016, **42**, 178-186.
2. В. И. Попков, Я. Албади. *Медицина: теория и практика*, 2019, **4**, 35-36.

## ПОЛУЧЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО АДсорбЕНТА С МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИМ КАРКАСНЫМ ПОЛИМЕРОМ MIL-53(Al)

А.А. Зрелова, М.Ю. Парийчук, Ю.В. Мартина, К.А. Копытин, Л.А. Онучак

*ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», Самара.*

*kirko87@inbox.ru*

Разработана методика получения композиционного адсорбента на основе кремнеземного носителя (Хроматон N AW-HMDS) с нанесенным слоем частиц ( $<1$  мкм) нанопористого металл-органического каркасного полимера (МОКП) MIL-53(Al) и изучены его физико-химические и адсорбционные свойства. Благодаря уникальной структуре МОКП являются перспективными нано-, мезопористыми цеолитоподобными материалами, находящими применение в катализе, сенсорных технологиях, аккумулировании и хранении газов, экстракции и концентрировании, хроматографии и др. Адсорбент получали нанесением предварительно подготовленного MIL-53(Al) на кремнеземный носитель из органической среды с последующим ее удалением. Исследования адсорбента методом ТГ/ДСК показало, что он термостабилен до  $490$  °С. При изучении его пористой структуры выявлено, что нанесение MIL-53(Al) на носитель привело к резкому уменьшению размеров его пор и уменьшению порового пространства, удельная поверхность полученного адсорбента составила  $43,5$  м<sup>2</sup>/г, что свидетельствует в пользу равномерного заполнения микрочастицами МОКП порового пространства носителя. Хроматографическим методом получены термодинамические характеристики адсорбции из газовой фазы тестовых органических соединений с малым объемом молекул. Установлено, что удерживание и изменение внутренней энергии  $|ΔU|$  при адсорбции для хлорпроизводных метана возрастают в соответствии с увеличением объема и поляризуемости молекул. Более высокие значения  $|ΔU|$  для ацетонитрила и нитрометана, по сравнению с хлорпроизводными метана, обусловлены вкладом ориентационных взаимодействий полярных молекул с атомами в структуре микропор композиционного сорбента.

*Работа выполнена при поддержке гранта № FSSS-2020-0016 в рамках выполнения госзадания Министерства образования и науки Российской Федерации.*

## ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ПОВЕРХНОСТИ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ

М.О. Косырева, В.Ф. Кострюков

*Воронежский государственный университет, Воронеж.*

*marinacosyrewa@yandex.ru*

Одной из наиболее актуальных проблем мониторинга окружающей среды является разработка устройств и систем, которые способны в режиме реального времени определить содержание того или иного вредного для человеческого здоровья газа. К таким устройствам относятся химически резистивные газовые сенсоры, газочувствительный слой которых обратимо изменяет свои электрофизические характеристики при взаимодействии с детектируемым газом. В качестве такого газочувствительного слоя выступает тонкая пленка на поверхности полупроводниковой подложки типа  $A^{III}B^V$ .

Газочувствительные пленки в представленной работе были получены методом хемостимулированного термоокисидирования. Хемостимуляторы снижают рабочие параметры процесса получения, однако до конца не изучено их влияние на рост и функциональные свойства тонких пленок. В качестве композиции хемостимуляторов были использованы  $Sb_2O_3$  и  $MnO_2$  в разном процентном соотношении (60 %  $Sb_2O_3$  и 40 %  $MnO_2$ ; 80 %  $Sb_2O_3$  и 20 %  $MnO_2$ ). Термоокисидировали полупроводниковую подложку GaAs в горизонтальном кварцевом реакторе печи в постоянном потоке кислорода 30 л/час при температуре 530 °С. Время окисидирования для пленки, полученной под воздействием композиции 60 %  $Sb_2O_3$  и 40 %  $MnO_2$ , составило 80 минут, толщина пленки, измеренная методом лазерной эллипсометрии, 98 нм; для пленки, полученной под воздействием композиции 80 %  $Sb_2O_3$  и 20 %  $MnO_2$ , соответственно, 40 минут и 119 нм.

Полученные образцы были исследованы на газочувствительные свойства. Проводились измерения сопротивления тонких пленок на воздухе и в присутствии газов, а именно CO и  $NH_3$ . Пик газочувствительности в присутствии CO тонких пленок был зафиксирован при температуре 200 °С. Пик газочувствительности тонких пленок к парам  $NH_3$  был зафиксирован при температуре 260 °С.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что полученные пленки обладают селективной газочувствительностью в определенном температурном интервале.



## НАРУШЕНИЕ ЗАКОНА КИРХГОФА В НАНОРАЗМЕРНЫХ ИСТОЧНИКАХ ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.М. Левковская, А.В. Харитонов, С.С. Харинцев

*«Казанский (Приволжский) федеральный университет», г. Казань.*

*levkovskaya.valeriya@gmail.com*

В последние годы наблюдается стремительное развитие методов термофотоники, которые позволяют контролируемым образом разогревать наноразмерные структуры и управлять потоками тепла на нанометровых масштабах. Данный интерес обусловлен рядом практических приложений, таких как термоассиструемая запись информации, оптическая терапия рака, термофотовольтаика и др. Эффективность оптического нагрева в общем случае зависит от следующих факторов: коэффициент поглощения света и скорость теплоотвода от разогретого объекта. В общем случае существует три канала оттока тепловой энергии: теплопроводность, конвекция и тепловое излучение. Данная работа посвящена разработке механизмов управления теплопередачей в наноструктурах, разогреваемых под действием света. Основное внимание уделяется тепловому излучению. Данный процесс описывается законом Кирхгофа, согласно которому количество поглощенной световой энергии равно количеству переизлученной. Однако, как было показано в недавних работах [1], закон Кирхгофа может нарушаться для наноразмерных излучателей. В настоящей работе исследуется оптический нагрев металлических наноструктур, которые разогреваются до сотен градусов благодаря возбуждению плазмонного резонанса. Для изучения возможности управления скоростью теплоотвода, выполнено численное моделирование поглощения света и теплового переизлучения в наноструктурах с различной геометрией и конфигурацией подложки.

1. Yubin Park; Viktar S. Asadchy; Bo Zhao; Cheng Guo; Jiahui Wang; and Shangui Fan, Violating Kirchhoff's Law of Thermal Radiation in Semitransparent Structures; *ACS Photonics*, **2021**, 8.
2. Haus H.A. *Waves and field in Optoelectronics*, Prentice-Hall, **1984**; pp 197-230;

## ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ $YFe_{1-x}Ni_xO_3@C$ В ВОЛНЕ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ГОРЕНИЯ

А.С. Леонова<sup>a</sup>, Е.И. Копейченко<sup>a</sup>, В.О. Миттова<sup>b</sup>, А.С. Коротких<sup>a</sup>,  
И.Я. Миттова<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ВГУ, Воронеж, 394036, Университетская пл., 1;

<sup>b</sup> ВГМУ им. Н.Н. Бурденко, Воронеж, 394036, ул. Студенческая, 1.

e-mail: aastasia.leonova@bk.ru

В настоящее время объектами пристального внимания являются наночастицы типа «ядро-оболочка», свойства которых могут варьироваться в весьма широких пределах из-за различных вариантов материала ядра и оболочки, структуры и размера. В качестве оболочки используют неорганические материалы, обеспечивающие стабильность, простоту функционализации и биосовместимость [1]. Существует достаточно большое количество методов получения наноматериалов с заданными свойствами [2], в том числе и касающихся ортоферрита иттрия в различных формах. В последнее время все большее внимание уделяется глицин-нитратному синтезу, основанному на процессах формирования наночастиц в волне горения [1].

В 200 мл дистиллированной воды растворяли:  $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ ,  $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$  и  $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ . После этого полученный раствор нагревали до практически полного испарения воды из системы и последующего самовоспламенения состава. Конечный продукт (в виде порошка) подвергали термическому отжигу при температуре  $800^\circ C$  60 минут.

Согласно данным рентгенофазового анализа (РФА, Thermo ARL X'tra) образец  $YFe_{1-x}Ni_xO_3$  ( $x=0.3$ ) при  $G/N=2$ , синтезированный с добавлением глицерина, состоит из целевых фаз  $YFeO_3$  и C (графит). По результатам просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ, Carl Zeiss LIBRA 120) для отдельных наночастиц (рис. 1, а) выявлена структура «ядро-оболочка», размер частиц  $YFe_{1-x}Ni_xO_3$  варьируется от 5 до 26 нм (рис. 1, б). Средний диаметр частицы составляет  $21 \pm 5$  нм, «ядра» - 20 нм.

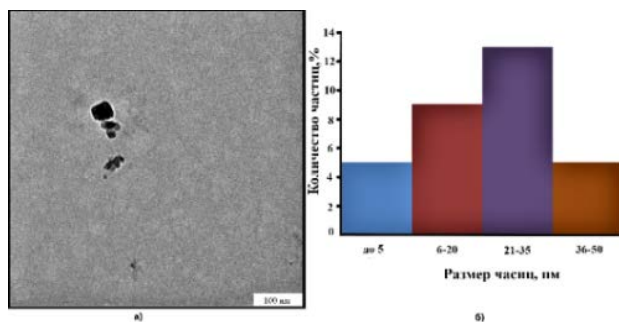


Рисунок 1 – ПЭМ-изображение образца (а) и гистограмма распределения частиц по размерам (б) порошка  $YFe_{1-x}Ni_xO_3$  ( $x=0.3$ )@C.

Таким образом, синтез наночастиц ортоферрита иттрия, допированных  $Ni^{2+}$ , в композиции с углеродом в условиях метода глицин-нитратного горения является подходящим для создания частиц со структурой «ядро-оболочка».

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90048 Аспиранты.

Проведенные исследования выполнены на приборе ЦКПНО ВГУ.

1. В.И. Попков, О.В. Альмяшева. *Журнал прикладной химии*. 2014, **87**, 185–189.
2. В.И. Попков, В.В. Гусаров, О. В. Альмяшева. *Журнал неорганической химии*. 2015, **85**, 901–907

## КВАНТОВОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ СОСТОЯНИЯ ОСНОВНОГО КРАМЕРСОВА ДУБЛЕТА И МАГНИТНЫХ G-ФАКТОРОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

К.М. Макушин, Э.И. Байбеков

*Институт физики КФУ, Казань.*

*llconstantinel@gmail.com*

В своей научной работе для расчёта энергии основного состояния примесных редкоземельных ионов  $\text{Yb}^{3+}$ :  $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  и  $\text{Er}^{3+}$ :  $\text{YPO}_4$  мы используем, доступные через облачный сервис, квантовые компьютеры IBM и квантовый алгоритм Variational Quantum Eigensolver (VQE), который хорошо зарекомендовал себя, как алгоритм, позволяющий задействовать скромные вычислительные возможности современных квантовых компьютеров. В качестве алгоритма минимизации мы выбираем алгоритм Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation, подходящий для оптимизации шумных целевых функций с большим количеством параметров.

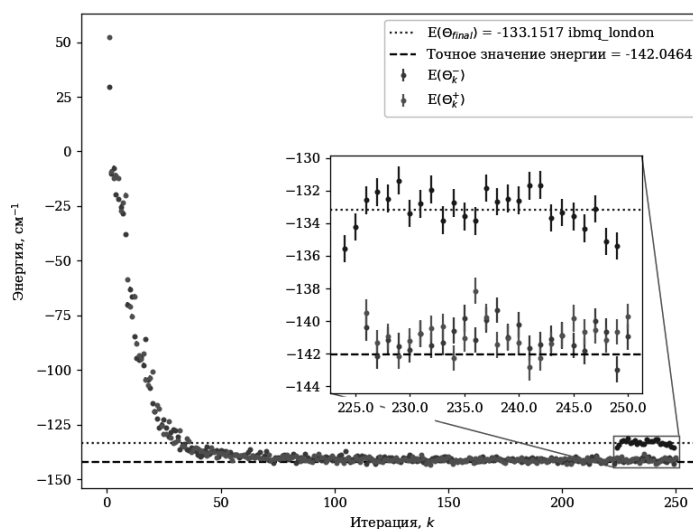


Рисунок 1 – Результаты полученные в процессе оптимизации параметров для гамильтониана кристаллического поля  $\text{Er}^{3+}$

Кроме того, с помощью VQE мы рассчитываем компоненты g-факторов основного состояния примесных редкоземельных ионов  $\text{Yb}^{3+}$  и  $\text{Er}^{3+}$ . Часть результатов, полученных в нашей работе приведена на Рисунке 1.

*Работа выполнена при поддержке субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету по государственному заданию в сфере научной деятельности № ФЗСМ-2020-0050.*

## УСИЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКОГО НАГРЕВА НАНОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ МАТЕРИАЛОВ С БЛИЗКИМ К НУЛЮ ПОКАЗАТЕЛЕМ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

А.И. Минибаев, А.В. Харитонов, С.С. Харинцев

*Физический факультет КФУ, Казань.*

*mai1417@yandex.ru*

Преобразование света в тепловую энергию в наноструктурах играет ключевую роль во многих прикладных областях, например, в фототермической терапии, термофотовольтаике, фотокатализе, магнитной записи информации и др [1]. Эффективность оптического нагрева определяется двумя факторами: (1) коэффициентом поглощения света и (2) тепловыми свойствами наноструктуры и ее окружения. Известно, что поглощение света молекулами вещества крайне неэффективный процесс. Таким образом, существует растущая потребность в разработке физических механизмов усиления эффективности поглощения света.

В последние годы было предложено несколько методов усиленного оптического нагрева, каждый из которых несет в себе ряд недостатков и ограничений. Настоящая работа посвящена разработке нового способа усиления фототермического преобразования. В основе подхода лежит использование материалов с близким к нулю показателем преломления. В последние годы данный класс сред привлек широкий интерес, что связано с обнаружением ряда уникальных электромагнитных эффектов, например, растяжение длины волны света и резонансное уменьшение групповой скорости [1]. С целью реализации оптического фотонагрева в широком диапазоне длин волн в работе впервые использованы широкополосные ENZ материалы на основе тугоплавкой керамики TiON (оксинитрид титана). Данные материалы изготовлены с помощью технологии, которая позволяет настраивать диэлектрическую функцию на этапе синтеза [1]. Требуемые параметры материала определялись путем теоретического анализа и численного моделирования. Показано, что фотонагрев TiON наноструктур достигает нескольких сотен градусов при маломощной оптической накачке 10 МВт/см<sup>2</sup>.

1. A.V. Kharitonov et al. // Opt. Mater. Express, **10**(2), 513-531 (2020)

## ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ И КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ КВАРЦА, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ИОНАМИ ЖЕЛЕЗА, КОБАЛЬТА И ВАНАДИЯ

А.В. Мухаметшин<sup>а</sup>, А.И. Бахтин<sup>а</sup>, О.Н. Лопатин<sup>а</sup>, И.Р. Вахитов<sup>а</sup>, В.Ф. Валеев<sup>б</sup>,  
В.И. Нуждин<sup>б</sup>, Р.И. Хайбуллин<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань;*

<sup>б</sup> *Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань.*

*adib.mv@gmail.com*

В кристаллическую структуру природного бесцветного кварца (горного хрусталя) были имплантированы ионы переходной 3d-группы (железа, кобальта и ванадия). Природа наведенной окраски и кристаллохимические особенности хрусталя, с имплантированной примесью 3d-элементов были исследованы методами оптической спектроскопии при поддержке других структурных и физических методов исследования: энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭДРФ), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), мёссбауэровской спектроскопии конверсионных электронов и дифференциального термомангнитного анализа (ДТМА).

Имплантация ускоренных до энергии 40 кэВ однозарядных 3d-ионов в двухсторонне полированные пластины или огранённые кристаллы горного хрусталя из Светлинского месторождения Южного Урала проводилась на ионно-лучевом ускорителе ИЛУ-3. Доза имплантации варьировалась в пределах  $(0.75 - 2.0) \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> при постоянной плотности ионного тока 10 мкА/см<sup>2</sup>. После высокодозной имплантации содержание имплантированной примеси в поверхностном слое (толщиной ~ 100 нм) горного хрусталя достигло уровня: 20 - 25 атомных %, согласно данным ЭДРА и РФЭС. Для отжига радиационных нарушений кристаллической структуры облученного кварца и оптической активации имплантированной примеси 3d-металлов была произведена постимплантационная термическая обработка в атмосфере воздуха. Оптимальные режимы термического отжига (температура и время) подбирались экспериментальным путем для каждого типа имплантированного образца хрусталя.

Высокодозная имплантация и постимплантационный отжиг (300 - 1000°C) приводит к появлению в приповерхностном слое матрицы различного рода структурных дефектов, электронно-дырочных центров, а также к образованию на определенной глубине облученной матрицы нанокластеров оксидов железа, кобальта и ванадия [1]. Этот способ является перспективным и в области создания новых функциональных нанокompозитных материалов на базе природного или синтетического кварца для различных практических применений, например при получении лазерных затворов в поверхностном слое кварца на основе наночастиц кобальтовой шпинели. Нанокластеры оксидов ванадия применяются в микроэлектронике для создания изолятор-транзитных зон [2]. Так же нанокластеры оксидов ванадия находят применение в изготовлении систем хранения информации нового поколения [3]. Сравнения оптические спектры с работой [4], было найдено четкое совпадение результатов интерпретации данных. Подобные оптические характеристики были получены для нанокластеров кобальтовой шпинели, которые используются для производства лазерных затворов.

Таким образом, метод высокодозной имплантации и постимплантационный отжиг, являются перспективными с целью создания нанокластеров 3d-металлов внутри кристаллической матрицы кварца.

1. Мухаметшин А.В., Гумаров А.И., Янилкин И.В., Вахитов И.Р., Нуждин В.И., Вагизов Ф.Г., Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Тагиров Л.Р., *Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. Науки*, 2017, **159**, кн. 1, 5–20.
2. Murgia V., Torres E. M. F., Gottifredi J. C. and Sham E. *Applied Catalysis*, 2006, **A 312**, 134–143.
3. Derkaoui and et.al., *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2017, 186-192.

4. George G., Anandhan S. A comparative Study on the physico-chemical properties of solgel electrospun cobalt oxide nanofibres from two different polymeric binders, *The Royal Society of Chemistry*, 2015, **5**, 81429-81437.

## САМОСБОРКА ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ПИРИДИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА И Cu(I)

В.А. Назмутдинова, Ю.И. Александрова, Д.Н. Шурпик, О.А. Мостовая, И.И. Стойков

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань.*

*n-vika-art@mail.ru*

В настоящее время в качестве новых материалов, а именно полимерных покрытий, (био)сенсоров, ионных каналов, датчиков, применяют супрамолекулярные металл-координационные архитектуры на основе полифункциональных макроциклических платформ. Наличие металла в структуре материала может позволить получать наноструктуры с заранее заданными свойствами за счет появления различных физико-химических свойств (окислительно-восстановительных, фотофизических, магнитных).

В связи с этим на сегодняшний день большое количество исследований направлено на синтез и изучение новых производных класса парациклофанов – пиллар[n]аренов. Благодаря таким уникальным характеристикам, как легкость синтеза и функционализации макроциклической платформы, контролируемый размер макроциклической полости, способность к селективному связыванию молекул гостей, пиллар[5]арены зарекомендовали себя в качестве универсальных макроциклических лигандов.

В данной работе были получены новые деказамещенные производные пиллар[5]арена, содержащие 2-, 4-тиапиридиновые и тиафенольные фрагменты. Структура полученных макроциклических соединений была подтверждена и охарактеризована комплексом современных физических методов, таких как  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  ЯМР, ИК - спектроскопия, MALDI масс-спектрометрия.

Также была изучена комплексообразующая способность синтезированных макроциклов с катионами d-металлов ( $\text{Ag}^+$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Pd}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^+$ ) методом электронной спектроскопии поглощения. Были установлены количественные характеристики комплексообразования методом спектрофотометрического титрования с использованием статистической модели BindFit. Методом динамического светорассеяния было подтверждено образование нанометровых агрегатов в случае комплекса пиллар[5]арена, содержащего фрагменты 4-тиапиридина, с катионом Cu(I) (72 нм, PDI=0.033). Было показано разгорание флуоресценции при формировании наноагрегатов данного макроцикла только в присутствии катионов Cu(I) со свойствами AIE (aggregation-induced emission) как в растворе, так и в твердом состоянии. Структура наноагрегатов была подтверждена методами рентгено-фазового анализа, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, а морфология установлена методами просвечивающей электронной, атомно-силовой и лазерной конфокальной микроскопии.

Таким образом, впервые были синтезированы деказамещенные производные пиллар[5]арена, содержащие в своей структуре 2-,4-тиапиридиновые и тиафенольные фрагменты, изучены комплексообразующая способность и агрегационные свойства полученных макроциклов с катионами d-металлов. А также показана флуоресценция наноагрегатов (AIE) с катионами Cu(I), что можно использовать в разработке и создании новых наноматериалов с потенциальными сенсорными свойствами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 20-73-00161.*

## СИНТЕЗ НАНОПРОШКОВ $GdCrO_3$ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Я.М. Немых, В.Ф. Кострюков

*Воронежский государственный университет, Воронеж.*

*yaromir0202@gmail.com*

В настоящее время актуальным направлением является создание химических наносенсоров, позволяющих детектировать токсичные и взрывоопасные газы в воздухе. Получение нанопорошков, обладающих газочувствительными свойствами, путем механосинтеза или разложением неустойчивых солей, является загрязняющим, затратным и малоэффективным. В связи с этим, необходимо найти наиболее подходящий метод, который позволит быстро получать чистые порошки. Под эти критерии подходит золь-гель метод [1]. Исходя из этого, целью работы был синтез нанопорошка хромита гадолиния золь-гель методом.

Синтез нанопрошка проводился золь-гель методом, где в качестве осадителя использовался  $NH_4OH$ . Исходные вещества для синтеза  $GdCrO_3$ : нитрат гадолиния (х.ч.), нитрат хрома (ч.д.а.) и аммиак водный (ГОСТ 3760-79). Синтез проводился по методике, рассмотренной в [1], отжиг отфильтрованного и высушенного осадка происходил в муфельной печи при температуре -  $900^\circ C$  в течение 4-х часов.

Анализ элементного состава порошков был проведен на растровом электронном микроскопе JEOL-6510LV с системой энергодисперсионного микроанализа Bruker. Результаты представлены в таблице. [1].

Фазовый анализ проводился на рентгеновском дифрактометре Thermo ARL X'TRA. Результаты исследования совпали с эталонными с точностью до третьего знака после запятой. Полученный порошок относится к пространственной группе  $Rm-3m$ , следовательно, образец обладает структурой перовскита.

Таблица 1 – Результат анализа элементного состава нанопрошка хромита гадолиния, полученного золь-гель методом.

Номинальный состав образца	Элементный состав, ат. %			Реальный состав образца
	Гадолиний (Gd)	Хром (Cr)	Кислород (O)	
$GdCrO_3$	17,8	18,4	63,8	$Gd_{0,89}Cr_{0,92}O_{3,19}$

Таким образом, синтез хромита гадолиния золь-гель методом является приемлемым и позволяет получить химически более чистый и практически однофазный нанопорошок.

1. Нгуен А.Т. Применение золь-гель технологии для получения наноразмерных порошков  $La(Y)FeO_3$  / А.Т. Нгуен, И.Я. Митова, Н.А. Румянцева // Вестник воронежского государственного университета. Серия: химия, биология, фармация. – 2008. – №. 2. – С. 48–52.



## ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НА РЕЦЕПТОРНЫЕ СВОЙСТВА ГАММА-ЦИКЛОДЕКСТРИНА

В.Ю. Осельская, А.К. Гатиатулин, М.А. Зиганшин, В.В. Горбачук

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия.*

*victorose@mail.ru*

Вода играет важную роль в успешном получении соединений включения циклодекстринов (ЦД) с лекарственными веществами, что требуется для повышения их биодоступности. Соотношение активирующей и конкурирующей роли воды в связывании субстрата твердым ЦД существенно влияет на эффективность связывания гостя в твердофазных системах при этом по-разному для разных ЦД. Например, при связывании субстратов  $\alpha$ -ЦД конкурирующая роль воды является доминирующей [1, 2], что по-видимому является причиной меньшего масштаба его практического применения по сравнению с  $\beta$ -ЦД. Для  $\beta$ -ЦД гидратация активирует включение гидрофобных гостей [3], а для умеренно гидрофильных гостей требуется оптимизация уровня гидратации, так как избыток и недостаток воды исключает их связывание [3].

В настоящей работе методами статического парофазного газохроматографического анализа, ТГ/ДСК/МС, порошковой рентгеновской дифрактометрии и ИК-спектromетрии изучалось влияние гидратации на рецепторные свойства  $\gamma$ -ЦД по отношению к летучим органическим гостям и твердому модельному соединению – индометацину. Полученные данные были сопоставлены с аналогичными результатами предшествующих исследований для  $\alpha$ -ЦД и  $\beta$ -ЦД [1, 2, 3]. Определено соотношение конкурирующей и активирующей роли воды в зависимости от размера макроцикла нативного ЦД и от молекулярной структуры гостя.

Исследование связывания модельного соединения – индометацина – позволило оценить влияние гидратации нативных ЦД на получение соединений включения методом перетирания. Показано, что эффективность связывания индометацина с  $\gamma$ -ЦД и  $\beta$ -ЦД в этих условиях существенно зависит от их гидратации. Полученные результаты могут быть полезны при разработке технологических процессов инкапсуляции лекарственных препаратов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-33-90130 и по госзаданию Министерства науки и высшего образования № 0671-2020-0061.*

1. А.К. Gatiatulin, V. Yu. Osel'skaya, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbachuk. *PCCP*, 2018, **20**, 26105-26116.
2. А.К. Gatiatulin, V. Yu. Osel'skaya, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbachuk. *RSC Adv.*, 2019, **9**, 37778-37787.
3. V.V. Gorbachuk, A.K. Gatiatulin, M.A. Ziganshin, A.T. Gubaidullin, L.S. Yakimova. *JPCB*, 2013, **117**, 14544-14556.

## СПАД СВОБОДНОЙ ИНДУКЦИИ В РАСПЛАВЕ ДЕЙТЕРИРОВАННОГО ПОЛИЭТИЛЕНОКСИДА

И.К. Островская<sup>a</sup>, Н.Ф. Фаткуллин<sup>a</sup>, К. Линдт<sup>b</sup>, К. Маттеа<sup>b</sup>, С. Стаф<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики КФУ, Казань;*

<sup>b</sup> *Департамент технической физики 2/Физики полимеров, Технический университет Ильменау, Ильменау, Германия.*

*ostrovskaya.i.k@gmail.com*

В представленной работе изучено проявление краевых эффектов сегментов полимерных макромолекул на примере спада свободной индукции (ССИ) сегментов дейтерированных макромолекул полиэтиленоксида в расплаве. Внутрисегментарное происхождение механизма спиновой релаксации дейтронов и одномерная репационная диффузия полимерных цепей внутри фиксированной полимерной трубки приводит к возникновению особенностей сигнала ССИ в ЯМР-спектроскопии  $g(t)$  на временах  $T_2^{eff} < t < \tau_1$ , где  $T_2^{eff}$  – эффективное время спин-решёточной релаксации. Для расплавов с низкой молекулярной массой, когда выполняется предел Редфилда, ССИ идёт по степенному закону  $g(t) \propto t^{-1}$ , отражая частотную природу краевых эффектов, т.е. возрастание их роли по мере наблюдения [2]. Для более длинных цепей вне предела Редфилда ( $\tau_1 < T_2^{eff}$ ), ССИ на указанном интервале падает по растянутой экспоненте с точностью до логарифмических меняющихся со временем коэффициентов  $g(t) \propto \exp\left(-\left(t/\tilde{T}\right)^\alpha\right)$ , где  $\tilde{T} = const$ ,  $\alpha = 1/4$  в режиме некогерентных репаций и  $\alpha = 1/2$  в режиме когерентных репаций [3].

*Работа выполнена при поддержке гранта Немецкого исследовательского фонда Nos. DFG STA 511/13-1, DFG STA 511/13-2.*

1. N.F. Fatkullin, T. Körber. *Polymer*, 2018, **142**, 310.
2. И.К. Островская, Н.Ф. Фаткуллин. *Polym. Sci. Ser. A*, 2020, **62**, 138.
3. I.K. Ostrovskaya, N.F. Fatkullin, T. Körber, E.A. Rössler, A. Lozovoi, C. Mattea, S. Stapf, *J. Chem. Phys.*, 2020, **152**, 184904.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПИРОХЛОРОВ  $Tb_2Ti_2O_7$  И  $(Er_{0.05}Y_{0.95})_2Sn_2O_7$ 

А.В. Спиридонова, О.В. Недопёкин, И.В. Романова

*Институт физики КФУ, Казань.**sav1998@list.ru*

Оксиды типа  $A_2B_2O_7$ , где в качестве А вступает один из ряда редкоземельных элементов  $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Tb^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ ,  $Sm^{3+}$ ,  $Yb^{3+}$ ,  $Tm^{3+}$ , обладают кубической гранецентрированной структурой и принадлежат к пространственной группе  $Fd\bar{3}m$ . При этом атомы редкоземельного металла образуют трёхмерную сеть тетраэдров с общими углами. Если хотя бы один из атомов А или В является магнитным, а взаимодействие с ближайшими соседями – антиферромагнитным, то пирохлоры оказываются сильно фрустрированными [1]. Такие магнетики представляют особый научный интерес.

Основой для описания свойств пирохлоров служат экспериментальные данные – измерения магнитной восприимчивости и нейтронной дифракции порошков. Расчётный анализ обычно производится в рамках теории кристаллического поля [2], однако благодаря современным методам моделирования как качественное, так и количественное описание свойств может быть существенно улучшено. Для монокристалла  $Tb_2Ti_2O_7$  были проведены *ab initio* расчёты температурной зависимости теплоёмкости и фононного спектра, определены ИК- и раман-активные моды. При моделировании использовался функционал GGA–PBE-sol программного пакета MedeA, хорошо подходящий для описания свойств твёрдых тел [3]. Результаты моделирования из первых принципов были сопоставлены с ранее полученными данными и экспериментальными значениями [4] и признаны адекватными для последующего использования.

Для порошка  $(Er_{0.05}Y_{0.95})_2Sn_2O_7$  был впервые осуществлён синтез методом оптической зонной плавки. В ходе исследований проведён рентгеноструктурный анализ на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE ( $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$ ). Получены зависимости намагниченности порошка  $(Er_{0.05}Y_{0.95})_2Sn_2O_7$  на вибрационном магнитометре Physical Properties Measurement System-9 в магнитных полях от 0 до 9 Тл и температурном диапазоне от 5 К до 300 К. Получен ЭПР-спектр порошка. В настоящее время проводятся расчёты для пирохлора  $(Er_{0.05}Y_{0.95})_2Sn_2O_7$ .

1. G. Balakrishnan et al., J. Phys.: Condens. Matter, 1998, **10**, 723-725.
2. V.V. Klekovkina and B.Z. Malkin, Optics and Spectroscopy, 2014, **116**, 925-933.
3. J.P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett., 2008, **100**, 136406.
4. V.A. Chernyshev et al., Phys. Solid State, 2015, **57**, 982-987.

## СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВЫХ МУЛЬТИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОКОНТЕЙНЕРОВ

И.В. Харьюшин<sup>a,c</sup>, А.С. Овсянников<sup>a,b</sup>, С. Ферлей<sup>c</sup>, С. Бодрон<sup>c</sup>, С.Е. Соловьева<sup>a,b</sup>,  
И.С. Антипин<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский Федеральный университет, ул. Кремлевская 18, 420008, Казань, Россия;

<sup>b</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузов, КазНЦ ФИЦ, РАН, ул. Арбузова 8, 420088, Казань, Россия;

<sup>c</sup> Страсбургский университет, 4 rue Blaise Pascal, 67000 Страсбург, Франция.

haryushin.ivan@gmail.com

Исследование мультиметаллических клеток является перспективным направлением благодаря их уникальной структуре. Одним из возможных путей создания данных соединений является взаимодействие сложных металлорганических юнитов между собой. В недавних работах было показано, что тиакаликс[4]арены (рис.1а) и сульфоникаликс[4]арены (рис.1б) отлично подходят для формирования октаэдрических клеток на основе двух- и трехосновных карбоновых кислот[1]. Значительный внутренний объем данных октаэдрических клеток позволяет им инкапсулировать большие объемы различных газов (CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>) [2]. Более того, использование в синтезе клеток металлорганических коннекторов позволяет ожидать появления каталитической активности в некоторых реакциях благодаря высокой концентрации металлических центров, например в реакциях хирального окисления[3]. Также появление в структуре клеток определенных химических групп (например, порфириновые и триазиновые фрагменты) может вызывать проявление фотохимических свойств и свойств анионного распознавания [4]. В данной работе описывается синтез и кристаллическая структура новых мультиметаллических клеток (рис.1г), полученных в результате взаимодействия между тетраядерным комплексом сульфоникаликс[4]арена с Со(III)-дипириновым карбоксилатным (рис.1в).

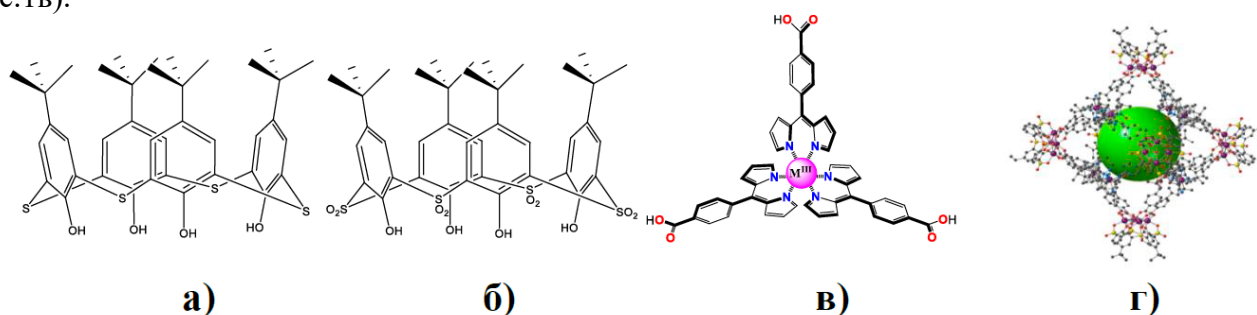


Рисунок 1 – а) Структура тиакаликс[4]арена; б) Структура сульфоникаликс[4]арена; в) Структура Со(III) карбоксилатного комплекса; г) Структура октаэдрической супрамолекулярной клетки.

При поддержке РФФ 19-73-20035

1. Dai, F. R., Sambasivam, U., Hammerstrom, A. J., & Wang, Z. (2014). Synthetic supercontainers exhibit distinct solution versus solid state guest-binding behavior. *Journal of the American Chemical Society*, 136(20), 7480-7491.
2. Du, S., Yu, T. Q., Liao, W., & Hu, C. (2015). Structure modeling, synthesis and X-ray diffraction determination of an extra-large calixarene-based coordination cage and its application in drug delivery. *Dalton Transactions*, 44(32), 14394-14402.
3. Tan, C., Jiao, J., Li, Z., Liu, Y., Han, X., & Cui, Y. (2018). Design and Assembly of a 4. Chiral Metallosalen-Based Octahedral Coordination Cage for Supramolecular Asymmetric Catalysis. *Angewandte Chemie International Edition*, 57(8), 2085-2090.
4. Rather, I. A., Wagay, S. A., & Ali, R. (2020). Emergence of anion- $\pi$  interactions: The land of opportunity in supramolecular chemistry and beyond. *Coordination Chemistry Reviews*, 415, 213327.