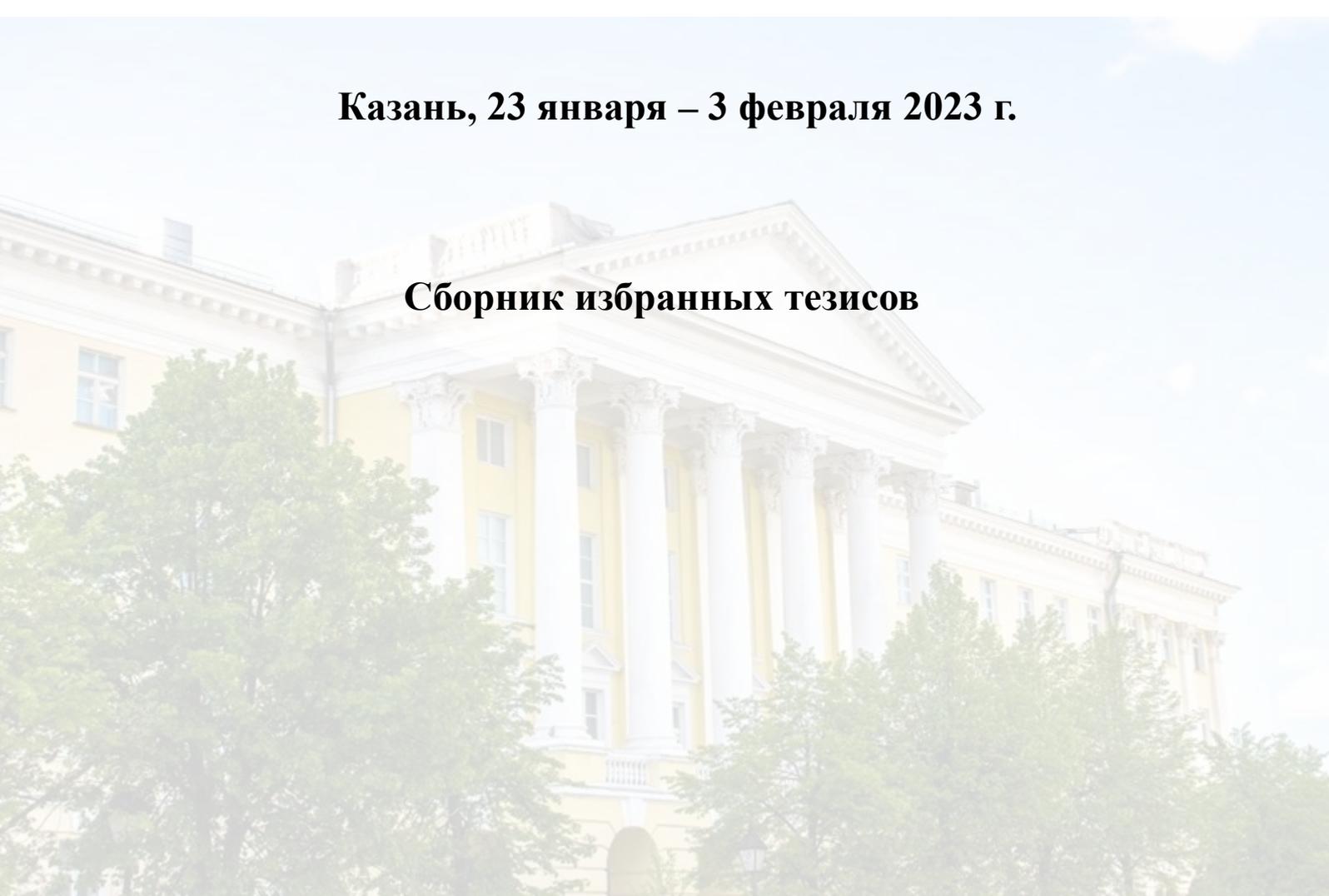




**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ  
ХИМИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМЕНИ А.М. БУТЛЕРОВА**

**ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА  
ИНСТИТУТА ФИЗИКИ И ХИМИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА  
ИМЕНИ А.М. БУТЛЕРОВА КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО  
УНИВЕРСИТЕТА**

**Казань, 23 января – 3 февраля 2023 г.**



**Сборник избранных тезисов**

**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ  
ХИМИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМЕНИ А.М. БУТЛЕРОВА**

**ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА  
ИНСТИТУТА ФИЗИКИ  
И ХИМИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМЕНИ А.М. БУТЛЕРОВА  
КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**Казань, 23 января – 3 февраля 2023 г.**

**Сборник избранных тезисов**



**КАЗАНЬ  
2023**

УДК 53+54  
ББК 24.5  
И93

**Редакционный комитет:**

**Марат Ревгеревич Гафуров, Марат Ахмедович Зиганшин,  
Ирина Владимировна Романова, Ирина Александровна Челнокова,  
Георгий Юрьевич Андреев**

**Организационный комитет:**

**Марат Ревгеревич Гафуров, Марат Ахмедович Зиганшин,  
Ирина Владимировна Романова, Ирина Александровна Челнокова,  
Дмитрий Альбертович Таюрский, Сергей Сергеевич Харинцев,  
Юрий Николаевич Прошин, Роман Валерьевич Юсупов,  
Анатолий Васильевич Мокшин, Владимир Дмитриевич Скирда,  
Ленар Рафгатович Тагиров, Виктор Всеволодович Парфенов,  
Марат Николаевич Овчинников, Сергей Владимирович Сушков,  
Ольга Германовна Хуторова, Наиль Абдуллович Сахибуллин,  
Юрий Анатольевич Нефедьев, Адель Джавидович Акчурин,  
Аркадий Васильевич Карпов, Олег Николаевич Шерстюков,  
Василий Юрьевич Белашов, Альберт Вартанович Аганов,  
Гузель Ильдаровна Гарнаева, Рустэм Рафаэльевич Амиров,  
Иван Иванович Стойков, Борис Николаевич Соломонов,  
Сурия Ирековна Гильманшина, Георгий Юрьевич Андреев**

**И93** **Итоговая научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава Института физики и Химического института имени А.М. Бутлерова Казанского федерального университета (Казань, 23 января – 3 февраля 2023 г.) [Электронный ресурс]: сборник избранных тезисов. – Электронные текстовые данные (1 файл: 2,19 Мб). – Казань: Издательство Казанского университета, 2023. – 162 с. – Системные требования: Adobe Acrobat Reader. – URL: <http://dspace.kpfu.ru/xmlui/handle/net/175367>. – Электронный архив Научной библиотеки имени Н.И. Лобачевского КФУ. – Загл. с титул. экрана.**

**ISBN 978-5-00130-692-2**

В данном сборнике представлены избранные тезисы Итоговой научно-практической конференции профессорско-преподавательского состава Института физики и Химического института имени А.М. Бутлерова Казанского федерального университета, состоявшейся 23 января – 3 февраля 2023 г.

**УДК 53+54  
ББК 24.5**

**ISBN 978-5-00130-692-2**

© Издательство Казанского университета, 2023

# СОДЕРЖАНИЕ

*Основное научное направление*

**ФИЗИКА И ИНЖЕНЕРИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

**Секция**

**ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАТЕРИАЛОВ**

*А.И. Гарифуллин, Р.Х. Гайнутдинов, М.А. Хамадеев*

УПРАВЛЕНИЕ КИНЕТИКОЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ПОЛОСТЯХ  
ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР..... 19

*А.Р. Газизов*

ОПТОМЕХАНИЧЕСКОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ  
ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА С ПОМОЩЬЮ  
КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ ..... 20

**Секция**

**ТЕОРИЯ МАГНИТНЫХ, СПЕКТРАЛЬНЫХ И ТРАНСПОРТНЫХ  
СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ, НАНОСТРУКТУР  
И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СОЕДИНЕНИЙ**

*В.В. Клековкина, Н.М. Абишев*

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ПИРОХЛОРА  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  С УЧЕТОМ СЛУЧАЙНЫХ  
ДЕФОРМАЦИЙ РЕШЕТКИ..... 21

*К.М. Макушин*

ОБЗОР МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ РАСЧЕТОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ  
КОМПЬЮТЕРОВ ..... 22

*А.А. Хамзин, Р.Р. Нигматуллин*

УНИФИКАЦИЯ И РАСШИРЕНИЕ МЕТОДА ФАКТОРИЗАЦИИ  
ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТОЧНЫХ И УСЛОВНО ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ  
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА .....23

*Ф.М. Сираев, М.В. Авдеев, Ю.Н. Прошин*

ВЛИЯНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ НА КРИТИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА НЕОБЫЧНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ В РАМКАХ  
ВАРИАЦИОННОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ..... 24

**Секция**  
**КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ**

<i>М.Д. Кузнецов, А.Г. Киямов, Д.А. Таюрский</i> РАСЧЕТ В РАМКАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ СВОЙСТВ И ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $KFeSe_2$ .....	25
<i>А.А. Евсеев</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ГИГАНТСКИМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ ТИПА РАШБЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ .....	26
<i>А.И. Шамсиева</i> ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ .....	27
<i>Р.Ф. Ахмеров, И.И. Гумарова, О.В. Недопекин</i> О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ .....	28
<i>Р.М. Бурганова</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ДОПИРОВАННОГО $Gd \beta$ -ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА МЕТОДАМИ ТФП .....	29
<i>С. Кавиани</i> АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ И ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ DFT .....	30
<i>Р.Г. Батулин, И.А. Руднев, С.А. Хохорин, А.Г. Киямов, С.В. Покровский, С.В. Веселова</i> КРИТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ДИБОРИДА МАГНИЯ .....	31
<i>Г.Ю. Андреев, И.В. Романова</i> ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОЭЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ $LiYbF_4$ .....	32

**Секция**  
**МАГНИТНАЯ И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**  
**ПЕРСПЕКТИВНЫХ СРЕД И МАТЕРИАЛОВ**

<i>Ф.Ф. Мурзаханов, М.А. Садовникова, Г.В. Мамин, Б.Ф. Габбасов, М.Р. Гафуров, И.Н. Грачева</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ЯДЕРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВАКАНСИОННЫХ ЦЕНТРОВ В КРИСТАЛЛАХ $h\nu N$ .....	33
---	----

<i>Д.В. Шуртакова, М.А. Садовникова, Г.В. Мамин, М.Р. Гафуров</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ОКТАКАЛЬЦИЙФОСФАТОВ И ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТОВ МЕТОДАМИ ЭПР .....	34
<i>А.В. Петров</i> НЕТЕПЛОВАЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ РЕДУКЦИЯ КОЭРЦИТИВНОГО ПОЛЯ В ТОНКИХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ L1 <sub>0</sub> -ФАЗЫ FePt и FePt <sub>0.84</sub> Rh <sub>0.16</sub> .....	35
<i>М.В. Пасынков</i> МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ ТОНКОЙ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ L1 <sub>0</sub> -ФАЗЫ FePd И ИСКУССТВЕННОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА FePd /W/ FePd .....	36
<i>Р.В. Юсупов</i> СВЕРХБЫСТРАЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИНАМИКА ВОЗМУЩЕНИЙ ОРБИТАЛЬНОГО И МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЙ В ШПИНЕЛИ FeCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> .....	37
<i>А.К. Докудовская, М.С. Пудовкин, Е.И. Олейникова, С.Л. Кораблева, О.А. Морозов, М.Р. Гафуров</i> ОПТИЧЕСКИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ДАУН-КОНВЕРСИОННЫХ МИКРОЧАСТИЦ Nd <sup>3+</sup> , Yb <sup>3+</sup> :LiYF <sub>4</sub> .....	38
<i>А.Р. Нурмухаметов, К.В. Васин, М.В. Еремин</i> ПРИНЦИП РАБОТЫ ОПТИЧЕСКОГО ДИОДА НА FeZnMo <sub>3</sub> O <sub>8</sub> .....	40
<i>А.М. Гараева, Е.М. Алакишин, Е.И. Кондратьева, И.В. Романова, К.Р. Сафиуллин, В.В. Кузьмин, М.С. Тагиров</i> МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МИКРО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ DyF <sub>3</sub> .....	41
<i>А.С. Макараченко, К.Р. Сафиуллин, В.В. Кузьмин, М.С. Тагиров</i> ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТОДЕ БЕЗЛАЗЕРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ <sup>3</sup> He .....	42
<i>А.В. Богайчук</i> МЕТОДИКА T <sub>2эф</sub> -T <sub>2</sub> ДЛЯ АНАЛИЗА ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ДИАМАГНЕТИКОВ .....	43
<i>А.А. Шавельев, А.А. Шакиров, А.С. Низамутдинов, М.А. Марисов, С.С. Харинцев, В.В. Семашко</i> ПЕРСПЕКТИВНАЯ АКТИВНАЯ СРЕДА НА ОСНОВЕ СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛОВ LiCa <sub>x</sub> Sr <sub>1-x</sub> AlF <sub>6</sub> : Ce .....	44
<i>А.В. Астраханцева, А.А. Шавельев, М.А. Марисов, А.С. Низамутдинов, В.В. Семашко</i> ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ИОНОВ Er <sup>3+</sup> В КРИСТАЛЛАХ BaY <sub>1.8</sub> Lu <sub>0.2</sub> F <sub>8</sub> .....	45

**Секция  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА**

*И.И. Файрушин*

РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУМЕРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ  
ЮКАВЫ И КУЛОНА НА ОСНОВЕ ПРОСТОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ  
ДЛЯ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ..... 46

*Р.М. Хуснутдинов*

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ  
ЖИДКОСТЕЙ ..... 47

*Р.Р. Хайруллина, Р.М. Хуснутдинов*

ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ФУЛЛЕРЕНОВЫХ  
СМЕСЯХ ..... 48

*Р.В. Власов, А.В. Мокшин*

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ  
ГИДРАТА МЕТАНА ..... 49

**Секция  
ФИЗИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ**

*А.С. Александров*

РЕАЛИЗАЦИЯ ЦИФРОВОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ, ФИЛЬТРАЦИИ  
И РАЗРАБОТКА ТЕРМОБЛОКА В ЯМР-РЕЛАКСОМЕТРЕ  
«ХРОМАТЭК-ПРОТОН 20М» С ЦЕЛЬЮ РАСШИРЕНИЯ СПЕКТРА  
ИССЛЕДУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ ..... 50

*Р.В. Архипов*

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ  
ЗАВИСИМОСТИ КСД ФЕНОЛА В ВОДНЫХ D<sub>2</sub>O РАСТВОРАХ МЕТОДОМ  
ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ..... 51

*Д.Л. Мельникова, В.Д. Скирда*

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ БЕЛКОВ  
С ВНУТРЕННЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРОЙ МЕТОДОМ  
ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА  
С ИМПУЛЬСНЫМ ГРАДИЕНТОМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ..... 52

*Д.Л. Мельникова, Д.С. Иванов, В.Д. Скирда*

О НЕКОТОРЫХ МЕТОДИЧЕСКИХ ВОПРОСАХ В ИССЛЕДОВАНИИ  
ПРОНИЦАЕМОСТИ КЛЕТОК ЭРИТРОЦИТОВ  
МЕТОДАМИ ИМПУЛЬСНОГО ЯМР ..... 53

<i>Д.С. Иванов</i> РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ПАРАФИНА И АСФАЛЬТЕНОВ В НЕФТИ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА .....	54
<i>А.А. Иванов</i> НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАНГИДРАТОВ МЕТОДОМ ЯМР .....	55
<i>Д.С. Иванов, Т.А. Казбаев</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТРУКТУРНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА НЕФТИ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА .....	56
<i>С.А. Куракин, Д.Р. Бадреева, С.В. Ефимов, Т.А. Мухаметзянов, А.И. Иваньков, Н. Кучерка</i> СТРУКТУРА МОДЕЛЬНЫХ ЛИПИДНЫХ СИСТЕМ В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ И БЕТА-АМИЛОИДНЫХ ПЕПТИДОВ .....	57
<i>И.З. Рахматуллин, С.В. Ефимов, В.В. Клочков</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ГРУППОВОГО СОСТАВА ЛЕГКОЙ, ТЯЖЕЛОЙ И КАТАЛИЗИРОВАННОЙ НЕФТИ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ .....	58

### Секция

### НОВЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

<i>И.Ф. Маликов, Н.М. Лядов, М.Х. Салахов, Л.Р. Тагиров</i> РЕАКТИВНЫЙ МАГНЕТРОННЫЙ СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ, ЭЛЕМЕНТНОГО И ВАЛЕНТНОГО СОСТАВА И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ВОЛЬФРАМА, ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И МОЛИБДЕНОМ .....	59
<i>О.Н. Лис, Д.П. Козленко, С.Е. Кичанов</i> ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОГО МАГНЕТИКА $\text{CrBr}_3$ .....	60
<i>А.Ф. Абдуллин</i> СПИН-СПИРАЛЬНАЯ МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА В ТРОЙНЫХ СИСТЕМАХ Fe-Al-M (M = Ga, V). РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ .....	61
<i>А.Л. Зиннатуллин, Л.И. Савостина, Е.Н. Дулов, Ф.Г. Вагизов А.А. Загидуллин, И.А. Безкишко, А.В. Петров, В.А. Милюков, Р.Р. Заиров</i> МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОСФАФЕРРОЦЕНОВ .....	62

*Б.А. Бакиров*

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ НОВЫХ АЛГОРИТМОВ  
ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ДАННЫХ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ ..... 63

*Основное научное направление*  
**КОСМИЧЕСКИЕ И ИНФОКОММУНИКАЦИОННЫЕ  
ИССЛЕДОВАНИЯ, ТЕХНОЛОГИИ, РАЗРАБОТКА ПРИБОРОВ  
НА НОВЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПАХ**

**Секция**  
**ВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В СРЕДАХ**

*М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов*

КОМБИНИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ И ИМПУЛЬСНЫХ  
ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ПЛАСТОВ ..... 64

*Д.С. Максимов, Д.А. Когогин, И.А. Насыров, Р.В. Загретдинов*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛНЕЧНЫХ ВСПЫШЕК  
НА ВОЗМУЩЕННОСТЬ ИОНОСФЕРЫ ЗЕМЛИ ПО ДАННЫМ СЕТИ ГНСС-  
СТАНЦИЙ, РАСПОЛОЖЕННЫХ В ЕВРОПЕЙСКОЙ ЧАСТИ РФ ..... 65

*В.В. Емельянов, Д.А. Когогин, Д.С. Максимов, И.А. Насыров,*

*А.Б. Белецкий, А.В. Шиндин, С.М. Грач, Р.В. Загретдинов*

СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ СНИМКОВ НОЧНОГО НЕБА  
И ДВУМЕРНЫХ КАРТ ВАРИАЦИЙ ПОЛНОГО ЭЛЕКТРОННОГО  
СОДЕРЖАНИЯ В ПЕРИОД РАБОТЫ УНУ СТЕНД «СУРА» ..... 66

*А.В. Соколов, Д.А. Когогин*

ПРОТОТИП ГНСС-ПРИЕМНИКА НА БАЗЕ ОТЛАДОЧНОЙ ПЛАТЫ  
simpleRTK2B С МОДУЛЕМ u-blox ZED-F9P ..... 67

*Р.А. Натфуллин, Е.А. Марфин*

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМА УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ  
НА ВЯЗКОСТЬ НЕФТИ ..... 68

*А.О. Храмов, М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов, А.И. Деркач*

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ  
КАЛИБРОВКОЙ ЭЛЕКТРОННЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ  
В НЕФТЯНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ ..... 69

*Д.П. Малышев, М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов, А.И. Деркач*

ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ  
ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА БАЗЕ  
MASTERSCADА 4D. .... 70

*Б.Ф. Шафигуллин, М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов, В.А. Маценко*

КОММУТАЦИОННОЕ ОБОРУДОВАНИЕ  
В ОТКАЗОУСТОЙЧИВЫХ СЕТЯХ ..... 71

*Д.А. Смолей*

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МИЦЕЛЛ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПРОМОТОРОВ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ МЕТОДОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ .....	72
---	----

**Секция**

**ТЕОРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ**

*А.Б. Балакин*

ПРОБЛЕМА ИЕРАРХИИ В ТЕМНОМ СЕКТОРЕ КОСМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ .....	73
--	----

*Д.Е. Грошев, Д.А. Спасов*

ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МОДЕЛЕЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ .....	75
--	----

*Ю.Г. Игнатьев*

СКАЛЯРНО ЗАРЯЖЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ И МЕЖЧАСТИЧНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ПОТЕНЦИАЛОМ ХИГГСА .....	76
---	----

*П.Е. Кашаргин, С.В. Сушков*

УСТОЙЧИВОСТЬ НЕЙТРОННЫХ ЗВЕЗД В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ С НЕМИНИМАЛЬНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ СВЯЗЬЮ .....	77
---	----

*А.Ю. Кузнецова*

КЛАССИФИКАЦИЯ ЭНДОМОРФИЗМОВ АЛГЕБРЫ ТЕПЛИЦА .....	78
---	----

*Р.К. Мухарлямов*

МЕТОД РЕКОНСТРУКЦИИ В СКАЛЯРНО-ТЕНЗОРНОЙ ТЕОРИИ ХОРНДЕСКИ В РАМКАХ КОСМОЛОГИИ БИАНКИ-I .....	79
---	----

*И.С. Бердников, Р.Н. Гумеров, Е.В. Липачева, Е.В. Патрин*

ОБ УНИВЕРСАЛЬНЫХ И РЕДУЦИРОВАННЫХ ПОЛУГРУППОВЫХ $C^*$ -АЛГЕБРАХ .....	80
--	----

*А.Р. Самигуллина*

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ В ПОЛНОЙ МОДЕЛИ КОСМОЛОГИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ НА ОСНОВЕ КЛАССИЧЕСКОГО СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ С ХИГГСОВЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ .....	82
---	----

*Н.А. Самородов, В.А. Попов*

УСТОЙЧИВОСТЬ ГРАВИТАЦИОННО-СВЯЗАННОГО КОНДЕНСАТА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БОЗОНОВ .....	83
---	----

*Р.Г. Галеев, С.В. Сушков*

АНИЗОТРОПНЫЕ КОСМОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТИПА БИАНКИ I, V И IX В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ С НЕМИНИМАЛЬНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ СВЯЗЬЮ .....	84
---	----

*А.Ф. Шакирзянов*

АКСИОННАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА В АНИЗОТРОПНЫХ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ТИПА БИАНКИ .....	85
---	----

**Секция**  
**РАСПРОСТРАНЕНИЕ РАДИОВОЛН**  
**В СРЕДАХ СО СЛУЧАЙНЫМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ**

*А.А. Колчев*

АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ  
ГИППОКАМПАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ..... 86

*А.Е. Зыкова, Е.Ю. Зыков, В.В. Кугуракова*

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ  
ДЛЯ УДАЛЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ РОБОТИЗИРОВАННЫМИ  
УСТРОЙСТВАМИ ..... 87

*Э.М. Митушева*

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОЦЕНКИ ЗЕНИТНОЙ ТРОПОСФЕРНОЙ ЗАДЕРЖКИ  
СИГНАЛОВ СПУТНИКОВЫХ НАВИГАЦИОННЫХ СИСТЕМ ..... 88

*А.А. Алейникова*

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОЦЕНКИ ИНТЕГРАЛЬНОГО ВЛАГОСОДЕРЖАНИЯ  
В СИСТЕМЕ СПУТНИКОВОГО МОНИТОРИНГА АТМОСФЕРЫ ..... 89

*Д.Б. Иванова*

МОНИТОРИНГ МЕЗОМАСШТАБНЫХ КОНВЕКТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ  
ГНСС-СИГНАЛАМИ ..... 90

**Секция**  
**ПРИКЛАДНАЯ РАДИОФИЗИКА**

*А.Д. Акчурин*

СВЯЗЬ СЕЗОННЫХ ВАРИАЦИЙ ВЫСОТНЫХ ПАРАМЕТРОВ  
ДНЕВНЫХ СРЕДНЕМАСШТАБНЫХ ПИВ С СЕЗОННЫМИ  
ВАРИАЦИЯМИ СКЛОНЕНИЯ ГЕОМАГНИТНОГО ПОЛЯ  
И НАКЛОНОМ КОЛЬЦЕВОГО ТОКА ..... 91

*А.Э. Сайфутдинов*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОНОГРАММ  
ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ДНЕВНЫХ СМ ПИВ ..... 92

**Секция**  
**МЕТЕОРНЫЕ ЯВЛЕНИЯ**  
**И МЕТЕОРНЫЕ ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ**  
**СИСТЕМЫ**

*А.В. Карпов, Д.В. Коротышкин, В.В. Жарков*

ТОНКАЯ ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА  
МЕТЕОРНЫХ ПОТОКОВ ГЕМИНИДЫ И КВАДРАНТИДЫ  
ПО РАДИОЛОКАЦИОННЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ 2016–2022 ГГ. .... 93

<i>А.И. Сулимов</i> АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВВЕДЕНИЯ ЗАЩИТНЫХ ИНТЕРВАЛОВ ПРИ КВАНТОВАНИИ ФАЗОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ .....	94
<i>А.А. Галиев</i> РЕАЛИЗАЦИЯ МНОГОЧАСТОТНОГО МЕТОДА ПРОСТРАНСТВЕННО- РАЗНЕСЕННОЙ ГЕНЕРАЦИИ СОГЛАСОВАННЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГРАММНО-КОНФИГУРИРУЕМОГО РАДИО .....	95
<i>Д.В. Сарычев, А.В. Карпов</i> ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ И МОНИТОРИНГА ЛЭП СТАНДАРТА 6–10 КВ .....	96
<i>Р.Ф. Халиуллин, А.И. Сулимов</i> ОЦЕНКА ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАНАЛА СВЯЗИ В МИМО-РАДИОСИСТЕМЕ МЕТОДОМ СВЕРХШИРОКОПОЛОСНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ .....	97
<i>С.А. Калабанов, Р.В. Сысолятин, Р.А. Ишмуратов</i> РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЗВУКОВЫХ СООБЩЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ОБЛАЧНОГО РЕШЕНИЯ TELEGRAM .....	98
<i>С.А. Калабанов, А.В. Изюмченко, Р.А. Ишмуратов</i> РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РАСЧЕТА И ПОСТРОЕНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ОРБИТ МЕТЕОРОИДОВ .....	99
<i>А.И. Сулимов, В.В. Бочкарев, А.А. Галиев</i> МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ МНОГОЛУЧЕВОГО РАДИОСИГНАЛА .....	100
<i>А.А. Галиев, А.И. Сулимов, А.В. Карпов</i> ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЧАСТОТНО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ СВОЙСТВ МНОГОЛУЧЕВОГО РАДИОКАНАЛА ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ СОГЛАСОВАННЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-ФАЗОВЫМ МЕТОДОМ .....	101

**Секция  
КИБЕРФИЗИЧЕСКИЕ И ИНФОКОММУНИКАЦИОННЫЕ  
СИСТЕМЫ**

<i>Р.Р. Зиядиев, О.Н. Шерстюков, Ю.С. Масленникова</i> ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКОГО КАБЕЛЯ .....	102
<i>А.Ф. Фахрутдинов, Д.Е. Чикрин, А.А. Егорчев</i> РАДИОТЕХНИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ СБОРА И ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОГО НЕИНВАЗИВНОГО МОНИТОРИНГА СОСТОЯНИЯ ЗДОРОВЬЯ ЧЕЛОВЕКА: ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ТРЕМОРА ГОЛОВЫ .....	103

*Е.Ю. Рябченко*

МИКРОКОНТРОЛЛЕРЫ MEGAWIN

СЕРИИ MG32F02 НА БАЗЕ ЯДРА CORTEX-M0 ..... 105

**Секция**

**РАДИОФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИРОДНЫХ СРЕД**

*Б.Ф. Зарипов*

ПРОГРАММНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ  
ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ПЛАСТОВ С АНОМАЛЬНЫМ  
ЗАТУХАНИЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ ПАССИВНОЙ  
НИЗКОЧАСТОТНОЙ СЕЙСМОРАЗВЕДКИ И ЧИСЛЕННОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ ..... 106

*Научное направление*

**ИССЛЕДОВАНИЯ МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ  
ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

**Секция**

**МЕДИЦИНСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

*А.Д. Биктимиров, Д.Р. Исламов,*

*Ш.З. Валидов, М.М. Юсупов, К.С. Усачев*

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ БЕЛКОВОГО ФАКТОРА  $\gamma_{\text{SxS}}$   
ПАТОГЕННОСТИ ЗОЛОТИСТОГО СТАФИЛОКОККА МЕТОДОМ  
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА ..... 107

*Н.С. Гараева, А.Г. Бикмуллин, Б.Ф. Фатхуллин, М.М. Юсупов,*

*Ш.З. Валидов, К.С. Усачев*

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ФАКТОРА  
СОЗРЕВАНИЯ РИБОСОМЫ P (RimP) С 30S СУБЪЕДИНИЦЕЙ  
ИЗ *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* ..... 108

*Н.С. Липачев, А.С. Двоеглазова, А.А. Садреева,*

*А.В. Аганов, М.Н. Павельев*

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ КОЛИЧЕСТВЕННОГО  
ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПЕРИНЕЙРОНАЛЬНЫХ  
СЕТЕЙ ..... 110

*Б.Р. Мингазов, А.В. Захаров*

ОПЫТ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРОЯВЛЕНИЙ  
НАРУШЕНИЯ ГОМЕОСТАЗА НЕЙРОНАЛЬНОЙ ТКАНИ ..... 112

<i>Д.А. Осетрина, Е.А. Семенова, М.О. Абрамова, А.Р. Юльметов, А.Г. Бикмуллин, Э.А. Клочкова, В.В. Клочков, Д.С. Блохин</i>	
СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АМИЛОИДОГЕННЫХ ПЕПТИДОВ СЕМЕНИ ЧЕЛОВЕКА МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА .....	113
<i>М.А. Садовникова, Ф.Ф. Мурзаханов, Г.В. Мамин, А.А. Форысенкова, И.В. Фадеева, М.Р. Гафуров</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА, ДОПИРОВАННОГО ИОНАМИ ГАДОЛИНИЯ, МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ЭПР.....	114
<i>А.Ф. Тимерова, В.В. Клочков, Л.Е. Никитина</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С МОДЕЛЬНЫМИ БИОЛОГИЧЕСКИМИ МЕМБРАНАМИ АНТИТРОМБОТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ В РАСТВОРЕ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР .....	115
<i>А.Р. Хакимзянова, А.В. Филиппов, А.В. Халиуллина</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ С ЛИПИДНОЙ СИСТЕМОЙ МЕТОДАМИ ЯМР .....	116
<i>Я. Хамдан, Т.А. Телегина, Н.И. Шамсутдинов, М.А. Марисов, П.В. Зеленихин, В.В. Семашко, А.С. Низамутдинов, А.А. Буглак</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА ДЛИТЕЛЬНОСТИ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА УФ-ДИАПАЗОНА СПЕКТРА НА КЛЕТКИ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА .....	117
<i>А.Ф. Шайдуллина, А.-Х.Г. Саади Ясин, Л.И. Савостина, А.Н. Туранов</i>	
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИИ 1,2-ДИ(4-ПИРИДИЛ)ЭТИЛЕНА .....	118

*Научное направление*  
**НАУЧНОЕ И МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ  
ПРАКТИКООРИЕНТИРОВАННОЙ ПОДГОТОВКИ УЧИТЕЛЯ  
В УСЛОВИЯХ СЕТЕВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВУЗА И ШКОЛЫ**

**Секция**  
**СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБУЧЕНИЯ  
СТУДЕНТОВ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ**

<i>Е.Ю. Фадеева, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова</i>	
ГРАЖДАНСКО-ПАТРИОТИЧЕСКОЕ ВОСПИТАНИЕ УЧАЩИХСЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ СРЕДСТВАМИ УЧЕБНОГО ПРЕДМЕТА «ФИЗИКА» .....	119

<i>Н.В. Тележников, Г.И. Гарнаева, Е.Г. Скобельцына</i> ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ШКОЛЬНИКОВ В УСЛОВИЯХ ИНДИВИДУАЛЬНО-ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОГО ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ.....	120
<i>Л.А. Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова</i> РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ К ВИРТУАЛЬНОМУ ЛАБОРАТОРНОМУ ПРАКТИКУМУ ПО ВОЛНОВОЙ ОПТИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО УГЛУБЛЕННОМУ ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ .....	121
<i>Е.Ю. Фадеева, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова</i> ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ .....	122
<i>Л.А. Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова</i> СОЗДАНИЕ КОМПЛЕКСА ВИРТУАЛЬНОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО УГЛУБЛЕННОМУ ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ .....	123
<i>Р.М. Мустафин</i> АНАЛИЗ УСПЕВАЕМОСТИ И КАЧЕСТВА ОБУЧЕНИЯ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ В СЛУЧАЕ АДАПТАЦИИ ИХ К ПРОЦЕССУ ОБУЧЕНИЯ В КФУ .....	124
<i>А.Ф. Зарипова</i> РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОГО ИНТЕРЕСА К ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ ВО ВНЕУРОЧНОЕ ВРЕМЯ У СЛАБОУСПЕВАЮЩИХ УЧАЩИХСЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ .....	125

*Основное научное направление*

**СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ  
ОРГАНИЧЕСКИХ, ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ  
И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

**Секция**

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ**

<i>И.В. Галкина, Ю.В. Бахтиярова, С.Р. Романов, Д.И. Бахтияров</i> СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОФУРОКСАНОВ .....	126
<i>Р.Н. Нагриманов</i> ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ, РАСЧЕТНЫЕ И КОМБИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ .....	127

<i>И.А. Гафитова, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова</i> НЕИНВАЗИВНОЕ ПРОТОЧНО-ИНЖЕКЦИОННОЕ АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ МАРКЕРОВ ЗАБОЛЕВАНИЙ В ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ .....	128
<i>Б.Х. Гафатуллин, В.А. Бурилов, И.С. Антипин</i> ННС-КОМПЛЕКСЫ ПАЛЛАДИЯ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ .....	129
<i>Д.Н. Болматенков, М.И. Ягофаров, Б.Н. Соломонов</i> ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНТАЛЬПИИ ИСПАРЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ: НОВЫЙ ПОДХОД .....	130
<i>М.Э. Шемахина, У.П. Урубкова, А.В. Немтарев, В.Ф. Миронов</i> 1,2-ОКСАФОСФОЛЕНА НА ОСНОВЕ ЦИКЛИЧЕСКИХ МОНОТЕРПЕНОИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ $\alpha,\beta$ -НЕПРЕДЕЛЬНЫЙ КЕТОННЫЙ ФРАГМЕНТ .....	131
<i>В.Г. Штырлин, Н.Ю. Серов, М.С. Бухаров, Э.М. Гилязетдинов, А.А. Крутиков, А.А. Мохамед, А.Р. Гарифзянов, И.И. Мирзаянов, М.А. Жернаков, А.В. Ермолаев, Н.С. Аксенин, К.В. Уразаева</i> НЕКОТОРЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ БИОНЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ .....	132
<i>Д.Н. Шуртик, Ю.И. Александрова, Л.И. Махмутова, А.А. Ахмедов, О.А. Мостовая, И.И. Стойков</i> ПИЛЛАР[N]АРЕНЫ: ОТ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНТИДОТОВ ДО КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ .....	133
<i>Р.А. Ларионов, М.А. Зиганин, С.А. Зиганина, А.Е. Климовицкий, Х.Р. Хаяров, И.Х. Ризванов</i> ТЕРМИЧЕСКИЕ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ОЛИГОПЕПТИДОВ .....	134
<i>Р.Р. Давлетишин, А.М. Гайнеев, Н.О. Кузнецов, И.В. Галкина</i> СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ АМИНОФОСФАБЕТАИНОВ И ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ .....	135
<i>А.А. Явишева, Р.М. Бейлинсон, Э.П. Медянцева</i> НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ В АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ БИОСЕНСОРАХ И ИММУНОАНАЛИЗЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ В МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ И ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ .....	136

<i>А.М.А. Мохамед, Ф.Б. Галиева, З.В. Ахметзянова, Д.А. Миронова, В.А. Бурилов, С.Е. Соловьева, И.С. Антипин</i>	
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГИПОКСИИ: НОВЫЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ АЗО-МЕТАЦИКЛОФАНОВ С КРАСИТЕЛЯМИ .....	137
<i>А.М. Димиев</i>	
ОКСИД ГРАФЕНА: МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ, СТРУКТУРА И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА .....	138
<i>А.В. Салин</i>	
ИТОГИ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ТРЕТИЧНЫХ ФОСФИНОВ С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ .....	139
<i>А.Н. Маланина, Ю.И. Кузин, Г.А. Евтюгин</i>	
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ДНК-СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОКСОРУБИЦИНА И ПОВРЕЖДЕНИЯ ДНК .....	140
<i>Е.А. Титов, А.В. Немтарев, Т.Н. Паширова, В.Ф. Миронов</i>	
ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ СОЛИ, СОДЕРЖАЩИЕ ФРАГМЕНТЫ ЖИРНЫХ КИСЛОТ И ТЕРПЕНОИДОВ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА .....	141
<i>Э.Н. Якупова, Г.К. Зиятдинова</i>	
НОВЫЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СПОСОБЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВАНОНОВ В ЦИТРУСОВЫХ СОКАХ .....	142
<i>А.А. Кузнецова, Д.В. Чачков, Я.А. Верецагина</i>	
ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ СОЕДИНЕНИЙ ТРЕХ- И ЧЕТЫРЕХКООРДИНИРОВАННОГО ФОСФОРА СО СВЯЗЯМИ P=O, P=S, P=Se И АРИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ .....	143
<i>А.М. Хабибрахманова, Э.С. Раббаниева, Л.З. Латыпова, А.Р. Курбангалиева</i>	
СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ ОПТИЧЕСКИ ЧИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА, ТИОЛОВ И ТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ .....	144
<i>Д.Г. Яхваров</i>	
НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ГОМОГЕННОЙ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА И ГЕНЕРИРОВАНИЯ ВОДОРОДА .....	145
<i>А.А. Фатыхова</i>	
ПРЕДСКАЗАНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ И ЕГО АНАЛОГОВ .....	147

<i>Э.Р. Газизуллина, Д.В. Брусницын, Э.П. Медянцева</i> ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И СИСТЕМ НА ОСНОВЕ КЛАСТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ИММУНОХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ АНТИДЕПРЕССАНТОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОДАХ .....	148
<i>А.М. Шинкарева, А.В. Немтарев, В.Ф. Миронов</i> ХИНОПИМАРОВАЯ И ДЕГИДРОХИНОПИМАРОВАЯ КИСЛОТЫ В СИНТЕЗЕ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ, ОБЛАДАЮЩИХ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ .....	149
<i>А.А. Фатхутдинова, Т.А. Мухаметзянов</i> НОВЫЕ КАЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДИКИ ИЗУЧЕНИЯ АНФОЛДИНГА И РЕФОЛДИНГА БЕЛКОВ .....	150
<i>В.Ю. Якимов, И.С. Низамов, И.Д. Низамов</i> РАЦЕМИЧЕСКИЕ СПИРТЫ В СИНТЕЗЕ ХИРАЛЬНЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ .....	151
<i>Р.А. Андрианов, Т.А. Мухаметзянов</i> ОЦЕНКА ЛИНЕЙНОЙ СКОРОСТИ РОСТА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗАРОДЫШЕЙ ПОЛИ-L-МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ .....	152

**Секция**  
**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ**  
**ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ**

<i>Д.Л. Дарземанова, С.И. Гильманшина</i> СПЕЦИФИКА ОБУЧЕНИЯ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫМ ПРЕДМЕТАМ ДЕТЕЙ МИГРАНТОВ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ .....	153
<i>А.Р. Камалеева</i> ДИДАКТИЧЕСКАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ ПРОЦЕССА ОБУЧЕНИЯ С ПОЗИЦИЙ КОГНИТИВНОЙ ДИДАКТИКИ .....	154
<i>С.С. Космодемьянская, И.Д. Низамов, Ю.И. Журавлева</i> АДАПТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ СОВРЕМЕННОГО УЧИТЕЛЯ ХИМИИ В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВИЗАЦИИ .....	155
<i>Е.О. Массарова, С.И. Гильманшина</i> ЦИФРОВЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПЛАТФОРМЫ КАК СРЕДСТВА ФОРМИРОВАНИЯ АКАДЕМИЧЕСКОЙ УСПЕШНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ .....	156
<i>Г.Ф. Мельникова</i> РАЗВИТИЕ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В СТРАНАХ СРЕДНЕЙ И ЮГО-ВОСТОЧНОЙ АЗИИ В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВИЗАЦИИ .....	157

<i>В.А. Миннахметова, С.И. Гильманишина</i> ФОРМИРОВАНИЕ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ У СТУДЕНТОВ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ОБУЧЕНИЯ ДИДАКТИКЕ ХИМИИ .....	158
<i>Р.Н. Сагитова</i> ВИРТУАЛЬНЫЙ ШКОЛЬНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ ЭКСПЕРИМЕНТ КАК ПЕДАГОГИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИНТЕНСИВНОГО ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ .....	159
<i>Ф.Д. Халикова</i> ИННОВАЦИОННАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ УЧИТЕЛЯ КАК РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ С ОДАРЕННЫМИ УЧАЩИМИСЯ .....	160

## УПРАВЛЕНИЕ КИНЕТИКОЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ПОЛОСТЯХ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Адель Ильдусович Гарифуллин, Ренат Хамитович Гайнутдинов,

Марат Актасович Хамадеев

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: adel-garifullin@mail.ru*

**Ключевые слова:** фотонные кристаллы, метаматериалы, электромагнитная масса электрона, энергия ионизации, атом гелия, кинетика химических реакций в ограниченном пространстве.

Такие новые среды, как фотонные кристаллы и метаматериалы, значительно усиливают взаимодействие света и вещества на наномасштабе [1, 2]. Как было недавно показано [3], энергия ионизации атомов, помещенных в вакуумные полости этих структур, может значительно модифицироваться в связи с усилением взаимодействия атомарных электронов с собственным полем излучения [4]. В этом процессе происходит изменение электромагнитной массы электрона, и впервые это взаимодействие проявляется явно. Рассматриваемый квантово-электродинамический эффект может быть одним из главных механизмов управления кинетикой химических реакций. В работе предлагается метод экспериментальной проверки эффекта. Описываемый метод основан на наблюдении сдвигов спектральных линий атомов гелия, закачанного в полости фотонного кристалла [5].

### Список литературы

1. Ultra-high tunable liquid crystal-plasmonic photonic crystal fiber polarization filter / M.F.O. Nameed et al. // *Optics Express*. – 2015. – Vol. 23. – P. 7007.
2. *Bykov V.P.* Spontaneous emission in a periodic structure / V.P. Bykov // *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 1972. – Vol. 35. – P. 269.
3. Quantum electrodynamics in photonic crystals and controllability of ionization energy of atoms / R.Kh. Gainutdinov et al. // *Physics Letters A*. – 2021. – Vol. 404. – P. 127407.
4. *Gainutdinov R.Kh.* Electron rest mass and energy levels of atoms in the photonic crystal medium / R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev, M.Kh. Salakhov // *Physical Review A*. – 2012. – Vol. 85. – P. 053836.
5. *Garifullin A.I.* Acceleration of Chemical Reactions in Hybrid One-Dimensional Photonic Crystals Based on High-Index Metamaterials / A.I. Garifullin, R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. – 2022. – Vol. 86. – P. S66.

## ОПТОМЕХАНИЧЕСКОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА С ПОМОЩЬЮ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙНИЯ

**Алмаз Рашитович Газизов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: almargazizov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** оптомеханическое охлаждение, комбинационное рассеяние, деполяризация, гармонический осциллятор, моделирование.

Оптическое охлаждение – задача нанофотоники, решение которой способствует развитию квантовой сенсорики и оптического контроля локальной температуры. Одним из механизмов оптического охлаждения является антистоксово комбинационное рассеяние (КР) [1]. Существующие методы превышения антистоксова рассеяния над стоксовым рассеянием используют различные резонансы для усиления антистоксова КР [2] или подавления стоксова КР [3]. Альтернативным способом комбинационного охлаждения может быть использование резонаторной оптомеханики [4]. Проведено моделирование оптомеханических эффектов молекул в плазмонном нанорезонаторе с использованием модели двух связанных осцилляторов в рамках формализма тензорной функции Грина [5, 6]. Из-за поглощения света имеется порог индуцированной скорости релаксации.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (№ 21-72-00052).*

### Список литературы

1. *Bahl G.* Raman cooling in a semiconductor / G. Bahl // *Nature Photonics*. – 2016. – Vol. 10. – P. 566–567.
2. Resolved-sideband Raman cooling of an optical phonon in semiconductor materials / J. Zhang, Q. Zhang, X. Wang et al. // *Nature Photonics*. – 2016. – Vol. 10. – P. 600–605.
3. *Chen Y.-Ch.* Raman cooling of solids through photonic density of states engineering / Y.-Ch. Chen, G. Bahl // *Optica*. – 2015. – Vol. 2. – P. 893–899.
4. *Aspelmeyer M.* Cavity optomechanics / M. Aspelmeyer, T.J. Kippenberg, F. Marquardt // *Reviews of Modern Physics*. – 2014. – Vol. 86. – P. 1391.
5. *Gazizov A.R.* Tip-modified Raman-tensor of a porphine molecule / A.R. Gazizov, M.Kh. Salakhov, S.S. Kharintsev // *Journal of Raman Spectroscopy*. – 2020. – Vol. 51. – P. 442–451.
6. *Gazizov A.R.* Classical perspective of optomechanical Raman cooling of a vibration / A.R. Gazizov, M.Kh. Salakhov // *Optica Advanced Photonics Congress 2022*. – 2022. – Art. JW3A.29.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ПИРОХЛОРА  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  С УЧЕТОМ СЛУЧАЙНЫХ  
ДЕФОРМАЦИЙ РЕШЕТКИ**

**Вера Вадимовна Клековкина, Нурбулат Мирбулатович Абишев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: vera.klekovkina@gmail.com*

**Ключевые слова:** редкоземельные пирохлоры, энергетический спектр, кристаллическое поле, случайные деформации.

В данной работе мы провели моделирование спектральных и термодинамических свойств пирохлора  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ , предполагая присутствие точечных дефектов решетки. При наличии дефектов кристаллической решетки основной электронный дублет иона  $\text{Pr}^{3+}$  расщепляется вследствие локального понижения симметрии. Величина расщепления определяется локальной деформацией, которая носит случайный характер, и параметрами электрон-деформационного взаимодействия. Функция распределения случайных деформаций с учетом упругой анизотропии представляет собой обобщенное распределение Лоренца для шести независимых компонент тензора деформаций кубического кристалла. Величина параметра, характеризующего ширину функции распределения, которая зависит от концентрации и типа дефектов, рассматривалась нами в качестве варьируемого подгоночного параметра. Квантостатистические средние значения вычислялись для фиксированных значений компонент тензора деформаций и температуры, и далее усреднялись с функцией распределения случайных деформаций. Использование теории случайных деформаций позволило нам качественно воспроизвести низкоэнергетический профиль спектра неупругого рассеяния нейтронов и особенности в температурных зависимостях теплоемкости  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  при низких температурах.

*Авторы благодарны Б.З. Малкину за научное руководство и обсуждение полученных результатов.*

*Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда № 19-12-00244.*

## ОБЗОР МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ РАСЧЕТОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

**Константин Михайлович Макушин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: k.makushin@rqc.ru*

**Ключевые слова:** квантовые вычисления, квантовый компьютер, оптимизация вычислений, вариационные алгоритмы.

Минимизация ресурсоемкости квантовых алгоритмов является одной из важнейших задач в области квантовых вычислений. В частности, для вариационных квантовых алгоритмов, часто используемых в задачах моделирования простейших электронных систем и молекул [1], появляется все больше различных методик их оптимизации. Среди них можно выделить несколько групп: методы, которые позволяют подобрать наиболее подходящую к конкретной задаче пробную волновую функцию (анзац), к примеру, ADAPT-VQE [1]; методы, оптимизирующие количество слагаемых в гамильтониане задачи, часто за счет учета внутренних симметрий физической системы [2]; методы, позволяющие уменьшить количество используемых кубитов, например, тэйперинг кубитов (qubit tapering) [3], также опирающиеся на симметрии, которые характерны для фермионных систем.

### Список литературы

1. *Sapova M.D.* Variational quantum eigensolver techniques for simulating carbon monoxide oxidation / M.D. Sapova, A.K. Fedorov // *Communications Physics*. – 2022. – Vol. 5. – No. 1. – P. 1–13.
2. *Changsu C.* Progress toward larger molecular simulation on a quantum computer: Simulating a system with up to 28 qubits accelerated by point-group symmetry / C. Changsu, H. Jiaqi // *Physical Review A*. – 2022. – Vol. 105. – No. 6.
3. *Bravyi S.* Tapering off qubits to simulate fermionic Hamiltonians / S. Bravyi. – URL: <https://arxiv.org/pdf/1701.08213.pdf> (date accessed: 05.01.2023).

**УНИФИКАЦИЯ И РАСШИРЕНИЕ МЕТОДА ФАКТОРИЗАЦИИ  
ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТОЧНЫХ И УСЛОВНО ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВ-  
НЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА**

**Айрат Альбертович Хамзин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: airat.khamzin1976@gmail.com*

**Равиль Рашидович Нигматуллин**

*Россия, Казань, Казанский национальный исследовательский  
технический университет имени А.Н. Туполева – КАИ  
Russia, Kazan, Kazan National Research Technical University  
named after A.N. Tupolev – KAI  
E-mail: renigmat@gmail.com*

**Ключевые слова:** уравнение Шредингера, метод факторизации, суперсимметричная квантовая механика, точно и условно точно решаемые модели.

В данной работе авторами разработан новый алгоритм применения метода факторизации Шредингера – Инфилда – Хулла [1–2] к задаче вычисления спектра точно разрешимых (ТР) и условно точно разрешимых потенциалов (УТР). Предлагаемый алгоритм позволяет унифицировать и расширить возможности метода факторизации для построения точно решаемых потенциалов. Новый подход продемонстрирован вычислением собственных значений ТР потенциалов, построенных с помощью одной функции в виде многочлена типа Лорана и в виде полинома второго порядка от множества линейно независимых функций, и легко воспроизводит известные точные решения. Алгоритм позволяет существенно упростить схему расчета спектра, параметров суперпотенциала, а также ограничительные условия на параметры потенциала в случае УТР потенциалов. Показано, что форма энергетического спектра инвариантна к числу функций, из которых формируется потенциал, а определяется типом дифференциальных уравнений, которым подчиняются потенциал-образующие функции.

**Список литературы**

1. *Schrödinger E.* A method of determining quantum-mechanical eigenvalues and eigenfunctions / E. Schrödinger // Proceedings of the Royal Irish Academy. – 1940. – Vol. XLVI (A). – P. 9–16.
2. *Infeld L.* The factorization method / L. Infeld, T.E. Hull // Reviews of Modern Physics. – 1951. – Vol. 23. – P. 21.

## ВЛИЯНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ НА КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕОБЫЧНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ В РАМКАХ ВАРИАЦИОННОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Файль Мансурович Сираев, Максим Викторович Авдеев,  
Юрий Николаевич Прошин

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: siraev.f@gmail.com*

**Ключевые слова:** необычная сверхпроводимость, вариационная теория возмущений.

Вариационная теория возмущений широко применяется для описания различных систем [1], в частности в области физики фазовых переходов [2]. Нами предложен метод для расчета температурной зависимости сверхпроводящего параметра порядка в необычных сверхпроводниках на основе вариационной теории возмущений. В нашей теоретической модели мы рассматриваем сверхпроводящее спаривание в  $d$ -wave канале.

В отличие от стандартных подходов, такая процедура позволяет рассматривать флуктуационную область, где отсутствует дальний порядок (т. е. среднее значение параметра порядка  $\langle \Delta(\varphi) \rangle = 0$ ). Однако в рамках предложенной схемы оказывается возможным найти и проанализировать температурную и угловую зависимость квадрата дисперсии параметра порядка  $\langle \Delta^2(\varphi) \rangle$ :

$$\langle \Delta^2(\varphi) \rangle \sim \int D[\Delta, \Delta] \Delta(\varphi) \Delta(\varphi) \exp\{-F[\Delta, \Delta]/T\},$$

где  $F$  – эффективная свободная энергия, полученная в рамках схемы вариационной теории возмущений.

Результаты численных расчетов показывают, что вклад в угловую зависимость вносят и компоненты высших порядков.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

### Список литературы

1. *Sissakian A.* Variational perturbation theory / A. Sissakian, I. Solovtsov // International Journal of Modern Physics A. – 1994. – Vol. 9. – No. 12. – P. 1929–1999.
2. *Kleinert H.* Strong-coupling behavior of  $\varphi^4$  theories and critical exponents / H. Kleinert // Physical Review D. – 1998. – Vol. 57. – No. 4. – P. 2264.

**РАСЧЕТ В РАМКАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ СВОЙСТВ И ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА  $KFeSe_2$**

**Максим Дмитриевич Кузнецов, Айрат Газинурович Киямов,  
Дмитрий Альбертович Таюрский**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: MDKuznecov@stud.kpfu.ru*

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, сильно коррелированные электронные системы.

Соединения  $AFeX_2$  кристаллизуются в моноклинную структуру с пространственной группой  $C2/c$  [1]. Основным мотивом кристаллической структуры является цепочка тетраэдров  $[FeX_4]$ , имеющих общее ребро и ориентированных вдоль кристаллографической оси  $c$  [1]. Цепочки характеризуются коротким расстоянием Fe-Fe (2,815 Å) [1]), ненамного превышающим расстояние Fe-Fe металлического железа (2,48 Å). Предыдущие эксперименты по дифракции нейтронов на порошкообразных образцах [1] показали, что  $KFeSe_2$  является трехмерным антиферромагнетиком с  $T_N = 310$  К.

В ходе данной работы были выполнены ab-initio расчеты колебательных свойств соединения  $KFeSe_2$  с использованием теории функционала плотности. Полная и поэлементная плотности фононных состояний (PDOS) рассчитывались в рамках прямого подхода гармонического приближения. Мы использовали фононную плотность состояний для расчета вклада решетки в теплоемкость. Рассчитанная фононная плотность состояний показывает большое количество высокочастотных колебательных мод атомов Fe и Se, что сильно ограничивает применение модели Дебая для анализа термодинамических свойств  $KFeSe_2$ .

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.*

**Список литературы**

1. Bronger W. The antiferromagnetic structures of  $KFeS_2$ ,  $RbFeS_2$ ,  $KFeSe_2$ , and  $RbFeSe_2$  and the correlation between magnetic moments and crystal field calculations / W. Bronger, A. Kyas, P. Müller // Journal of Solid State Chemistry. – 1987. – Vol. 70. – Is. 2. – P. 262–270.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ГИГАНТСКИМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ ТИПА РАШБЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

**Александр Александрович Евсеев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: alexander-alexandrovich-evseev@mail.ru*

**Ключевые слова:** расчет из первых принципов, гетероструктура, сегнето-электрик, расщепление Рашбы.

Желательно, чтобы материалы, используемые в устройствах спинтроники, имели большое и идеальное спин-орбитальное расщепление типа Рашбы. Недавно было предложено сочетать легирование упорядоченной поверхности и инженерии интерфейса [1]. Эффектом Рашбы называют спин-орбитальное расщепление, вызванное нарушением инверсионной симметрии, на поверхностях/интерфейсах [2].

В данной работе исследовались пленочные гетероструктуры с различным сочетанием компонентов, для которых предполагалось наличие спин-орбитального расщепления типа Рашбы [2, 3]. У данных гетероструктур из-за градиента плотности электронов на границах раздела возникает токовый вихрь, связанный со спинами электронов. Были изучены структурные и электронные свойства этих систем. Был произведен электронный расчет DFT+U с учетом спин-орбитальной связи. Все вычисления проводились с использованием программы VASP [4].

Для гетероструктур CuO/Cu, Al/Si, Cu<sub>3</sub>N/Cu, Bi/BaTiO<sub>3</sub> и Bi/PbTiO<sub>3</sub> рассчитаны зонные структуры с учетом спин-орбитального взаимодействия и на их основе получены значения параметра Рашбы  $\alpha R$ . Исследовано влияние межфазных контактных слоев, параметров разбивки, толщины, полярности интерфейса и сегнетоэлектрической поляризации на значения параметра Рашбы.

### Список литературы

1. *Chen M.* Prediction of giant and ideal Rashba-type splitting in ordered alloy monolayers grown on a polar surface / M. Chen, F. Liu // *National Science Review*. – 2021. – Vol. 8. – No. 4.
2. *Рашба Э.И.* Симметрия энергетических зон в кристаллах типа вюрцита. II. Симметрия зон с учетом спиновых взаимодействий / Э.И. Рашба, В.И. Шека // *Физика твердого тела: сборник статей (Ленинград)*. – 1959. – Т. II. – С. 162–176.
3. *Cavaglia A.D.* Tunable Rashba Spin-Orbit Interaction at Oxide Interfaces / A.D. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio et al. // *Physical Review Letters*. – 2004. – Vol. 104. – P. 126803.
4. *Kresse G.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – P. 11169–11186.

## ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Айгуль Ильхамовна Шамсиева

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: aigul-shamsieva@mail.ru

**Ключевые слова:** полибутадиен, температура стеклования, молекулярно-динамическое моделирование.

На сегодняшний день значение полимеров чрезвычайно велико. Полибутадиен – это синтетический эластичный полимер, обладающий высокой износостойкостью. На долю полибутадиенового каучука приходится около четверти общего мирового потребления синтетических каучуков. В основном он используется в производство шин, а также применяется в качестве добавки для улучшения ударной вязкости пластмасс [1]. Одним из ключевых параметров при использовании полимерных материалов является температура стеклования, которая определяется химическим составом и строением полимерных цепей. Данный параметр не является жестко определенной величиной, поскольку переход в стеклообразное состояние происходит в довольно широком диапазоне температур [2]. Трудность определения температуры стеклования можно объяснить тем фактом, что полимерные структуры содержат не только аморфные области, но и кристаллические. Кроме того, для одной и той же структуры свойства могут зависеть от распределения повторяющегося звена. Компьютерное моделирование может помочь в изучении связи между объемными свойствами и межмолекулярными взаимодействиями и, таким образом, приблизить нас к пониманию явления стеклования. В данной работе исследовался монодисперсный аморфный цис-1,4-полибутадиен. Для оценки температуры стеклования было использовано несколько методов: смоделированная дилатометрия, гиперболическая модель, предложенная Уоттсом и Бэконом [3], а также температура стеклования была оценена по зависимостям коэффициента теплового расширения, полной энергии и теплоемкости от температуры. С использованием данных методов была оценена температура стеклования в диапазоне от 10 К до 800 К при давлении до 100 МПа. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

### Список литературы

1. Li K. Aging constitutive model of hydroxyl-terminated polybutadiene coating in solid rocket motor / K. Li, J. Zheng, J. Zhi et al. // *Acta Astronautica*. – 2018. – No. 151. – P. 555–562.
2. Makhyanov N. Glass Transition, Crystallisation, and Melting Temperatures and the Microstructure of Butadiene Rubbers / N. Makhyanov, E.V. Temnikova // *International Polymer Science and Technology*. – 2010. – No. 37. – P. 17–20.
3. Lecoutre G. Hugoniot and Direct Shock Simulations in cis-1,4-Polybutadiene Melts / G. Lecoutre, C.A. Lemarchand, L. Soulard et al. // *Macromolecular Theory and Simulations*. – 2021. – No. 30. – P. 1–13.

## О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Руслан Фаритович Ахмеров, Ирина Ивановна Гумарова,

Олег Владимирович Недопекин

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ruslan.ahmerov123@gmail.com*

**Ключевые слова:** машинное обучение, молекулярная динамика, теория функционала плотности, металлы.

Потенциалы машинного обучения (MLP) необходимы, в частности, для изучения фундаментальных механизмов деформации и разрушения в металлах и сплавах, поскольку соответствующие дефекты (дислокации, трещины и т. д.) превышают масштабы, доступные методам из первых принципов. MLP обучается на основе теории функционала плотности (DFT) и хорошо предсказывает важные с точки зрения металлургии структуры дислокаций и трещин [1, 2]. Алюминий и его сплавы чаще всего используются в качестве конструкционных материалов благодаря их специфическим свойствам, таким, как малый вес, низкие энергозатраты на переплавку и возможность практически полной переработки [3]. Машинное обучение в рамках нейронной сети Белера – Парринелло используется для создания широко применимого потенциала для чистого алюминия (Al) ГЦК (fcc), ОЦК (bcc) и ГПУ (hcp). В работе были проведены сравнения с существующими потенциалами, такими, как EAM, MEAM и ANI-Al. Было продемонстрировано, что единый потенциал машинного обучения может быть использован для описания широкого спектра явлений, необходимых для металлургических исследований.

### Список литературы

1. *Stricker M.* Machine learning for metallurgy II. A neural-network potential for magnesium / M. Stricker, B. Yin, E. Mak et al. // *Physical Review Materials*. – 2020. – No. 4. – P. 103602.
2. *Liyanage M.* Machine learning for metallurgy V: A neural-network potential for zirconium / M. Liyanage, D. Reith, V. Eyert et al. // *Physical Review Materials*. – 2022. – No. 6. – P. 063804.
3. *Lee B.-J.* Semiempirical atomic potentials for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, and Pb based on first and second nearest-neighbor modified embedded atom method / B.-J. Lee, J.-H. Shim, M.I. Baskes // *Physical Review B*. – 2003. – No. 68. – P. 144112.
4. *Smith J.S.* Automated discovery of a robust interatomic potential for aluminum / J.S. Smith, B. Nebgen, N. Mathew et al. // *Nature Communications*. – 2021. – No. 12. – P. 1257.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ДОПИРОВАННОГО Gd $\beta$ -ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА МЕТОДАМИ ТФП

Регина Мидхатовна Бурганова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: bur.regina@gmail.com

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, теория функционала плотности,  $\beta$ -трикальцийфосфат, допирование.

Бета-трикальцийфосфат ( $\beta$ -ТКФ)  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  – материал, известный благодаря своей превосходной совместимости с биологическими тканями [1].

Допирование  $\beta$ -ТКФ ионами редкоземельных металлов позволяет улучшить его свойства и поэтому расширить области его практического применения. Механизм создания дополнительной функциональности материала связан со знанием того, как примесный ион размещается в кристаллической решетке. Поэтому целью данной работы было изучение локальной структуры допированного Gd  $\beta$ -ТКФ и построение модели, согласно которой происходит замена ионов кристаллической решетки  $\beta$ -ТКФ ионами Gd методами ТФП.

В первую очередь, была смоделирована элементарная ячейка чистого  $\beta$ -ТКФ, обладающая тригональной пространственной группой симметрии  $R\bar{3}c$  и содержащая пять уникальных позиций атомов Ca [2], которые могут замещаться ионами Gd. Поскольку ионы Ca и Gd гетеровалентны, для сохранения нейтральности замена будет происходить по следующей схеме:  $3\text{Ca}^{2+} \rightarrow 2\text{Gd}^{3+} + V$ , где  $V$  – это вакансия.

Также известно, что ионы Gd размещаются только в позициях  $\text{Ca}_1$ – $\text{Ca}_3$  [3], а вакансии – в позициях  $\text{Ca}_4$  [4]. Таким образом, для концентрации 0,73 at % Gd из всевозможного числа существует девять сценариев допирования, которые были смоделированы и определены наиболее вероятные.

### Список литературы

1. Dorozhkin S.V. Biological and medical significance of calcium phosphates / S.V. Dorozhkin, M. Epple // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2002. – No. 41 (17). – P. 3130–3146.
2. Yin X.  $\alpha$ - and  $\beta$ -tricalcium phosphate: A density functional study / X. Yin, M.J. Stott, A. Rubio // *Physical Review B*. – 2003. – No. 68 (20). – P. 205205.
3. Bessiere A. Site occupancy and mechanisms of thermally stimulated luminescence in  $\text{Ca}_9\text{Ln}(\text{PO}_4)_7$  (Ln = lanthanide) / A. Bessiere et al. // *Acta materialia*. – 2012. – No. 60 (19). – P. 6641–6649.
4. Vagapova E.A. Combined spectroscopic and DFT studies of local defect structures in beta-tricalcium phosphate doped with Nd (III) / E.A. Vagapova et al. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – No. 877. – P. 160305.

**АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ  
И ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ DFT**

**Садех Кавиани**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: sadegh\_kaviani2000@yahoo.com*

**Ключевые слова:** DFT, биосенсор, двумерная наноструктура.

В работе представлен подробный анализ недавних достижений методов теории функционала плотности (DFT) для приложений двумерных наноструктур (2DN) в биомедицинских и энергетических областях, таких, как биосенсоры, металло-ионные батареи и устройства для хранения водорода. Биосенсоры играют важную роль во многих сообществах, например, они используются правоохранительными органами для обнаружения запрещенных наркотиков или медицинскими организациями для удаления тяжелых металлов из организма человека и животных при отравлениях. Кроме того, поиск высокоэффективных материалов для хранения и преобразования энергии в настоящее время рассматривается как важный подход к решению энергетического кризиса. Методы DFT – это мощные инструменты для моделирования и проектирования материалов, которые могут предоставить результаты со значительной точностью. Итак, в работе представлено, как расчеты DFT можно использовать для исследований 2DN в качестве потенциальных биосенсорных устройств или систем накопления энергии. Также проведено очень краткое обсуждение свойств биосенсоров и накопителей энергии. Наконец, мы сделали подробный анализ наших недавних работ, в которых расчеты DFT использовались, чтобы предложить некоторые 2DN для приложений биодатчиков и устройств хранения энергии.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».*

## КРИТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ДИБОРИДА МАГНИЯ

Руслан Германович Батулин<sup>1</sup>, Игорь Анатольевич Руднев<sup>1,2</sup>,  
Савелий Артемович Хохорин<sup>1</sup>, Айрат Газинурович Киямов<sup>1</sup>,  
Сергей Владимирович Покровский<sup>1,2</sup>, Светлана Владимировна Веселова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University

<sup>2</sup> Россия, Москва, Национальный исследовательский ядерный  
университет «МИФИ»

Russia, Moscow, National Research Nuclear University MEPhI  
E-mail: tokamak@yandex.ru

**Ключевые слова:** высокотемпературная сверхпроводимость, магнитометрия, критический ток.

Совершенствование технологии изготовления гибких композитов на основе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) позволяет в настоящее время использовать в ускорителях нового поколения сверхпроводящие магниты на основе ВТСП. Среди них композиты на основе диборида магния, обладая  $T_c \approx 39$  К [1] и плотностью критического тока  $J_c \sim 10^5$  А/см<sup>2</sup> ( $T = 4,2$  К,  $H = 1,5$  Тл) [2], являются перспективным материалом для практических приложений. Однако существующие промышленные композиты на основе диборида магния могут иметь ферромагнитную матрицу из Fe и Ni, затрудняющую исследования их критических характеристик [3]. В данной работе намагниченность композита MgB<sub>2</sub> была измерена методом вибрационной магнитометрии при различных температурах в интервале от 5 до 45 К и магнитных полях до 5 Тл. Установлено, что на кривую намагничивания  $M(H)$  влияет ферромагнитный отклик металлической матрицы. Учен ферромагнитный вклад и выделены петли намагниченности, обусловленные диамагнитным вкладом сверхпроводящей фазы MgB<sub>2</sub>. Получены зависимости  $J_c(H)$  при различных температурах.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10088.*

### Список литературы

1. Nagamatsu J. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride / J. Nagamatsu, N. Nagagawa, T. Muranaka et al. // Nature. – 2001. – Vol. 410. – No. 6824. – P. 63–64.
2. Putri W.B.K. Reducing delamination in MgB<sub>2</sub> films deposited on Hastelloy tapes by applying SiC buffer layers // W.B.K. Putri, B. Kang, P.V. Duong et al. // Thin Solid Films. – 2015. – Vol. 590. – P. 80–83.
3. Abin D.A. Magnetic and transport properties of HTS MgB<sub>2</sub> wires / D.A. Abin, N.A. Mineev, M.A. Osipov et al. // Journal of Physics. Conference series. – 2016. – Vol. 747. – P. 012023.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОЭЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ $\text{LiYbF}_4$

Георгий Юрьевич Андреев, Ирина Владимировна Романова

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ujif28@mail.ru*

**Ключевые слова:** редкоземельные ионы, физика магнитных явлений, физика конденсированного состояния, физика низких температур.

Редкоземельные двойные фториды  $\text{LiRF}_4$  ( $R = \text{Y, Gd-Lu}$ ) представляют интерес для физики дипольного магнетизма.  $\text{LiYbF}_4$  является дипольным антиферромагнетиком, магнитные моменты ионов  $\text{Yb}^{3+}$  упорядочиваются в плоскости (001),  $T_N = 130$  мК, кристаллическая структура относится к группе симметрии  $I4_1/a$  [1].

Монокристаллы выращены методом Бриджмена – Стокбаргера, микроразмерные кристаллические порошки синтезированы спеканием. Намагниченность образцов измерялась на вибрационном магнитометре VSM установки PPMS в пределах температур 2–300 К и магнитных полей до 9 Тл, магнитострикция измерялась емкостным dilatометром [2] также на PPMS. Теоретический анализ проведен методом диагонализации одноионного гамильтониана иона  $\text{Yb}^{3+}$  в полном базисе электронных состояний свободного иона [3].

Получено качественное и количественное согласие расчетов с результатами измерений настоящей работы и работы [1].

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-22-00257).*

### Список литературы

1. Babkevich P. Neutron spectroscopic study of crystal-field excitations and the effect of the crystal field on dipolar magnetism in  $\text{LiRF}_4$  ( $R = \text{Gd, Ho, Er, Tm, and Yb}$ ) / P. Babkevich et al. // Physical Review B. – 2015. – Vol. 92. – Is. 14. – Art. 144422.
2. Abe S. A compact capacitive dilatometer for thermal expansion and magnetostriction measurements at millikelvin temperatures / S. Abe et al. // Cryogenics. – 2012. – Vol. 52. – P. 452–456.
3. Romanova I.V. Magnetic and magnetoelastic properties of non-conducting rare-earth single crystals  $\text{LiLnF}_4$  ( $\text{Ln} = \text{Tm, Tb, Ho, Dy}$ ) (review) / I.V. Romanova, M.S. Tagirov // Magnetic Resonance in Solids. – 2019. – Vol. 21. – Art. 19412.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ЯДЕРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВАКАНСИОННЫХ ЦЕНТРОВ В КРИСТАЛЛАХ hBN

**Фадис Фанилович Мурзаханов, Маргарита Александровна Садовникова,  
Георгий Владимирович Мамин, Булат Фаритович Габбасов,  
Марат Ревгеревич Гафуров, Ирина Николаевна Грачева**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: murzakhanov.fadis@yandex.ru*

**Ключевые слова:** гексагональный нитрид бора, оптическая поляризация, центры окраски, вакансии бора, электрон-ядерное взаимодействие, электронный парамагнитный резонанс.

Концепция оптически адресуемых спиновых состояний дефектов в широкозонных полупроводниковых материалах успешно применяется для развития квантовых технологий [1]. Недавно обнаруженная отрицательно заряженная вакансия бора ( $V_B^-$ ) в гексагональном нитриде бора (hBN) потенциально позволяет перенести эту концепцию на атомарно-тонкие слои благодаря ван-дер-ваальсовой природе кристалла [2]. В данной работе мы экспериментально определили все члены спинового гамильтониана  $V_B^-$ , отражающие взаимодействия с тремя ближайшими атомами азота, с помощью электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и высокочастотного ( $\nu_{\text{СВЧ}} = 94$  ГГц) двойного электрон-ядерного резонанса (ДЭЯР). Установлены симметрия, анизотропия и главные значения соответствующих сверхтонких взаимодействий (СТВ), а также константа ядерной квадрупольной связи ( $A_{\perp} = 45,5 \pm 1$  МГц,  $A_{\parallel} = 87 \pm 0,5$  МГц,  $C_q = 1,96$  МГц с наличием параметра ромбичности  $\eta = (P_{xx} - P_{yy}) / P_{zz} = -0,07$ ). Используя подход, основанный на линейной комбинации атомных орбиталей и экспериментальных значениях СТВ, мы обнаружили, что почти вся спиновая плотность ( $\approx 84\%$ ) спина электрона  $V_B^-$  локализована на трех ближайших ядрах азота. Полученные данные являются прямой экспериментальной демонстрацией локализации спина  $V_B^-$  в монослое hBN.

*Исследование выполнено за счет гранта РФФИ (проект № 20-72-10068).*

### Список литературы

1. *Awschalom D.D. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins / D.D. Awschalom et al. // Nature Photonics. – 2018. – Vol. 12. – No. 9. – P. 516–527.*
2. *Suter D. Optical detection of magnetic resonance / D. Suter // Magnetic Resonance. – 2020. – Vol. 1. – No. 1. – P. 115–139.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОКТАКАЛЬЦИЙФОСФАТОВ И ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТОВ МЕТОДАМИ ЭПР

Дарья Владимировна Шуртакова, Маргарита Александровна  
Садовникова, Георгий Владимирович Мамин, Марат Ревгеревич Гафуров  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: darja-shurtakva@mail.ru*

**Ключевые слова:** фосфаты кальция, электронный парамагнитный резонанс, биомедицинские материалы.

Синтетические октакальцийфосфат (ОКФ) и трикальцийфосфат (ТКФ) широко используются для восстановления и ускорения регенерации костной ткани. Примеси в ОКФ и ТКФ меняют физико-химические свойства таких препаратов. Целью данной работы является исследование примесных центров в номинально чистых порошках ОКФ и ТКФ методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

Образцы ОКФ и ТКФ были синтезированы в Институте металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова методом осаждения из коллоидных растворов [1]. Спектры ЭПР получены на спектрометре Elexsys-580/680 в X- и W-диапазонах при комнатной температуре после рентгеновского облучения. Для описания спектров ЭПР использовали модуль “Easyspin” для “MatlabR2010a” (TheMathWorksInc.).

Порошковый спектр ЭПР ТКФ в X-диапазоне состоит из трех линий. Данные линии отнесены к азотному центру ( $I = 1$ ), который мог попасть в образцы в ходе реакции синтеза из азотсодержащих реагентов. Спектр описывается параметрами спинового гамильтониана:  $g_x = 2,0032$ ,  $g_y = 2,0024$ ,  $g_z = 1,9985$ ,  $A_x = 3,3$  мТл,  $A_y = 4$  мТл,  $A_z = 6,7$  мТл. При этом (согласно нашему описанию спектра ЭПР ОКФ) азотный центр имеет параметры:  $g_{\parallel} = 2,0035$ ,  $g_{\perp} = 2,0014$ ;  $A_{\parallel} = 2,5$  мТл,  $A_{\perp} = 2,0$  мТл. Существенная разница в параметрах спинового гамильтониана для азотных центров в ОКФ и ТКФ, вероятно, связана с их различным локальным окружением.

*Работа поддержана госзаданием на НИР для КФУ (проект FZSM-2022-0021).*

### Список литературы

1. Komlev V.S. Bioceramics composed of octacalcium phosphate demonstrate enhanced biological behavior / V.S. Komlev et al. // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2014. – Vol. 6. – No. 19. – P. 16610–16620.

**НЕТЕПЛОВАЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ РЕДУКЦИЯ  
КОЭРЦИТИВНОГО ПОЛЯ В ТОНКИХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ  
L1<sub>0</sub>-ФАЗЫ FePt и FePt<sub>0.84</sub>Rh<sub>0.16</sub>**

**Андрей Вячеславович Петров**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: flypetrov@yandex.ru*

**Ключевые слова:** тонкие пленки, термоассистируемая магнитная запись, сверхбыстрое оптическое размагничивание, депиннинг.

Выполнены исследования времяразрешенного магнитооптического эффекта Керра на тонких эпитаксиальных пленках L1<sub>0</sub>-фазы соединения FePt и твердого раствора FePt<sub>0.84</sub>Rh<sub>0.16</sub> на подложках MgO (001) с перпендикулярной магнитной анизотропией. Изучена эволюция намагниченности и петель гистерезиса на малых (100 фс – 1 пс) и больших (1–20 мс) временных масштабах после возбуждения фемтосекундным световым импульсом. Показано, что такая накачка приводит к быстрому, короче 1 пс, размагничиванию, не сопровождающемуся уменьшением коэрцитивного поля. При увеличении частоты следования импульсов накачки с 50 Гц до 1000 Гц проявляется долгоживущее фотоиндуцированное состояние с малой коэрцитивностью, но той же намагниченностью. Величина коэрцитивного поля восстанавливается на масштабе порядка 10 мс. Сопоставление с данными статической магнитометрии говорит о нетепловой природе уменьшения коэрцитивности, так как температура восстанавливается спустя примерно 2 нс от импульса накачки.

Так как процесс перемагничивания сплошной тонкой пленки с перпендикулярной магнитной анизотропией происходит за счет движения доменных стенок, а коэрцитивность связана с их пиннингом, полагаем, что долгоживущее состояние с редуцированной коэрцитивностью обусловлено возбуждением фемтосекундным импульсом накачки акустической стоячей волны. Последняя, ввиду рекордных значений константы магнитоупругого взаимодействия, повышает энергию магнитной подсистемы и обеспечивает преодоление доменными стенками потенциальных барьеров, отвечающих пиннингу на дефектах, при меньших значениях внешнего магнитного поля.

**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И МИКРОМАГНИТНОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ  
ТОНКОЙ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ  $L1_0$ -ФАЗЫ FePd  
И ИСКУССТВЕННОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА FePd /W/ FePd**

**Михаил Валерьевич Пасынков**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Mike\_p95@mail.ru*

**Ключевые слова:** тонкие пленки, магнетизм, антиферромагнетики.

Ферромагнитные тонкопленочные трехслойные структуры с перпендикулярной магнитной анизотропией, состоящие из двух слоев ферромагнетиков, разделенных немагнитным слоем, могут быть использованы в качестве материалов для устройств энергонезависимой магнитной памяти сверхвысокой емкости. В работе приводятся результаты моделирования кривых перемагничивания и доменной структуры в тонких пленках сплава  $L1_0$ -FePd и искусственном антиферромагнетике на его основе.

Измерения кривых намагничивания одиночной тонкой пленки FePd и трехслойной гетероструктуры FePd /W/ FePd свидетельствуют об антиферромагнитной связи между магнитными слоями в гетероструктуре. Получены оценки на величины константы одноосной магнитной анизотропии  $K_u$  и параметра обменной связи  $J$ .

Расчеты проводились с использованием программы для микромагнитного моделирования MuMax3 [1]. Кривые намагничивания, полученные в результате моделирования, при поле, приложенном в направлении легкой оси, совпадающей с нормалью к пленке, качественно воспроизводят результаты измерений как для одиночной пленки FePd, так и гетероструктуры FePd /W/ FePd при комнатной температуре. Различия, на наш взгляд, могут быть связаны с тем, что моделирование подразумевает температуру 0 К. Показано, что размагничивание гетероструктуры в области малых полей и двухпетлевая кривая гистерезиса обусловлены распадом на домены до смены знака поля.

**Список литературы**

1. *Vansteenkiste A. The design and verification of MuMax3 / A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik et al. // AIP Advances. – 2014. – Vol. 4. – Art. 107133.*

**СВЕРХБЫСТРАЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИНАМИКА  
ВОЗМУЩЕНИЙ ОРБИТАЛЬНОГО И МАГНИТНОГО  
УПОРЯДОЧЕНИЙ В ШПИНЕЛИ  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$**

**Роман Валерьевич Юсупов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Roman.Yusupov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** шпинель, оксид, ферримагнетик, фотоиндуцированная динамика, орбитальное упорядочение.

В докладе будут представлены результаты экспериментальных исследований методом фемтосекундной оптической и магнитооптической спектроскопии монокристаллического образца соединения  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  со структурой шпинели. Вещество проявляет фазовые переходы в состояние с дальним орбитальным упорядочением в подрешетке железа при 138 К, в коллинеарное ферримагнитное состояние при  $\sim 65$  К и состояние со спиральной модуляцией магнитной структуры при 38 К [1]; ниже 100 К наблюдается индуцируемая электрическим полем долгоживущая поляризация [2].

Фотовозбуждение световыми импульсами с длительностью 40 фс на длине волны 800 нм приводит к возмущению как орбитального упорядочения, проявляющегося в динамике коэффициента отражения, так и магнитной структуры. Последнее приводит к динамическому изменению угла поворота плоскости поляризации в полярном магнитооптическом эффекте Керра. Динамика угла поворота Керра различается при длинах волн зондирования 400 нм и 2000 нм, отвечающих переходам между  $d$ -зонами, образованными ионами  $\text{Cr}^{3+}$  и  $\text{Fe}^{2+}$  соответственно. Это, на наш взгляд, свидетельствует о возможности спектральной адресации к отдельным магнитным подрешеткам. Определены временные масштабы плавления и восстановления как орбитального, так и магнитного упорядочений в шпинели  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$ .

**Список литературы**

1. Shirane G. Magnetic structures in  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$  and  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  / G. Shirane, D.E. Cox, S.J. Pickart // Journal of Applied Physics. – 1964. – Vol. 35. – P. 954–955.
2. Singh K.  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  and  $\text{CoCr}_2\text{O}_4$  spinels: Multiferroicity in the collinear magnetic state? / K. Singh, A. Maignan, C. Simon et al. // Applied Physics Letters. – 2011. – Vol. 99. – Art. 172903.

**ОПТИЧЕСКИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ  
ДАУН-КОНВЕРСИОННЫХ МИКРОЧАСТИЦ  
 $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Yb}^{3+}$ :  $\text{LiYF}_4$**

**Анна Константиновна Докудовская, Максим Сергеевич Пудовкин,  
Екатерина Ильинична Олейникова, Стелла Леонидовна Кораблева,  
Олег Александрович Морозов, Марат Ревгеревич Гафуров**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: fyz0561999@gmail.com*

**Ключевые слова:** оптические сенсоры, люминесцентная термометрия, даун-конверсия.

**Введение.** Перспективными и малоизученными люминофорами для создания температурных сенсоров считаются микрочастицы, активированные ионной парой  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ . Целью данной работы было исследование влияния условий возбуждения на температурную чувствительность люминофоров  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Yb}^{3+}$ :  $\text{LiYF}_4$

**Материалы и методы.** Образцы  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Yb}^{3+}$ :  $\text{LiYF}_4$  были выращены методом Бриджмена – Стокбаргера в резистивной печи. Образцы измельчали в агатовой ступке. Измерения люминесценции проводились на лазерной установке JV LOTIS ТП на длинах волн 355 и 520 нм в диапазоне температур 80–320 К.

**Результаты и обсуждение.** Возбуждение системы осуществляется при  $\lambda_{ex} = 520$  и 355 нм. Все пики интерпретированы как результат перехода с  ${}^4\text{F}_{3/2}$  ( $\text{Nd}^{3+}$ ) и  ${}^2\text{F}_{5/2}$  ( $\text{Yb}^{3+}$ ) на нижние энергетические уровни. Интенсивность излучения  $\text{Yb}^{3+}$  увеличивается с увеличением концентрации  $\text{Yb}^{3+}$ . Согласно работе [1] передача энергии между ионами примеси может быть описана процессом, характеризующимся его вероятностями. Также в работе [1] предложен процесс кросс-релаксации для пары  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ . Относительные интенсивности эмиссионных пиков  $\text{Nd}^{3+}$  и  $\text{Yb}^{3+}$  зависят от температуры для всех образцов (рис. 1). В качестве температурно-зависимого параметра был выбран параметр LIR. Форма функции LIR слабо зависит от концентрации  $\text{Yb}^{3+}$ . Форма кривых LIR в зависимости от температуры одинакова для разных длин волн возбуждения 355 и 520 нм (рис. 2). Это может свидетельствовать о том, что заселение уровня  $\text{Yb}^{3+}$  за счет процесса кросс-релаксации не влияет на температурную чувствительность. Были рассчитаны абсолютная ( $S_a$ ) и относительная ( $S_r$ ) температурные чувствительности. Максимальное значение  $S_a$  достигается для  $\text{Nd}^{3+}$  (0,3 %),  $\text{Yb}^{3+}$  (1,0 %):  $\text{LiYF}_4$  ( $S_a =$

0,007 K<sup>-1</sup> при 320 K). Максимальное значение  $S_r$  достигается для Nd<sup>3+</sup> (0,3 %), Yb<sup>3+</sup> (5,0 %): LiYF<sub>4</sub> ( $S_r = 1,03 \% \cdot K^{-1}$  при 260 K).

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект FZSM-2022-0021).*

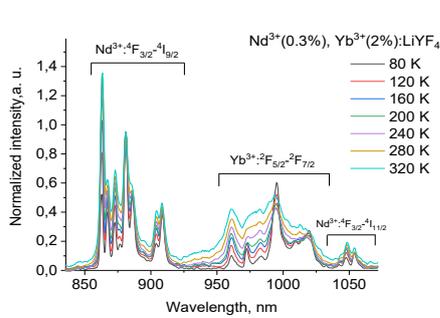


Рис. 1. Спектр люминесценции в зависимости от температуры Nd<sup>3+</sup> (0,3 %), Yb<sup>3+</sup> (2 %): LiYF<sub>4</sub>

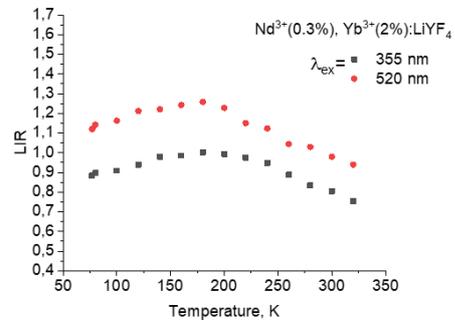


Рис. 2. Функции LIR при различных длинах волн возбуждения  $\lambda_{ex} = 520$  нм и  $\lambda_{ex} = 355$  нм Nd<sup>3+</sup>. Спектры нормированы по пику Nd<sup>3+</sup> 881 нм

### Список литературы

1. Pudovkin M.S. Temperature sensitivity of Nd<sup>3+</sup>, Yb<sup>3+</sup>: YF<sub>3</sub> ratiometric luminescent thermometers at different Yb<sup>3+</sup> concentration / M.S. Pudovkin, A.K. Ginkel, E.V. Lukinova // Optical Materials. – 2021. – No. 119. – P. 111328.

## ПРИНЦИП РАБОТЫ ОПТИЧЕСКОГО ДИОДА НА $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$

**Алексей Русланович Нурмухаметов, Кирилл Валерьевич Васин,  
Михаил Васильевич Еремин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: srgalex@list.ru*

**Ключевые слова:**  $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$ , магнитоэлектрический эффект, интерференция магнитных и электрических дипольных переходов.

В терагерцевом спектре поглощения антиферромагнетика  $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$  в работе [1] обнаружен «эффект оптического диода». Интенсивность проходящего света через пластинку изменяется более чем в 100 раз при обращении направления внешнего магнитного поля.

В настоящей работе приводятся результаты микроскопического расчета уровней энергии, волновых функций и вероятностей оптических переходов при различных поляризациях и направлениях внешнего магнитного поля. Полученные результаты дают основание заключить, что эффект оптического диода объясняется интерференцией магнитных и электрических дипольных переходов в исследуемой области терагерцевого спектра ионов железа. Снятие запрета на электрические дипольные переходы в пределах состояний основной конфигурации  $3d^6$  объясняется промешиванием состояний возбужденной конфигурации  $3d^54p$  и нечетных состояний с переносом заряда от ионов кислорода в  $3d^6$  оболочку ионов железа. Важно отметить, что октаэдрические позиции ионов железа в кристалле  $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$  искажены и не имеют центра инверсии. Подробное изложение методов расчета и сопоставление с данными экспериментов приведено в статье [2].

*Работа поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».*

### Список литературы

1. Yu Sh. High-Temperature Terahertz Optical Diode Effect without Magnetic Order in Polar  $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$  / Sh. Yu, B. Gao, J.W. Kim et al. // Physical Review Letters. – 2018. – No. 120. – P. 037601.
2. Васин К.В. К теории оптического диода на ионах железа в  $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$  / К.В. Васин, М.В. Еремин, А.Р. Нурмухаметов // Письма в ЖЭТФ. – 2022. – № 115 (7). – С. 420–423.

**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА  
МИКРО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ DyF<sub>3</sub>**

**Аделия Мухаматовна Гараева, Егор Михайлович Алакшин,  
Екатерина Ивановна Кондратьева, Ирина Владимировна Романова,  
Каюм Рафаилович Сафиуллин, Вячеслав Владимирович Кузьмин,  
Мурат Салихович Тагиров**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: adeliagaraeva84@yandex.ru*

**Ключевые слова:** намагниченность, наночастицы, кластеризация, размерные эффекты, ядерная релаксация, гелий-3.

Фторид диспрозия DyF<sub>3</sub> – дипольный ферромагнетик с осью легкого намагничивания вдоль оси [010] кристаллической решетки. Соединение обладает уникальными свойствами, что позволяет использовать его как высокополевого МРТ контрастный агент [1] и добавку к Nd-Fe-B магнитам для увеличения коэрцитивной силы [2].

Порошки DyF<sub>3</sub> с характерными размерами 30 нм x 16 нм, 50 нм x 30 нм, 70 нм x 40 нм, 220 нм x 150 нм были получены гидротермальным синтезом по хлоридной реакции [3], порошок размером 20 нм – по реакции через нитрат [4], порошок размером 7 мкм x 5 мкм – путем дробления монокристалла.

В этой работе были измерены зависимости намагниченности образцов в магнитных полях 0–7 Тл при 5, 10, 20 и 50 К. Проведено моделирование энергетического спектра в модели обменных зарядов. Величина насыщения магнитного момента в сильных магнитных полях изменяется с уменьшением размера частиц. Показано, что изменение намагниченности вызвано поверхностными эффектами и кластеризацией. Рассмотрены механизмы релаксации ядер <sup>3</sup>He в контакте с частицами DyF<sub>3</sub> при 1,5–3 К в полях 173, 287 и 505 мТл.

**Список литературы**

1. *Gonzalez-Mancebo D.* HoF<sub>3</sub> and DyF<sub>3</sub> Nanoparticles as Contrast Agents for High-Field Magnetic Resonance Imaging / D. Gonzalez-Mancebo et al. // Particle & Particle Systems Characterization. – 2017. – No. 10 (34). – P. 1700116.
2. *Xu F.* Effect of DyF<sub>3</sub> additions on the coercivity and grain boundary structure in sintered Nd-Fe-B magnets / F. Xu et al. // Scripta Materialia. – 2011. – No. 12 (64). – P. 1137–1140.
3. *Yi G.S.* Colloidal LaF<sub>3</sub>: Yb, Er, LaF<sub>3</sub>: Yb, Ho and LaF<sub>3</sub>: Yb, Tm nanocrystals with multicolor upconversion fluorescence / G.S. Yi, G.M. Chow // Journal of Materials Chemistry. – 2005. – No. 41 (15). – P. 4460–4464.
4. *Alakshin E.M.* Microwave-assisted hydrothermal synthesis and annealing of DyF<sub>3</sub> nanoparticles / E.M. Alakshin et al. // Journal of Nanomaterials. – 2016.

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТОДЕ БЕЗЛАЗЕРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ $^3\text{He}$

**Александр Сергеевич Макаrenchенко, Каюм Рафаилович Сафиуллин,  
Вячеслав Владимирович Кузьмин, Мурат Салихович Тагиров**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: makarchenko46@gmail.com*

**Ключевые слова:** гиперполяризация, гелий-3, ЯМР, РАМР.

Гиперполяризованные газы широко применяются как в научных, так и в прикладных целях. Гиперполяризованный  $^3\text{He}$  используют для поляризации нейтронов, высокоточной магнитометрии [1], томографии легких человека [2] и для изучения пористых сред.

Существует несколько основных способов получения гиперполяризации благородных газов: поляризация методом грубой силы и поляризация оптическими методами: SEOP и MEOP [3]. Применение этих методов ограничено сложностью их реализации и потребностью в дорогостоящем оборудовании. Новый метод неоптической поляризации ядер  $^3\text{He}$  в магнитном поле РАМР – polarization of atoms in a magnetized plasma (поляризация атомов в намагниченной плазме) [4] – может стать хорошей альтернативой традиционным методам получения гиперполяризованного  $^3\text{He}$  и благодаря дешевизне может стать доступным для повсеместного использования.

Была поставлена серия экспериментов по изучению физики процесса поляризации методом РАМР, по результатам которых было обнаружено влияние температуры на величину установившейся поляризации, получаемой данным методом. Из экспериментов по изучению влияния температуры на величину установившейся поляризации был сделан вывод от том, что рост температуры приводит к росту поляризации. Измерения проводились в диапазоне от комнатной температуры до 185 °С, максимальная поляризация составила 8 %. Описание эксперимента и полученные результаты были опубликованы в статье [5].

### Список литературы

1. *Nikiel A.* Ultrasensitive  $^3\text{He}$  magnetometer for measurements of high magnetic fields temperatures / A. Nikiel et al. // The European Physical Journal D. – 2014. – Vol. 68. – No. 11. – P. 1–12.
2. *Fain S.B.* Functional lung imaging using hyperpolarized gas MRI temperatures / S.B. Fain et al. // Journal of Magnetic Resonance Imaging: An Official Journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine. – 2007. – Vol. 25. – No. 5. – P. 910–923.
3. *Gentile T.R.* Optically polarized  $^3\text{He}$  / T.R. Gentile et al. // Reviews of modern physics. – 2017. – Vol. 89. – No. 4. – P. 045004.
4. *Maul A.* Nuclear hyperpolarization of  $^3\text{He}$  by magnetized plasmas / A. Maul et al. // Physical Review A. – 2018. – Vol. 98. – No. 6. – P. 063405.
5. *Makarchenko A.* Temperature-related effects in the polarization of atoms in a magnetized plasma as a promising feature towards high  $^3\text{He}$  nuclear polarization / A. Makarchenko et al. // Physical Review A. – 2022. – Vol. 106. – No. 2. – P. 023101.

## МЕТОДИКА $T_{2\text{эф}}-T_2$ ДЛЯ АНАЛИЗА ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ДИАМАГНЕТИКОВ

**Александр Вячеславович Богайчук**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: alexandr.bogaychuk@gmail.com*

**Ключевые слова:** полимеры, ЯМР-релаксометрия, ЯМР твердого тела, эффективная спин-спиновая релаксация, слабопольный ЯМР.

Слабопольная ЯМР-релаксометрия (LF TD-NMR) может применяться для анализа твердотельных полимеров [1]. Время спин-решеточной релаксации  $T_1$  ядер  $^1\text{H}$  характеризует степень сшивки в твердом полимере [2]. Время спин-спиновой релаксации  $T_2$  ядер  $^1\text{H}$  описывает общую молекулярную подвижность вещества [3]. Время спин-решеточной релаксации во вращающейся системе отсчета  $T_{1\rho}$  чувствительно к обоим параметрам [1]. Значение  $T_{1\rho}$  обычно измеряется методом spin-locking. Однако многоимпульсные последовательности также могут приводить к эффекту спинового захвата [4], тогда спад сигнала будет характеризоваться эффективным спин-спиновым временем релаксации  $T_{2\text{эф}}$ .

Экспериментальная методика  $T_{2\text{эф}}-T_2$  была использована для исследования термической деструкции поливинилхлорида в интервале температур от 30 до 100 °С. Полученные результаты согласуются с результатами измерений  $T_1$ . В то же время стандартные отклонения распределений времен спин-решеточной и спин-спиновой релаксации слишком велики для однозначных выводов, что указывает на более высокую чувствительность метода  $T_{2\text{эф}}-T_2$  в сравнении с  $T_1-T_2$  или  $T_1-T_2^*$  в данном случае.

### Список литературы

1. *Besghini D.* Time Domain NMR in Polymer Science: From the Laboratory to the Industry / D. Besghini, M. Mauri, R. Simonutti // Applied Sciences. – 2019. – No. 9 – P. 1801.
2. *Patel J.P.* Development of low field NMR technique for analyzing segmental mobility of crosslinked polymers / J.P. Patel, S.L. Hsu // Polymer Physics. – 2018. – No. 8 (56) – P. 639–643.
3. *Teymouri Y.* Impact of Exposure Conditions on the Morphology of Polyethylene by Compact NMR / Y. Teymouri, A. Adams, B. Blumich // Macromolecular Symposia. – 2018. – No. 1 (378) – P. 1600156.
4. *Bogaychuk A.V.* Special Features of the Transverse Relaxation Time Distributions of NMR-Protons for Different Measurement Methods / A.V. Bogaychuk, I.G. Mershev, N.Y. Sinyavsky et al. // Russian Physics Journal. – 2018. – No. 4 (61) – P. 801–803.

**ПЕРСПЕКТИВНАЯ АКТИВНАЯ СРЕДА НА ОСНОВЕ СМЕШАННЫХ  
КРИСТАЛЛОВ  $\text{LiCa}_x\text{Sr}_{1-x}\text{AlF}_6$ : Ce**

**Алексей Андреевич Шавельев, Айнур Адыхамович Шакиров,  
Алексей Сергеевич Низамутдинов, Михаил Александрович Марисов,  
Сергей Сергеевич Харинцев, Вадим Владимирович Семашко**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: alexey.shavelev@gmail.com*

**Ключевые слова:** УФ-лазеры, фториды, смешанные кристаллы.

Фторидные кристаллы со структурой кольквириита являются перспективными материалами, которые используются в качестве матриц активных сред, способных усиливать УФ-излучение, будучи легированными редкоземельными ионами [1–3]. Лазеры на кристаллах  $\text{LiCaAlF}_6$ : Ce усиливают свет в ближней УФ-области спектра и позволяют получить перестройку в относительно широком спектральном диапазоне. Целью данной работы является исследование физических свойств и усиления, а также проведение экспериментов по получению генерации на кристаллах  $\text{LiSr}_x\text{Ca}_{1-x}\text{AlF}_6$ : Ce в поисках оптимального соотношения Ca/Sr для повышения эффективности генерации лазера. В результате проделанной работы были определены оптимальный химический состав и способы предварительной очистки отдельных компонент шихты для выращивания кристаллов  $\text{LiSr}_x\text{Ca}_{1-x}\text{AlF}_6$ : Ce высокого оптического качества. Также показано, что за счет изменения катионного состава кристаллов кольквириита удается повысить коэффициент распределения неизоморфной примеси, а также получить активную среду УФ-диапазона спектра с высоким КПД лазерной генерации.

**Список литературы**

1. *Fromzel V.A.* Tunable, narrow linewidth, high repetition frequency Ce: LiCAF lasers pumped by the fourth harmonic of a diode-pumped Nd: YLF laser for ozone DIAL measurements / V.A. Fromzel et al. // *Advances in Optical and Photonic Devices*. – IntechOpen. – 2010.
2. *Alderighi D.* High efficiency UV solid state lasers based on Ce:  $\text{LiCaAlF}_6$  crystals / D. Alderighi et al. // *Applied Physics B*. – 2006. – Vol. 83. – No. 1. – P. 51–54.
3. *Watanabe K.* Portable neutron detector using Ce:  $\text{LiCaAlF}_6$ : scintillator / K. Watanabe et al. // *Sensors and Materials*. – 2015. – Vol. 27. – P. 269–275.

**ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ИОНОВ  $\text{Er}^{3+}$   
В КРИСТАЛЛАХ  $\text{BaY}_{1,8}\text{Lu}_{0,2}\text{F}_8$**

**Анна Витальевна Астраханцева, Алексей Андреевич Шавельев,  
Михаил Александрович Марисов, Алексей Сергеевич Низамутдинов,  
Вадим Владимирович Семашко**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: anya4324@gmail.com*

**Ключевые слова:** кристаллы фторидов, редкоземельные ионы, спектры поглощения, спектры люминесценции.

Легированные в кристаллическую матрицу ионы эрбия позволяют достичь эффективной лазерной генерации в диапазоне длин около 1,5 и 2,8 мкм [1, 2]. Таким образом, лазеры на кристаллах фторидов, легированных эрбием, являются перспективными кандидатами для применения в лазерных газовых анализаторах.

В настоящей работе были исследованы спектрально-кинетические характеристики в ИК-области кристаллов  $\text{BaY}_{1,8}\text{Lu}_{0,2}\text{F}_8$ , активированных ионами  $\text{Er}^{3+}$  с концентрациями от 1 ат % до 30 ат %. Показано, что кристаллы  $\text{BaY}_{1,8}\text{Lu}_{0,2}\text{F}_8$ : Er обеспечивают более широкий диапазон усиления для полосы около 2,8 мкм по сравнению с кристаллами YLF: Er. Значения сечения вынужденного излучения для кристаллов  $\text{BaY}_{1,8}\text{Lu}_{0,2}\text{F}_8$ : Er с концентрациями ионов  $\text{Er}^{3+}$  20,0 и 30,0 ат % для перехода  ${}^4\text{I}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  составили  $0,29 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$  и  $0,30 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$ , для перехода  ${}^4\text{I}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{13/2}$  –  $7,83 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$  и  $8,31 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$  соответственно. Время затухания люминесценции для состояния  ${}^4\text{I}_{11/2}$  составило  $5,70 \pm 0,04 \text{ мс}$  и  $5,37 \pm 0,08 \text{ мс}$  для 20 ат % и 30 ат %  $\text{Er}^{3+}$  соответственно. Для состояния  ${}^4\text{I}_{13/2}$  –  $5,5 \pm 0,3 \text{ мс}$  и  $3,8 \pm 0,2 \text{ мс}$  для концентраций ионов  $\text{Er}^{3+}$  20 и 30 ат % соответственно, что говорит о потенциально высокой эффективности лазерной генерации в непрерывном режиме на этих переходах.

*Работа проведена за счет субсидии FZSM-2022-0021, выделенной Казанскому федеральному университету на выполнение государственного задания в сфере научной деятельности.*

**Список литературы**

1. Gorbachenya K.N. Synthesis and laser-related spectroscopy of Er:  $\text{Y}_2\text{O}_3$  optical ceramics as a gain medium for in-band-pumped 1.6  $\mu\text{m}$  lasers / K.N. Gorbachenya et al. // Crystals. – 2022. – Vol. 12. – No. 4. – P. 519.
2. Gorbachenya K.N. Laser performance of in-band pumped Er:  $\text{LiYF}_4$  and Er:  $\text{LiLuF}_4$  crystals / K.N. Gorbachenya et al. // Quantum Electronics. – 2016. – Vol. 46. – No. 2. – P. 95.

## РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУМЕРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ЮКАВЫ И КУЛОНА НА ОСНОВЕ ПРОСТОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

**Ильназ Изаилович Файрушин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: fairushin\_ilmaz@mail.ru*

**Ключевые слова:** двумерная жидкость, радиальная функция распределения, простое приближение, термодинамические свойства, скорость звука.

В последнее десятилетие повышенное внимание исследователей обращено к двумерным системам с юкавовским и кулоновским межчастичным взаимодействием. Во-первых, это связано с тем, что такие системы легко реализуются в эксперименте. Сюда относятся опыты с монослоем заряженных макрочастиц в низкотемпературной плазме и эксперименты с коллоидными растворами с микроразмерными частицами. Во-вторых, потенциалы взаимодействия Юкавы и Кулона выражаются простыми аналитическими выражениями, что дает возможность легко осуществлять проверку той или иной микроскопической теории, описывающей структуру или динамику указанных систем. Особенно это важно для жидкоподобного состояния, которое в отличие от газового и кристаллического характеризуется отсутствием подходящего малого параметра для развития соответствующего теоретического описания.

В работе предлагается простое приближение для радиальной функции распределения частиц двумерных жидкостей Кулона и Юкавы. Данное приближение задается ключевыми параметрами системы: параметрами неидеальности и экранировки. С использованием полученного приближения установлены аналитические выражения для таких термодинамических величин, как внутренняя энергия, внутреннее давление, избыточная энтропия в двухчастичном приближении, а также скорость продольного звука. Результаты теоретических расчетов обнаруживают согласие с результатами, получаемыми в случае использования истинных радиальных функций распределения.

## МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

**Рамиль Миннегаязович Хуснутдинов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: khrm@mail.ru*

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, коллективные возбуждения, вода.

Представлены результаты исследования микроскопических коллективных возбуждений в воде, полученные с помощью моделирования молекулярной динамики на основе огрубленной (моноатомной) ML-mW-модели потенциала межмолекулярного взаимодействия. Моделирование воды выполняется в изотермически-изобарическом (NpT-) ансамбле при температуре  $T = 300$  К и внешнем давлении  $p = 1,0$  атм. Система состояла из 32 000 молекул, расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Для стабилизации системы использовался термостат и баростат Нозе – Гувера с параметрами релаксации 10,0 и 100,0 фс соответственно. Рассчитанные спектры динамического структурного фактора и спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков обнаруживают наличие распространяющихся коллективных возбуждений продольной и поперечной поляризации в воде для широкой области значений волновых чисел. Анализ спектров позволяет предположить, что наблюдаемые аномалии в высокочастотной коллективной динамике обусловлены релаксационными процессами, ответственными за: 1) появление распространяющихся поперечных коллективных мод на высоких частотах, 2) переход от нормального звука к быстрому и 3) появление замешивания продольных и поперечных коллективных мод при больших значениях волновых чисел.

*Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).*

## ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ФУЛЛЕРЕНОВЫХ СМЕСЯХ

**Рания Рустамовна Хайруллина, Рамиль Миннегаязович Хуснутдинов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: raniya-art@mail.ru*

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, фуллерены, ближний порядок, структурное упорядочение.

Процессы стеклообразования в конденсированных средах характеризуются некоторыми специфическими изменениями ближнего порядка [1, с. 2] в расположении частиц (атомов/молекул/ионов). Цель настоящей работы заключалась в исследовании локальных структурных особенностей равновесного и переохлажденного расплава фуллереновой смеси  $A_{20}B_{80}$  (где  $A = C_{60}$  и  $B = C_{70}$ ), полученных при различных скоростях охлаждения, ради выяснения механизма формирования икосаэдрического ближнего порядка в бинарных молекулярных жидкостях. Исследования свойств расплава фуллереновой смеси осуществлялись с помощью молекулярно-динамического моделирования с последующим структурным и кластерным анализом. Определены температура кристаллизации и критическая температура стеклования системы, которые составили  $T_m \approx 1439$  К и  $T_c \approx 1238$  К соответственно. Установлено, что кристаллизация фуллереновой смеси при достаточно высоких скоростях охлаждения протекает по поликристаллическому сценарию с образованием кластеров с ГЦК- и ГПУ-симметриями. Обнаружено, что в переохлажденной фуллереновой смеси ближний икосаэдрический порядок образован незначительным количеством идеальных икосаэдрических кластеров ( $\sim 2,4$  %) и некоторым набором искаженных икосаэдрических кластеров ( $\sim 17$  %). Показано, что при температурах ниже критической температуры стеклования доля икосаэдрических кластеров в системе практически не изменяется.

*Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).*

### Список литературы

1. Хуснутдинов Р.М. Процессы структурообразования в фуллереновых смесях / Р.М. Хуснутдинов, Р.Р Хайруллина // Физика твердого тела. – 2023. – Т. 65. – Вып. 1. – С. 164–169.

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА

**Роман Валерьевич Власов, Анатолий Васильевич Мокшин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: roman.vlasoff@outlook.com*

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, гидрат метана, газовые гидраты, кристаллизация.

Газовые гидраты представляют собой кристаллические соединения, стабильные при низкой температуре и высоком давлении. Эти соединения состоят из водных клеток с водородными связями (хозяин) и вложенных молекул – гостей [1]. Интерес к газовым гидратам связан с их потенциалом в энергетической сфере, а также с проблемами гидратообразования в стволах скважин. В то время как термодинамические свойства газовых гидратов были тщательно изучены и хорошо установлены [2], остается много открытых вопросов, связанных с их формированием [3].

В ходе данной работы исследовался процесс нуклеации и формирования гидрата метана при  $T = 250$  К и  $P = 50$  МПа в рамках моделирования молекулярной динамики. Для описания взаимодействия воды и метана использовались атомистические модели TIP4P и OPLSAA соответственно. По рассчитанным параметрам порядка  $F_3$  и  $F_4$  определялось время нуклеации, значения которого находятся в наноразмерном масштабе. Полученные значения параметров порядка  $F_3$  и  $F_4$  показывают, что рост гидрата метана проходит через аморфную фазу с последующим переходом в кристаллическую фазу.

*Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 19-12-00022-П). Авторы признательны за поддержку Фонду развития теоретической физики и математики «Базис» (проект № 20-1-2-38-1).*

### Список литературы

1. Sloan E.D. Fundamental principles and applications of natural gas hydrates / E.D. Sloan // Nature. – 2003. – Vol. 426. – No. 6964. – P. 353–363.
2. Hester K.C. Clathrate hydrates in nature / K.C. Hester, P.G. Brewer // Annual Review of Marine Science. – 2009. – Vol. 1. – P. 303–327.
3. Guo G.J. Open questions on methane hydrate nucleation / G.J. Guo, Z.C. Zhang // Communications Chemistry. – 2021. – Vol. 4. – P. 102.

**РЕАЛИЗАЦИЯ ЦИФРОВОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ, ФИЛЬТРАЦИИ  
И РАЗРАБОТКА ТЕРМОБЛОКА В ЯМР-РЕЛАКСОМЕТРЕ  
«ХРОМАТЭК-ПРОТОН 20М» С ЦЕЛЬЮ РАСШИРЕНИЯ СПЕКТРА  
ИССЛЕДУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ**

**Артем Сергеевич Александров**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: aaleksan@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс (ЯМР), синхронное детектирование, терморегулирование.

В ходе эксплуатации ЯМР-релаксометра «Хроматэк-Протон 20М» (см., например, [1]) был выявлен ряд недостатков. Во-первых, в устройстве датчика релаксометра отсутствует система термостатирования и терморегулирования образца, что не позволяет исследовать, например, температурные зависимости времени релаксации. Во-вторых, отличие в коэффициентах усиления двух каналов синхронного детектора и в разности фаз опорных частот данных каналов (см., например, [2]) приводит к ошибке определения долей компонент сигнала ЯМР более чем на 2 %, что не позволяет исследовать объекты с малым содержанием интересующих нас компонент. С целью устранения вышеописанных недостатков разработана и реализована новая конструкция датчика ЯМР, содержащая термостат, датчик температуры, нагреватель, регулятор, систему подвода теплоносителя. Также реализована новая схема приемного тракта, включающая в себя предварительный усилитель, смеситель для преобразования частоты сигнала с 23 МГц на 3 МГц, усилитель низких частот, АЦП. Амплитудно-фазовое детектирование и фильтрация реализованы в цифровом виде в реальном режиме времени на ПЛИС Spartan-6. В результате реализованные решения позволяют изменять температуру образца от –50 до 100 °С с точностью до 1 °С, сократить время парализации приемного тракта до 8 мкс, повысить чувствительность не менее чем в 2 раза.

**Список литературы**

1. *Зубков М.Ю.* Примеры использования программно-аппаратурного комплекса на основе ЯМР-релаксометра «Протон 20М» при петрофизических исследованиях керна и флюидов / М.Ю. Зубков, А.Г. Потапов // Каротажник. – 2016. – № 1. – С. 11–23.
2. *Al-Araji S.R.* Digital Phase Lock Loops / S.R. Al-Araji, Z.M. Hussain, M.A. Al-Qutayri. – N.Y.: Springer, 2006. – P. 15–30.

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ  
ЗАВИСИМОСТИ КСД ФЕНОЛА В ВОДНЫХ D<sub>2</sub>O РАСТВОРАХ  
МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА**

**Руслан Викторович Архипов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: general\_zh@mail.ru*

**Ключевые слова:** диффузия, ЯМР, фенол, температура, концентрация.

Методом ЯМР-диффузомерии выполнены селективные измерения коэффициентов самодиффузии молекул фенола и воды в водных растворах при температурах от 300 до 350 К и концентрациях фенола от 0,625 до 20,0 г/л.

КСД молекул фенола и воды в интервале 300÷320 К от концентрации фенола не зависят. При более высоких температурах сохраняется независимость КСД от концентрации (0,625÷10 г/л). При  $C = 20$  г/л наблюдается аномальный рост КСД.

Температурные зависимости КСД фенола и воды имеют аррениусовский вид. Энергии активации фенола и воды при  $C = 0,625\div 10$  г/л составляют 17,7 и 16,5 кДж/моль, а при  $C = 20$  г/л – 19,8 и 18,6 кДж/моль соответственно.

Полученные результаты объясняются отрицательной гидратацией фенолят-ионов, образующихся при диссоциации фенола в водных растворах.

**Список литературы**

1. *Самойлов О.Я.* Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов / О.Я. Самойлов. – М.: Издательство Академии наук СССР, 1957. – 179 с.
2. *Архипов В.П.* Эффективность и кинетика экстракции фенола из водных растворов с помощью неионогенных ПАВ / В.П. Архипов, Р.В. Архипов, З.Ш. Идиятуллин // Журнал физической химии. – 2018. – № 92 (8). – С. 1241–1245.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ  
БЕЛКОВ С ВНУТРЕННЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРОЙ  
МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА  
С ИМПУЛЬСНЫМ ГРАДИЕНТОМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ**

**Дарья Леонидовна Мельникова, Владимир Дмитриевич Скирда**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: melndaria@mail.ru*

**Ключевые слова:** трансляционная подвижность молекул, ядерный магнитный резонанс, коэффициент самодиффузии.

Согласно современным представлениям около 10 % всех белков даже в нативных функциональных условиях являются внутренне неупорядоченными (или, как их первоначально называли, неструктурированными) [1,2]. Такие белки характеризуются наличием неупорядоченных участков полипептидной цепи и обладают конформационной подвижностью, сохраняя при этом функциональную активность. Однако по существующим данным не представляется возможным ответить на вопрос о наличии каких-либо общих закономерностей как в характеристиках трансляционной подвижности, присущих этому классу белков, так и в особенностях их структурной организации, обусловленной как внутри-, так и межмолекулярными взаимодействиями. Установление подобных закономерностей для внутренне неупорядоченных белков с использованием современных технологий ядерного магнитного резонанса является ключом к пониманию специфических особенностей и свойств таких молекул, а также выполняемых ими функций в живом организме, с целью оценки перспектив использования представителей неупорядоченных белков в качестве элементов таргетных систем доставки лекарственных средств.

**Список литературы**

1. *Uversky V.N.* The case for intrinsically disordered proteins playing contributory roles in molecular recognition without a stable 3D structure / V.N. Uversky, A.K. Dunker // *F1000 Biology Reports*. – 2013. – Vol. 5. – No. 1. – P. 12.
2. *Habchi J.* Introducing protein intrinsic disorder / J. Habchi, P. Tompa, S. Longhi et al. // *Chemical Reviews*. – 2014. – Vol. 114. – Is. 13. – P. 6561–6588.

**О НЕКОТОРЫХ МЕТОДИЧЕСКИХ ВОПРОСАХ В ИССЛЕДОВАНИИ  
ПРОНИЦАЕМОСТИ КЛЕТОК ЭРИТРОЦИТОВ  
МЕТОДАМИ ИМПУЛЬСНОГО ЯМР**

**Дарья Леонидовна Мельникова, Дмитрий Сергеевич Иванов,  
Владимир Дмитриевич Скирда**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: f.ma.dima@mail.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс, эритроциты, самодиффузия, трансмембранный обмен.

На примере исследования проницаемости мембран в суспензии эритроцитов проведено сравнение данных, получаемых двумя разными методиками ЯМР: ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля и спин-спиновой релаксацией в условиях парамагнитного допинга [1]. При этом для широко используемого в подобных исследованиях парамагнетика MnCl<sub>2</sub> показано его практически свободное проникновение внутрь клетки эритроцита, в то время как препарат «Магневист» явных признаков прохождения через мембрану эритроцита не демонстрирует. Тем не менее в целом в работе показано, что характеристики обмена, регистрируемые в методике парамагнитного допинга, не вполне корректны в связи со сложной формой релаксационного затухания, которую не удастся строго описать двумя экспоненциальными вкладками.

Показано, что применение методики с импульсным градиентом позволяет наиболее корректно фиксировать факт ограниченной диффузии для внутриклеточной жидкости и регистрировать признаки трансмембранного обмена. Проведено сравнение экспериментально измеренных характеристик обмена для изолированных клеток эритроцитов и агрегированных в так называемые монетные столбики. Высказана гипотеза о неоднородном распределении проницаемости по поверхности мембраны эритроцита.

**Список литературы**

1. Conlon T. Water diffusion permeability of erythrocytes using an NMR technique / T. Conlon, R. Outhred // Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes. – 1972. – Vol. 288. – No. 2. – P. 354–361.

**РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ  
ПАРАФИНА И АСФАЛЬТЕНОВ В НЕФТИ  
МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА**

**Дмитрий Сергеевич Иванов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: f.ma.dima@mail.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс, нефть, парафины, асфальтены, кристаллизация, стеклование.

Вопросы добычи нефти и ее последующей переработки непосредственно и тесно связаны с химическим составом нефти и ее физическими свойствами. В динамике разработки нефтяного месторождения изменения свойств флюидов могут привести к осаждению асфальтенов [1] и неустойчивому поведению парафинов. Значительное содержание асфальтенов и высокомолекулярных парафинов в нефти является катализатором увеличения плотности и вязкости нефти, изменяет ее коллоидную структуру и реологические характеристики, а также усиливает процессы адсорбции на поверхности каналов фильтрации [2].

Существующие методы определения парафинов и асфальтенов в нефти, например, ГОСТ 11858-66 и ГОСТ 11851-85, являются весьма трудоемкими, продолжительными и субъективными.

В данной работе представлены результаты разработки методики определения парафинов и асфальтенов в нефти. Показано, что применение метода ядерного магнитного резонанса, в частности проведение температурных исследований и анализа зависимости доли твердотельной компоненты от температуры  $p_s(T)$ , позволит оперативно получать информацию о содержании парафинов и асфальтенов в нефти.

**Список литературы**

1. Акбарзаде К. Асфальтены: проблемы и перспективы / К. Акбарзаде, А. Хаммами, А. Харрат и др. // Нефтегазовое обозрение. – 2007. – Т. 19. – № 2. – С. 28–53.
2. Altgelt K.H. Composition and analysis of heavy petroleum fractions / K.H. Altgelt. – Boca Raton: CRC Press, 2016. – 512 p.

## НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАНГИДРАТОВ МЕТОДОМ ЯМР

**Анатолий Александрович Иванов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: anatoly.ivanov1@gmail.com*

**Ключевые слова:** метангидрат, ядерный магнитный резонанс (ЯМР), кинетика, диффузия, релаксация.

Метангидраты относятся к классу газогидратов, которые образуются при включении молекул газов в полости кристаллической решетки льда [1–3]. Стабилизация подобных структур осуществляется ван-дер-ваальсовыми силами. Объем метана на нашей планете в виде метангидрата, по различным оценкам, весьма значителен, что стимулирует интерес к исследованию метангидрата со стороны как добывающих компаний, так и экологов (метан – один из парниковых газов). В настоящее время структурное строение, морфология и условия существования газовых гидратов считаются сравнительно хорошо изученными. Однако ряд моментов, относящихся к кинетике образования и разложения газогидратов, не вполне ясен. В частности, объяснение эффекта «самоконсервации» и условия его возникновения являются наиболее интересными и спорными вопросами. Цель данной работы заключалась в исследовании кинетики роста метангидрата и характера молекулярной подвижности молекул метана в кристаллической решетке метангидрата методом ядерно-магнитного резонанса.

### Список литературы

1. *Соловьев В.А.* Природные газовые гидраты как потенциальное полезное ископаемое / В.А. Соловьев // *Российский химический журнал.* – 2003. – Т. XLVII. – № 3. – С. 59–69.
2. *Kleinberg R.L.* Seafloor NMR assay of methane hydrate in sediments and rock / R.L. Kleinberg, C. Flaum, C. Straley et al. // *Journal of Geophysical Research.* – 2003. – Vol. 108. – P. 1–13.
3. *Lin W.* Effect of surfactant on the formation and dissociation kinetic behavior of methane hydrate / W. Lin, G.-J. Chen, C.-Y. Sun et al. // *Chemical Engineering Science.* – 2004. – Vol. 59. – P. 4449–4455.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТРУКТУРНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА НЕФТИ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

**Дмитрий Сергеевич Иванов, Тимур Асхатович Казбаев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: f.ma.dima@mail.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс, спин-решеточная релаксация, спин-спиновая релаксация, твердотельная компонента, смолы, парафины, асфальтены, кристаллизация, гистерезис.

Задача освоения тяжелой нефти и природного битума представляет собой сложную проблему и ее решение связано с проведением исследований с максимальным использованием имеющихся передовых технологий. Высокое содержание парафинов, смол и асфальтенов в сочетании с тенденцией формирования надмолекулярных структур создает значительные трудности при добыче и транспортировке нефти. Наибольшую неопределенность при характеристике высокомолекулярных компонент нефти связывают со смолами [1]. Смолы являются полярными полициклическими соединениями с существенной молекулярной массой и склонны к взаимодействию с асфальтенами [2] и маслами. Поэтому на данном этапе важно установить структурно-динамические свойства смол, а также их влияние на структурную организацию других высокомолекулярных компонент, таких, например, как асфальтены и парафины.

В результате исследования получена информация о надмолекулярной структуре нефтяных смол. При этом показано, что для бензольных и спиртобензольных смол наблюдаются различия в температурах стеклования. Найдено характеристическое время поперечной релаксации  $T_2 \sim 10^{-3}$  с для смолы, которая участвует во взаимодействии с асфальтенами.

### Список литературы

1. *Speight J.G.* On the molecular nature of petroleum asphaltenes / J.G. Speight, S.E. Moschopedis // *Fuel*. – 1980. – Vol. 59. – P. 440–442.
2. *Murgich J.* Intermolecular forces in aggregates of asphaltenes and resins / J. Murgich // *Petroleum Science and Technology*. – 2002. – Vol. 20. – No. 9–10. – P. 983–997.

## СТРУКТУРА МОДЕЛЬНЫХ ЛИПИДНЫХ СИСТЕМ В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ И БЕТА-АМИЛОИДНЫХ ПЕПТИДОВ

Сергей Александрович Куракин<sup>1,2</sup>, Дина Рамизовна Бадреева<sup>2</sup>,  
Сергей Владимирович Ефимов<sup>1</sup>, Тимур Анварович Мухаметзянов<sup>1</sup>,  
Александр Игоревич Иванов<sup>2</sup>, Норберт Кучерка<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Дубна, Объединенный институт ядерных исследований  
*Russia, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research*

<sup>3</sup> Словакия, Братислава, Университет имени Я.А. Коменского  
*Slovakia, Bratislava, University named after Ya.A. Comenius*  
*E-mail: ksa18@list.ru*

**Ключевые слова:** бета-амилоидный пептид, липидная мембрана, фазовый переход, ядерный магнитный резонанс, круговой дихроизм.

Ключевую роль в болезни Альцгеймера играет бета-амилоидный (A $\beta$ ) пептид, один из фрагментов которого (A $\beta$ <sub>25–35</sub>) проявляет крайне токсические свойства в том числе и в липидной мембране клеток. Ранее было обнаружено [1], что A $\beta$ <sub>25–35</sub>, встроенный в липидный бислой, состоящий из липидов ДПФХ или ДМФХ, способен вызывать морфологическую реорганизацию между однослойными везикулами и бицеллоподобными объектами при переходе через температуру фазового перехода липидов в процессе нагрева/охлаждения системы. Несмотря на то, что этот эффект проявляется на надмолекулярном уровне, он связан с разрушительным воздействием A $\beta$ <sub>25–35</sub> на липидную мембрану [1].

В этой работе с помощью методов <sup>31</sup>P и <sup>2</sup>H спектроскопии ядерного магнитного резонанса, кругового дихроизма и крупнозернистой молекулярной динамики установлена структура бицеллоподобных объектов. Показано, что A $\beta$ <sub>25–35</sub>, в основном обладая неупорядоченной вторичной структурой, преимущественно локализуется по периметру бицеллоподобных объектов, смешиваясь с липидами, которые также расположены не только в плоскости диска, но и по его краям. Добавление ионов иттербия к системе вызывает формирование неламеллярных инвертированных фаз, что потенциально свидетельствует о широком полиморфизме таких липид-пептидных систем. Установление их структуры может помочь в понимании механизмов разрушения мембраны пептидом.

*Работа поддержана РФФ № 19-72-20186 и ОМУС-2022 № 22-402-02.*

### Список литературы

1. *Ivanov O. Amyloid-beta peptide (25–35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes / O. Ivanov, T. Murugova, E. Ermakova et al. // Scientific Reports. – 2021. – No. 11. – Art. 21990.*

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ГРУППОВОГО СОСТАВА  
ЛЕГКОЙ, ТЯЖЕЛОЙ И КАТАЛИЗИРОВАННОЙ НЕФТИ  
МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ**

**Ильфат Зуфарович Рахматуллин, Сергей Владимирович Ефимов,  
Владимир Васильевич Клочков**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: IZRahmatullin@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс (ЯМР), нефть, катализатор, структурно-групповой состав.

Спектроскопия ЯМР  $^{13}\text{C}$  высокого разрешения была применена для исследования структурно-группового состава легкой, тяжелой и катализированной нефти.

Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  содержит многочисленные отчетливые сигналы, которые можно отнести к разным типичным областям и, таким образом, предоставить информацию о долях первичных углеродов (метильные группы  $\text{CH}_3$ ), вторичных (метиленовые группы  $\text{CH}_2$ ) и четвертичных углеродов (C), третичных углеродов (метиновые группы  $\text{CH}$ ) и ароматических углеродов –  $\text{C}_{\text{ar}}$ . Оценка молярного содержания различных углеродных групп получена путем интегрирования соответствующих участков спектров ЯМР  $^{13}\text{C}$  [1].

По результатам полученных данных было замечено снижение фактора ароматичности и средней длины углеводородной цепи в катализированном образце нефти, что свидетельствует об успешности каталитической обработки исследуемого образца тяжелой нефти. Также, наблюдается взаимно обратная зависимость для первичных и ароматических углеродов при изменении вязкости исследуемых образцов. Детальное отнесение сигналов в спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  образцов легкой, тяжелой и катализированной нефти и их сравнение между собой позволили зафиксировать изменения конкретных сигналов в спектре ЯМР [2].

**Список литературы**

1. *Rakhmatullin I.Z.* Study of native oil-bearing rocks of the Cuban basin by high resolution NMR spectroscopy / I.Z. Rakhmatullin, S.V. Efimov, E.I. Kondratyeva et al. // *Petroleum Research*. – 2022. – P. 1–5.
2. *Rakhmatullin I.Z.* NMR structural-group characteristics and detailed shift ranges in light, heavy and catalyzed oils / I.Z. Rakhmatullin, S.V. Efimov, A.V. Klochkov et al. // *Znanstvena misel journal*. – 2022. – No. 69. – P. 7–11.

**РЕАКТИВНЫЙ МАГНЕТРОННЫЙ СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ  
МОРФОЛОГИИ, ЭЛЕМЕНТНОГО И ВАЛЕНТНОГО СОСТАВА  
И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ВОЛЬФРАМА,  
ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И МОЛИБДЕНОМ**

**Инсаф Фанисович Маликов<sup>1,2</sup>, Николай Михайлович Лядов<sup>2</sup>,  
Мякзюм Халимулович Салахов<sup>1</sup>, Ленар Рафгатович Тагиров<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*<sup>2</sup>Россия, Казань, КФТИ имени Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН  
Russia, Kazan, KPhTI, FRC Kazan Scientific Center, RAS*

*E-mail: insaf.malikov@gmail.com*

**Ключевые слова:** электрохромный эффект, реактивное магнетронное распыление, оксид вольфрама.

Электрохромизм – это явление, при котором цвет или непрозрачность материала изменяется при приложении напряжения. Оксид вольфрама  $WO_3$  ( $WO_x$ ) – известный катодный электрохромный материал, оптическая плотность которого изменяется при интеркалировании ионами щелочных и щелочноземельных элементов, входящими в состав электролита электрохромной ячейки.

Легирование позволяет улучшать потребительские свойства электрохромных тонких пленок  $WO_{3-x}$ . В данной работе произведено анионное легирование азотом и катионное легирование молибденом. Исследована структура и поведение оптических свойств пленок оксида вольфрама от степени легирования. Легирование азотом дает возможность влиять на проводимость, позволяя перераспределить падения напряжения в стеке анод/электролит/катод в пользу электролита. С увеличением легирования происходит увеличения доли нестехиометрического кислорода, несовершенство материала приводит к ускорению процессов окрашивания/обесцвечивания. Легирование молибденом позволяет перераспределить поглощения света в сторону коротковолновой части для компенсации синей окраски  $WO_3$  и смещение окраски в сторону ахроматической, что является необходимым требованием для практического применения.

**Список литературы**

1. *Granqvist C.G. Handbook of Inorganic Electrochromic Materials / C.G. Granqvist. – Amsterdam: Elsevier, 2002. – 650 p.*
2. *Zeb S. Advanced developments in nonstoichiometric tungsten oxides for electrochromic applications / S. Zeb, G. Sun, Y. Nie et al. // Materials Advances. – 2021. – Vol. 2. – No. 21. – P. 6839–6884.*

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ  
НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ  
ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОГО МАГНЕТИКА CrBr<sub>3</sub>**

**Ольга Николаевна Лис<sup>1,2</sup>, Денис Петрович Козленко<sup>1</sup>,  
Сергей Евгеньевич Кичанов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Россия, Дубна, Объединенный институт ядерных исследований  
Russia, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research*

<sup>2</sup> *Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: lisa\_9477@mail.ru*

**Ключевые слова:** нейтронная дифракция, высокое давление, фазовый переход.

В последнее время активно исследуются ван-дер-ваальсовские слоистые магнетики, одним из известных представителей которых является CrBr<sub>3</sub>. Магнитные свойства в таких материалах существенно зависят от структуры и количества слоев, а также чувствительны к внешним воздействиям, что обуславливает их практическую перспективность.

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической и магнитной структуры и колебательных спектров CrBr<sub>3</sub> в широких диапазонах температур и давлений. Детальные исследования кристаллической и магнитной структуры соединения проводились с помощью нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ, Дубна, Россия). Исследования нейтронной дифракции CrBr<sub>3</sub> позволили обнаружить в области ниже  $T_C = 37$  К отрицательное тепловое объемное расширение, а также аномальное поведение межатомных расстояний, углов и рамановских сдвигов, что указывает на проявляющуюся сильную спин-решеточную связь. Воздействие высокого давления приводит к подавлению магнитного упорядочения, а полное подавление ФМ-состояния и магнитный переход либо в АФМ-состояние, либо в магнитно-неупорядоченное состояние ожидается при  $P \sim 8,4$  ГПа. Наши результаты также демонстрируют индуцированный давлением изоструктурный фазовый переход в ферромагнетике CrBr<sub>3</sub>, который происходит в диапазоне давлений 2,5–7 ГПа. Дополнительные аномалии в поведении давления частот колебательных мод, обнаруженные при  $P \sim 15$  ГПа, указывают на другое фазовое превращение, предположительно связанное с процессом металлизации.

## СПИН-СПИРАЛЬНАЯ МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА В ТРОЙНЫХ СИСТЕМАХ Fe-Al-M (M = Ga, B). РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

**Аяз Фернатович Абдуллин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ayazik@bk.ru*

**Ключевые слова:** ab initio, тройные сплавы, неколлинеарный магнетизм.

На сегодняшний день причины возникновения магнитного упорядочения типа волны спиновой плотности в сплавах Fe-Al [1] до конца не ясны и требуют дополнительных теоретических исследований. Добавка третьего элемента к Fe-Al открывает дополнительные возможности в исследованиях магнетизма подобных систем.

В настоящей работе были проведены квантово-механические расчеты [2] неколлинеарных магнитных структур в суперъячейках  $Fe_9Al_7$ ,  $Fe_9Al_6B$ ,  $Fe_9Al_6Ga$  и  $Fe_9Ga_7$  (рис. 1). Обнаружено, что основное состояние исследованных систем не является ферромагнитным ( $q = 0$ ), а представляет собой спин-спиральную структуру. Результат согласуется с данными экспериментов по рассеянию нейтронов для двойного сплава Fe(40%Al) [1].

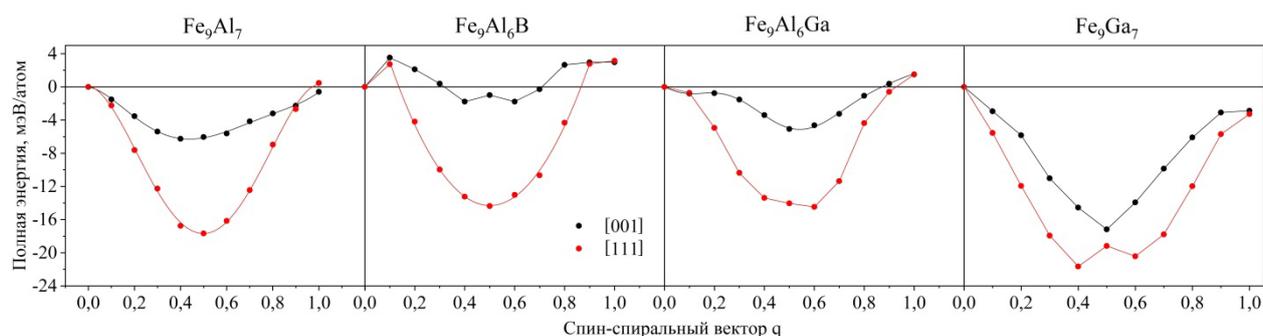


Рис. 1. Зависимость полной энергии от спин-спирального вектора  $q$

### Список литературы

1. *Noakes D.R.* Incommensurate spin density waves in iron aluminides / D.R. Noakes, A.S. Arrott, M.G. Belk et al. // *Physical Review Letters*. – 2003. – Vol. 91. – No. 21. – P. 217201.
2. *Laskowski R.* Magnetic structure and electric-field gradients of uranium dioxide: An ab initio study / R. Laskowski, G.K.H. Madsen, P. Blaha et al. // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – No. 14. – P. 140408.

## МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОСФАФЕРРОЦЕНОВ

Алмаз Линарович Зиннатуллин<sup>1</sup>, Людмила Ивановна Савостина<sup>1</sup>,  
Евгений Николаевич Дулов<sup>1</sup>, Фарит Габдулхакович Вагизов<sup>1</sup>,  
Алмаз Анварович Загидуллин<sup>2</sup>, Илья Александрович Безкишко<sup>2</sup>,  
Андрей Владимирович Петров<sup>2</sup>, Василий Анатольевич Милуков<sup>2</sup>,  
Рустэм Равилевич Заиров<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Казань, Институт органической и физической химии  
имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН  
*Russia, Kazan, Institute of Organic and Physical Chemistry  
named after A.E. Arbuzov FRC KazSC RAS*  
*E-mail: ALLZinnatullin@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** мессбауэровская спектроскопия, ферроцен, фосфор, квантово-химические расчеты.

Открытие ферроцена примерно 70 лет назад стало важной вехой в металлоорганической химии из-за его реакционной способности и уникальной стабильности сэндвич-каркаса [1]. Введение атома фосфора в остов ферроцена открывает доступ к новым надмолекулярным комплексам и координационным полимерам многомерной топологии со смешанными  $\sigma/\pi$ -координациями, не характерными для классических разновидностей ферроцена [2].

В работе приведены результаты мессбауэровских исследований ряда фосфаферроценов, различающихся числом атомов фосфора. Для лучшего понимания экспериментальных данных были проведены квантово-химические расчеты. Комбинированные мессбауэровские и DFT-исследования позволяют исследовать сверхтонкие взаимодействия ядер  $^{57}\text{Fe}$  с окружающими электронами на собственных орбиталях центрального иона железа, которые смешиваются с орбиталями циклопентадиенильных колец и образуют молекулярные орбитали. Кроме того, были проанализированы межмолекулярные колебательные свойства. На основании расчетов показаны изменения в составе молекулярных орбиталей и сопоставлены с опубликованными ранее электрохимическими данными.

### Список литературы

1. Štěpnička P. Forever young: the first seventy years of ferrocene / P. Štěpnička // Dalton Transactions. – 2022. – Vol. 51. – No. 21. – P. 8085–8102.
2. Petrov A.V. Synthesis, structure, and electrochemical properties of 4,5-diaryl-1,2,3-triphosphaferrocenes and the first example of multi(phosphaferrocene) / A.V. Petrov, A.A. Zagidullin, I.A. Bezkishko et al. // Dalton Transactions. – 2020. – Vol. 49. – No. 47. – P. 17252–17262.

## РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ НОВЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ДАННЫХ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

**Булат Айратович Бакиров**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: bulatbakirov@jinr.ru*

**Ключевые слова:** нейтронная томография, алгоритмы реконструкции данных, сверточные нейронные сети.

Метод компьютерной томографии с использованием различных типов излучения (рентгеновские лучи, нейтроны, электромагнитное поле и т. д.) получил широчайшее распространение и продолжает набирать популярность в таких смежных с физикой областях, как медицина, материаловедение, геология, археология и др. Нейтронная томография благодаря особым свойствам взаимодействия нейтронов с веществом занимает важное положение в современном материаловедении [1]. Большая глубина ее проникновения дает возможность исследовать массивные образцы без разрушения, а чувствительность к некоторым легким химическим элементам позволяет визуализировать их распределение по объему.

Однако данный метод имеет ряд нерешенных проблем: большая длительность эксперимента, низкое качество изображений, вычислительная ресурсоемкость для реконструкции трехмерных данных. Таким образом, развитие метода нейтронной томографии требует применения новых математических алгоритмов обработки и реконструкции данных. Наиболее перспективными в данной области являются алгоритмы, основанные на сверточных нейронных сетях и глубоком машинном обучении.

В данной работе была реализована и обучена сверточная нейронная сеть для предварительной обработки нейтронных радиографических изображений и проведен сравнительный анализ эффективности с существующими алгоритмами.

### Список литературы

1. *Podurets K.M. Modern Methods of Neutron Radiography and Tomography in Studies of the Internal Structure of Objects / K.M. Podurets, S.E. Kichanov, V.P. Glazkov et al. // Crystallography Reports. – 2021. – Vol. 66. – P. 254–266.*

## КОМБИНИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ И ИМПУЛЬСНЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ПЛАСТОВ

**Марат Николаевич Овчинников, Александр Геннадьевич Гаврилов**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: Marat.Ovcxhinnikov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** нестационарная фильтрация жидкостей, кривые восстановления давления, фильтрационные волны давления, пьезопроводность, гидропроводность.

В работе рассматриваются и анализируются фильтрационные параметры флюидонасыщенных пластов, которые можно рассчитать по данным нестационарных гидродинамических экспериментов типа кривых восстановления давления (КВД) с граничным условием типа функции Хевисайда, метода Хорнера и метода межскважинного гидропрослушивания типа взрывной волны с граничным условием в виде прямоугольного импульса по дебиту и метода фильтрационных волн давления (ФВД) с граничным условием в виде гармонической функции [1, 2] с использованием классического уравнения пьезопроводности по В.Н. Щелкачеву для пористого коллектора и уравнения для описания нестационарной фильтрации в трещиновато-пористых средах в модели Баренблатта – Уоррена – Рута. Показано, как дополнение результатов расчетов гидропроводности методами КВД и Хорнера результатами методов гидропрослушивания и ФВД позволяет уточнить значения гидропроводности и пьезопроводности в межскважинном пространстве, оценить неоднородность пласта, а для трещиновато-пористых сред рассчитать модельные параметры размерности времени [3].

### Список литературы

1. *Овчинников М.Н.* Тонкие вопросы интерпретации результатов метода фильтрационных волн давления / М.Н. Овчинников. – М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2021. – 110 с.
2. *Овчинников М.Н.* Интерпретация результатов исследований пластов методом фильтрационных волн давления / М.Н. Овчинников. – Казань: Новое знание, 2003. – 84 с.
3. *Овчинников М.Н.* Об одном способе определения дополнительных параметров трещиновато-пористых сред по результатам гидродинамических исследований скважин / М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов // Тенденции развития науки и образования. – 2022. – № 82. – Ч. 1. – С. 18–21.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛНЕЧНЫХ ВСПЫШЕК НА ВОЗМУЩЕННОСТЬ ИОНОСФЕРЫ ЗЕМЛИ ПО ДАННЫМ СЕТИ ГНСС-СТАНЦИЙ, РАСПОЛОЖЕННЫХ В ЕВРОПЕЙСКОЙ ЧАСТИ РФ

Денис Сергеевич Максимов, Денис Александрович Когогин,  
Игорь Альбертович Насыров, Ренат Вагизович Загретдинов  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: denis-maksimov16@yandex.ru*

**Ключевые слова:** ионосфера, ГНСС, полное электронное содержание, солнечная вспышка, магнитные бури, GPS, ГЛОНАСС, карты ПЭС.

Ранее изучение влияния солнечных вспышек на ионосферу в области Поволжского федерального округа (далее – ПФО РФ) не проводилось из-за малой плотности приемников глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС) на данной территории [1]. В связи с этим было проведено исследование изменения полного электронного содержания (ПЭС) и мощности навигационных сигналов над ПФО РФ в дни повышенной солнечной активности в сентябре 2017 г.

Проведенное нами исследование влияния солнечных вспышек и геомагнитных бурь на ионосферную погоду (за период с 5 по 12 сентября 2017 г.) производилось путем анализа изменения медианных вариаций ПЭС [2] над территорией ПФО РФ. Качество радиосвязи оценивалось по изменению отношения несущей к шуму, соответствующей сигналам частотных поддиапазонов L1 и L2, принимаемых ГНСС-станциями с навигационных спутников.

Результаты обработки показали, что наиболее активные возмущения ионосферы наблюдаются в периоды частых вспышек со значениями 0,15–0,5 TECU. Наибольший размах вариаций медианного значения ПЭС зафиксирован во время вспышки X2.2 (6 сентября). ПЭС в этом случае достигал 0,6 TECU. Исследуемая область в этот период была освещена Солнцем. Другие мощные вспышки X-класса (6 сентября – X9.3, 7 сентября – X1.3 и 8 сентября – X8.2) мгновенных изменений в медианных значениях ПЭС не вызвали, что, скорее всего, связано с нахождением исследуемой области в тени. Корреляции между вариациями ПЭС и магнитными бурями в атмосфере обнаружено не было. Также не было замечено значительного ухудшения качества сигнала со спутников.

### Список литературы

1. Сыроватский С.В. Влияние солнечных вспышек на ионосферу Земли в двадцать четвертом цикле солнечной активности / С.В. Сыроватский, Ю.В. Ясюкевич, А.М. Веснин и др. // Ученые записки физического факультета Московского государственного университета. – 2018. – № 4. – С. 1840403.

2. Когогин Д.А. Динамическая картина стимулированной мощным радиоизлучением области ионосферы, полученная по результатам совместного анализа снимков ночного неба в линии 630 нм и карт вариаций полного электронного содержания / Д.А. Когогин, И.А. Насыров, А.В. Шиндин и др. // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. – 2020. – Т. 63. – № 2. – С. 89–104.

## СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ СНИМКОВ НОЧНОГО НЕБА И ДВУМЕРНЫХ КАРТ ВАРИАЦИЙ ПОЛНОГО ЭЛЕКТРОННОГО СОДЕРЖАНИЯ В ПЕРИОД РАБОТЫ УНУ СТЕНД «СУРА»

**Валерий Викторович Емельянов, Денис Александрович Когогин,  
Денис Сергеевич Максимов, Игорь Альбертович Насыров,  
Александр Борисович Белецкий, Алексей Владимирович Шиндин,  
Савелий Максимович Грач, Ренат Вагизович Загретдинов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: evv960722@gmail.com*

**Ключевые слова:** ионосфера, искусственное свечение, 630 нм, ГНСС, ПЭС, карты ПЭС, УНУ Стенд «Сура».

В работе проведен совместный анализ снимков ночного неба и карт вариаций полного электронного содержания (ПЭС) области ионосферы, возмущенной мощным коротковолновым радиоизлучением стенда «Сура» для экспериментов 2021 и 2022 г., описана методика выделения областей искусственного свечения ионосферы на снимках ночного неба [1], представлен алгоритм построения карт вариаций ПЭС [2]. По результатам обработки оптических изображений обнаружено возникновение как эффекта стимулированного свечения ионосферы, так и подавления фонового свечения. Кроме того, имеются экспериментальные серии, когда свечение и подавление присутствуют одновременно в течение достаточно продолжительного времени. На основе совместного анализа пространственного положения и поведения во времени возникающих оптических эффектов и ПЭС-карт получено, что как области свечения ионосферы, так и области подавления фонового свечения сопровождаются уменьшением значений полного электронного содержания.

### Список литературы

1. Шиндин А.В. Пространственные характеристики области генерации искусственного свечения ионосферы в линии 630 нм при воздействии радиоизлучением стенда «Сура» / А.В. Шиндин, В.В. Клименко, Д.А. Когогин и др. // Известия вузов. Радиофизика. – 2017. – Т. 60. – № 11. – С. 949–966.

2. Когогин Д.А. Динамическая картина стимулированной мощным радиоизлучением области свечения ионосферы, полученная по результатам совместного анализа снимков ночного неба в линии 630 нм и карт вариаций полного электронного содержания / Д.А. Когогин, И.А. Насыров, А.В. Шиндин и др. // Известия вузов. Радиофизика. – 2020. – Т. 63. – № 2. – С. 89–104.

## ПРОТОТИП ГНСС-ПРИЕМНИКА НА БАЗЕ ОТЛАДОЧНОЙ ПЛАТЫ simpleRTK2B С МОДУЛЕМ u-blox ZED-F9P

**Артем Владимирович Соколов, Денис Александрович Когогин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: artemsokolov2017@mail.ru*

**Ключевые слова:** ГНСС, u-blox ZED-F9P, ПЭС, ионосфера.

В работе представлены результаты тестирования прототипа приемника глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС) на основе модуля u-blox ZED-F9P [1], разработанного на кафедре радиоэлектроники Института Физики КФУ. Основные исследуемые характеристики получены на основе двухчастотных фазовых измерений. Полученные результаты сравнивались с аналогичными данными, полученными с помощью профессиональных ГНСС-приемников Trimble Alloy и JAVAD TRE\_3L.

Лучшие результаты продемонстрировал приемник фирмы Trimble. Спорные результаты продемонстрировал приемник фирмы JAVAD. Общий уровень мощности навигационных сигналов частот L2 превосходит u-blox ZED-F9P при записи на одну антенну через сплиттер, но все еще остается на достаточно высоком уровне. Однако измерения вариации наклонного ПЭС и СКО демонстрируют обратное. Медианные уровни рядов остаточных индексов, таких, как rmsTEC, ROT, ROTI, полученных по ГНСС-измерениям, на приемнике u-blox ZED-F9P ниже, чем на JAVAD TRE\_3L, что оказалось неожиданным из-за разных ценовых сегментов рассмотренных ресиверов. Стоит заметить, что при длительных ионосферных экспериментах на приемнике u-blox ZED-F9P наблюдаются срывы фаз, что следует иметь в виду при обработке больших массивов данных. Данные срывы дают несущественный вклад в результирующую ионосферную картину.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-00043.*

### Список литературы

1. U-blox\_ZED-F9P\_InterfaceDescription\_(UBX-18010854) // U-blox. – 2019. – 273 p. – URL: <http://www.u-blox.com> (date accessed: 10.05.2020).

## ВЛИЯНИЕ РЕЖИМА УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВЯЗКОСТЬ НЕФТИ

**Руслан Альбертович Натфуллин, Евгений Александрович Марфин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: nruslan692@gmail.com*

**Ключевые слова:** высоковязкая нефть, ультразвук, вязкость.

Современное состояние нефтедобывающей отрасли характеризуется увеличением доли трудноизвлекаемых запасов нефти. В России доля таких запасов превышает 55 %, и поэтому проблема добычи и транспортировки высоковязких нефтей является актуальной. Одним из эффективных и экологически безопасных, но в то же время недостаточно изученных методов снижения вязкости нефти является ультразвуковое воздействие [1]. Изучение реологических свойств различных нефтей до и после ультразвуковой обработки показывает, что сразу после воздействия вязкость нефти снижается, но со временем вязкость восстанавливается, а в ряде случаев становится выше [2, 3].

В настоящей работе объектом исследования являлась нефть с одного из месторождений Татарстана, имевшая при температуре 20 °С вязкость, равную 70,1 мПа·с. По полученной температурной зависимости вязкости были определены коэффициенты, входящие в уравнение Аррениуса – Френкеля. Проведенный лабораторный эксперимент показал, что ультразвуковая обработка в течение одной минуты приводит, с одной стороны, к увеличению энергии активации вязкого течения с 33 до 40 кДж/моль, а с другой – к значительному уменьшению предэкспоненциального множителя с  $92,1 \cdot 10^{-6}$  до  $4,2 \cdot 10^{-6}$  мПа·с.

### Список литературы

1. *Mullakaev M.S.* Ultrasonic automated oil well complex and technology for enhancing marginal well productivity and heavy oil recovery / M.S. Mullakaev, V.O. Abramov, A.V. Abramova // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. – 2017. – Vol. 159. – P. 1–7. – DOI: 10.1016/j.petrol.2017.09.019.
2. *Kadyirov A.* Features of rheological behavior of crude oil after ultrasonic treatment / A. Kadyirov, J. Karaeva, E. Vachagina et al. // *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. – 2022. – DOI: 10.1007/s43153-022-00226-6.
3. *Марфин Е.А.* Влияние ультразвукового воздействия на температурные зависимости вязкости масел / Е.А. Марфин, А.А. Абдрашитов // Труды Всероссийской акустической конференции (Санкт-Петербург, 21–25 сентября 2020 г.). – СПб.: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020. – С. 163–170.

## АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ КАЛИБРОВКОЙ ЭЛЕКТРОННЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ В НЕФТЯНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

**Андрей Олегович Храмов, Марат Николаевич Овчинников,  
Александр Геннадьевич Гаврилов, Александр Иванович Деркач**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: hao73@yandex.ru*

**Ключевые слова:** автоматизированная система управления (АСУ), программируемый логический контроллер (ПЛК), автоматизированное рабочее место (АРМ) оператора, калибровка измерительных устройств, электрический сигнал, датчики давления, датчики температуры.

Работа посвящена применению технологий автоматизации к измерительным процессам. В ходе работы была создана автоматизированная система для калибровочной установки. На измерительных устройствах эталонные значения измеряемых величин задаются специальными высокоточными приборами. ПЛК измеряет величины выходных электрических сигналов измерительных устройств, преобразует их в числа и передает через Ethernet по протоколу Modbus TCP на АРМ оператора [1,2]. Приложение АРМ оператора (Windows forms) принимает данные с ПЛК, визуализирует их на экране и осуществляет человеко-машинный интерфейс с оператором [3]. Оно позволяет архивировать и обрабатывать данные, строить протоколы калибровки. Описанная автоматизированная система позволяет проводить калибровку любых электронных измерительных устройств (датчики давления, температуры, объемного расхода) с такими величинами выходных электрических сигналов, как напряжение, ток и частота. Автоматизированная система управления была протестирована на датчиках давления и температуры, используемых в нефтяной промышленности.

### Список литературы

1. Распределенная система ввода-вывода Fastwel I/O. – Fastwel, 2020.
2. Денисенко В.В. Протоколы и сети Modbus и Modbus TCP / В.В. Денисенко // Современные технологии автоматизации. – 2010 – № 4. – С. 90–94.
3. Разработка клиентских Windows-приложений на платформе Microsoft .NET Framework: учебный курс Microsoft / пер. с англ. – М.: Русская редакция; СПб.: Питер, 2008. – 624 с.

**ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС  
ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
НА БАЗЕ MASTERSCADA 4D**

**Денис Павлович Малышев, Марат Николаевич Овчинников,  
Александр Геннадьевич Гаврилов, Александр Иванович Деркач**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: den.malishev2014@gmail.com*

**Ключевые слова:** программируемый логический контроллер (ПЛК), среда разработки “MasterSCADA 4D”, пористая среда, метод фильтрационных волн давления.

Работа посвящена интегрированию отечественного программируемого логического контроллера “Fastwel IO” на базе среды разработки “MasterSCADA 4D” в лабораторную установку по исследованию пористых сред методом фильтрационных волн давления [1,2].

С каждым годом происходит модернизация различных измерительных лабораторных установок, что повышает их характеристики и открывает новые возможности. Программируемый логический контроллер “Fastwel IO”, интегрированный в лабораторную установку по изучению свойств пористых сред, позволяет автоматизировать управление установкой, получение и обработку данных исследований [3].

*Проект реализован в исследовательской лаборатории подземной гидродинамики кафедры радиоэлектроники Института физики Казанского (Приволжского) федерального университета.*

**Список литературы**

1. Руководство пользователя MasterSCADA 4D // ООО «ИнСАТ». – М., 2020.
2. MasterSCADA 4D // ООО «МПС софт». – URL: <https://masterscada.ru/masterscada4d> (дата обращения: 07.01.2023).
3. Учебно-лабораторный комплекс по применению автоматизированных систем для исследования явлений переноса в пористых средах: учебно-методическое пособие / М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов, А.И. Деркач и др. – Казань: Издательство Казанского университета, 2017. – 79 с.

## КОММУТАЦИОННОЕ ОБОРУДОВАНИЕ В ОТКАЗОУСТОЙЧИВЫХ СЕТЯХ

**Булат Фанисович Шафигуллин, Марат Николаевич Овчинников,  
Александр Геннадьевич Гаврилов, Вячеслав Александрович Маценко**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: BuFShafigullin@stud.kpfu.ru*

**Ключевые слова:** сетевые технологии, коммутационное оборудование, коммутаторы, SCADA-системы, промышленная автоматизация, информационная безопасность.

В работе описывается создание автоматизированного рабочего места (АРМ) оператора для учебно-лабораторного комплекса по применению автоматизированных систем для исследования явлений переноса в пористых средах. Проект реализован с использованием промышленных коммутаторов и отечественной SCADA-системы MasterSCADA 4D [1,2,3]. АРМ обеспечивает централизованное управление установками учебно-лабораторного комплекса, сбор и обработку данных с датчиков. Полученные данные находят применение в экспериментах по гидродинамическим исследованиям пластов и скважин [4].

### Список литературы

1. Построение коммутируемых компьютерных сетей: учебное пособие / Е.В. Смирнова, А.В. Пролетарский, И.В. Баскаков и др. – М.: Национальный открытый университет «ИНТУИТ»: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 367 с. – (Основы информационных технологий).
2. Руководство пользователя MasterSCADA 4D // ООО «ИнСАТ». – М., 2020.
3. MasterSCADA 4D // ООО «МПС софт». – URL: <https://masterscada.ru/masterscada4d> (дата обращения: 07.01.2023).
4. Овчинников М.Н. Интерпретация результатов исследований пластов методом фильтрационных волн давления / М.Н. Овчинников. – Казань: Новое знание, 2003. – 84 с.

## ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МИЦЕЛЛ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПРОМОТОРОВ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ МЕТОДОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**Денис Александрович Смолей**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: denissmolej@gmail.com*

**Ключевые слова:** диэлектрическая спектроскопия, мицеллярные растворы, гидратация, промоторы гидратообразования.

Газовые гидраты представляют собой соединения включения, состоящие из клатратной решетки, образованной молекулами воды и молекулами газа, заключенными в полостях решетки. Современная нефтегазовая промышленность очень часто встречается в своей практике с гидратами природного и попутного газов. Кроме негативных последствий в виде закупорки трубопроводов и скважин применение газовых гидратов несет и огромную пользу. Так, содержание природного газа в зонах вечной мерзлоты и океанического дна оценивается специалистами в  $3,8 \cdot 10^{15} \text{ м}^3$  [1]. Однако при падении давления гидрат разлагается на газ и воду. Также существуют проекты по применению гидратов для транспортировки и хранения газа. Так, задача по стабилизации газового гидрата и промотировании его образования является крайне актуальной [1–3].

В данной работе были исследованы диэлектрические свойства ряда водных растворов поверхностно-активных веществ (SDS, C6, C10, C12), по которым из модели Гросса были получены значения радиусов мицелл, числа агрегации, проводимость ионных оболочек и коэффициенты диффузии противоионов в оболочках мицелл. Также были проведены расчеты чисел гидратации по модели Кавелла. Параметры, полученные из этих двух моделей, предположительно можно использовать в качестве оценки эффективности изученных поверхностно-активных веществ в качестве промоторов гидратообразования.

### Список литературы

1. Газогидраты: технологии добычи и перспективы разработки: информационная справка // Аналитический центр при Правительстве Российской Федерации. – URL: <https://ac.gov.ru/files/publication/a/1437.pdf> (дата обращения: 10.01.2023).
2. Матвеева Т.В. Газогидраты: проблемы изучения и освоения / Т.В. Матвеева, Г.А. Черкашев // Федеральное агентство по недропользованию (Роснедра). – URL: <https://www.rosnedra.gov.ru/data/Files/File/2569.pdf> (дата обращения: 10.01.2023).
3. Шиц Е.Ю. Газовые гидраты: краткий обзор современных российских исследований в 2015–2020 гг. / Е.Ю. Шиц, В.В. Корякина, М.А. Варфоломеев и др. // Газовая промышленность. – 2021. – № 2 (812). – С. 46–56.

## ПРОБЛЕМА ИЕРАРХИИ В ТЕМНОМ СЕКТОРЕ КОСМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

**Александр Борисович Балакин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: alexander.balakin2011@yandex.ru*

**Ключевые слова:** темная энергия, темная материя, динамический эфир.

Согласно шутке известного космолога «темный сектор космических взаимодействий – это кузница темных явлений, комплекс которых наука предпочитает пока называть темной энергией и темной материей» [1].

Исследуя эти темные явления, члены нашей научной группы обнаружили следы конкретных физических взаимодействий, описанных следующими теориями:

- теория гравитации Эйнштейна;
- теория калибровочных полей Янга – Миллса;
- электродинамика Фарадея – Максвелла и аксионная электродинамика;
- теория спиноров Дирака;
- теория динамического эфира Джекобсона и теория цветного эфира.

Объединяя эти теоретические ингредиенты в дуэты, трио, квартеты и квинтеты, мы получили серию точных решений эволюционных уравнений [2–11], которые способны реконструировать все космические события, зафиксированные наблюдательными комплексами последнего поколения.

Остается ответить на вопрос: какова иерархия перечисленных типов взаимодействия и которое из них следует считать управляющим элементом?

В докладе собраны аргументы, согласно которым именно динамический эфир, представленный нормированным времениподобным векторным полем, ассоциированным с вектором скорости данного космического субстрата и воссоздающим привилегированную космическую систему отсчета, следует считать дирижером в этом темном оркестре. Представленные аргументы базируются на приведенных ниже ключевых публикациях нашей рабочей группы [2–11].

### Список литературы

1. Из частной переписки автора с профессором С.Д. Одинцовым (Барселона).
2. *Balakin A.B.* Einstein-Yang-Mills-aether theory with nonlinear axion field: Decay of color aether and the axionic dark matter production / A.B. Balakin, G.B. Kiselev // *Symmetry*. – 2022. – Vol. 14. – Is. 8. – Art. 1621 (1).

3. *Balakin A.B.* Einstein-Yang-Mills-aether theory with nonlinear axion field: Decay of color aether and the axionic dark matter production / A.B. Balakin, G.B. Kiselev // *Symmetry*. – 2022. – Vol. 14. – Is. 8. – Art. 1621 (2).
4. *Balakin A.B.* Einstein-Yang-Mills-aether theory with nonlinear axion field: Decay of color aether and the axionic dark matter production / A.B. Balakin, G.B. Kiselev // *Symmetry*. – 2022. – Vol. 14. – Is. 8. – Art. 1621 (3).
5. *Balakin A.B.* Interaction of the axionic dark matter, dynamic aether, spinor and gravity fields as an origin of oscillations of the fermion effective mass / A.B. Balakin, A.O. Efremova // *European Physical Journal C*. – 2021. – Vol. 81. – Is. 7. – Art. 674.
6. *Balakin A.B.* Nonlinear axion electrodynamics: Axionically induced electric flares in the early magnetized universe / A.B. Balakin, V.V. Bochkarev, A.F. Nizamieva // *Symmetry*. – 2021. – Vol. 13. – Is. 11. – Art. 2038 (1).
7. *Balakin A.B.* Nonlinear axion electrodynamics: Axionically induced electric flares in the early magnetized universe / A.B. Balakin, V.V. Bochkarev, A.F. Nizamieva // *Symmetry*. – 2021. – Vol. 13. – Is. 11. – Art. 2038 (2).
8. *Balakin A.B.* Magneto-electrostatics of axionically active systems: Induced field restructuring in magnetic stars / A.B. Balakin, D.E. Groshev // *Physical Review D*. – 2020. – Vol. 101. – Is. 2. – Art. 023009.
9. *Balakin A.B.* Spontaneous color polarization as a modus originis of the dynamic aether / A.B. Balakin, G.B. Kiselev // *Universe*. – 2020. – Vol. 6. – Is. 7. – Art. 95.
10. *Balakin A.B.* Polarization and stratification of axionically active plasma in a dyon magnetosphere / A.B. Balakin, D.E. Groshev // *Physical Review D*. – 2019. – Vol. 99. – Is. 2. – Art. 023006.
11. *Balakin A.B.* Axionic extension of the Einstein-aether theory: How does dynamic aether regulate the state of axionic dark matter? / A.B. Balakin, A.F. Shakirzyanov // *Physics of the Dark Universe*. – 2019. – Vol. 24. – Art. 100283.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МОДЕЛЕЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

**Дмитрий Евгеньевич Грошев, Денис Александрович Спасов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: groshevdmitri1@mail.ru, spasov.01@mail.ru*

**Ключевые слова:** нелинейная электродинамика, тензор энергии-импульса (ТЭИ), энергия точечного заряда.

В данной работе мы исследуем фундаментальные свойства нелинейной электродинамики на примере новой **гиперболически-логарифмической** модели, лагранжиан которой имеет следующий вид:

$$L = -F - \frac{A}{\beta} \operatorname{arth}(\beta F) - \frac{C}{2B} [\ln(1 + \beta F) + \ln(1 - \beta F)],$$

где  $F = F_{ik} F^{ik}$  – инвариант электромагнитного поля,  $A, B$  – безразмерные параметры,  $\beta$  – параметр размерности  $L^{\frac{1}{4}}$ .

Мы показываем, что в данной модели нарушается дуальная симметрия электродинамики. Также мы доказываем, что точечный заряд становится несингулярным, а его энергия – конечной. Мы вычисляем модельные параметры исходя из известных параметров электрона, а также идеи Абрагама – Лорентца (Abraham – Lorentz) о чисто электромагнитной природе массы электрона. Мы получаем выражения для компонент канонического и симметризованного тензоров энергии-импульса. Мы находим такие значения параметров, при которых рассматриваемая теория удовлетворяет условиям унитарности и причинности.

## СКАЛЯРНО ЗАРЯЖЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ И МЕЖЧАСТИЧНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ПОТЕНЦИАЛОМ ХИГГСА

**Юрий Геннадиевич Игнатъев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: yurii.ignatev.1947@yandex.ru*

**Ключевые слова:** скалярно заряженные частицы, скалярное поле, потенциал Хиггса, сингулярный источник, движение скалярного заряда.

Получены асимптотически точные решения для сферически симметричного поля с потенциалом Хиггса, порождаемого точечным скалярным зарядом, и предложен метод численного интегрирования уравнения для скалярного поля с потенциалом Хиггса с точечным зарядом. Приведены примеры численного моделирования скалярного поля одиночного заряда. С помощью полученного результата найдены решения релятивистских уравнений движения скалярного заряда во внешнем скалярном поле типа Хиггса сингулярного скалярного источника и выявлены некоторые уникальные свойства межчастичного скалярного взаимодействия. В частности:

1. Получены интегралы движения пробного скалярного заряда в поле с потенциалом Хиггса одиночного сингулярного заряда.

2. С помощью найденных интегралов движения исследованы допустимые области движения пробного скалярного заряда и найдены точки поворота, которых оказывается несколько.

3. Показано, что одним и тем же значениям углового момента и полной энергии могут соответствовать несколько круговых орбит, определяемых начальными условиями.

4. Построены численные модели движения скалярно заряженной частицы в поле с потенциалом Хиггса одиночного сингулярного заряда. Показано, что траектории являются незамкнутыми розетками.

5. Исследовано радиальное падение скалярно заряженной частицы на одиночный сингулярный заряд. Показано, что при больших значениях полной энергии пробная частица отталкивается от скалярного заряда, а при малых совершает радиальные колебательные движения.

## УСТОЙЧИВОСТЬ НЕЙТРОННЫХ ЗВЕЗД В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ С НЕМИНИМАЛЬНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ СВЯЗЬЮ

**Павел Евгеньевич Кашаргин, Сергей Владимирович Сушков**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: pkashargin@mail.ru, sergey\_sushkov@mail.ru*

**Ключевые слова:** нейтронные звезды, теория гравитации Хорндески.

Нейтронные звезды рассматривались в различных классах теории гравитации Хорндески. В недавних исследованиях были изучены линейные возмущения статических сферически симметричных нейтронных звезд в полной теории гравитации Хорндески, получены скорости распространения возмущений и условия устойчивости конфигурации нейтронных звезд. В данной работе мы применяем эти результаты к исследованию устойчивости нейтронных звезд в теории гравитации с неминимальной производной связью тензора Эйнштейна и скалярного поля, со стандартным кинетическим членом скалярного поля и космологической постоянной. Данная модель была рассмотрена нами в предыдущей работе для вещества, удовлетворяющего уравнению состояния политропы, были получены диаграммы масса-радиус звезды при различных значениях параметра неминимальной связи  $\ell$  и космологической постоянной  $\xi$ . В настоящей работе мы показываем, что данная модель устойчива в широком диапазоне параметров модели  $\ell$  и  $\xi$ , и квадраты скоростей возмущений  $c_r^2$ ,  $c_\Omega^2$ ,  $c_{r3}^2$ ,  $c_{\Omega\pm}^2$  и  $K$  положительны.

## КЛАССИФИКАЦИЯ ЭНДОМОРФИЗМОВ АЛГЕБРЫ ТЕПЛИЦА

Алла Юрьевна Кузнецова

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: alla.kuznetsova@gmail.com*

**Ключевые слова:**  $C^*$ -алгебра, алгебра Теплица, эндоморфизм, автоморфизм, оператор частичной изометрии.

Алгеброй Теплица называется  $C^*$ -алгебра, порожденная всеми теплицевыми операторами с непрерывными символами, действующими на пространстве Харди  $H^2(T)$  единичной окружности  $T$ . Нетрудно проверить, что алгебра Теплица порождается оператором правого сдвига  $T_z$  и его сопряженным. Из теоремы Кобурна следует, что все  $C^*$ -алгебры, порожденные неунитарными изометриями, канонически изоморфны. Поэтому алгебру Теплица можно считать универсальной  $C^*$ -алгеброй, порожденной одной неунитарной изометрией.

Алгебра Теплица является расширением алгебры  $C(T)$  функций, непрерывных на окружности, с помощью алгебры компактных операторов на  $H^2(T)$ . Любой автоморфизм алгебры Теплица порождает автоморфизм на  $C(T)$  и сохраняющий ориентацию гомеоморфизм единичной окружности, обратное тоже верно. В докладе будут классифицироваться инъективные эндоморфизмы алгебры Теплица.

**Лемма 1.** Существует полугрупповой изоморфизм между полугруппой сохраняющих единицу эндоморфизмов и полугруппой неунитарных изометрий в алгебре Теплица.

**Теорема 1.** Существует сюръективный групповой гомоморфизм из группы автоморфизмов алгебры Теплица в связную окрестность единицы группы автоморфизмов  $C(T)$ , и его ядро совпадает с группой внутренних автоморфизмов.

**Теорема 2.** Полугруппа инъективных эндоморфизмов является градуированной по мультипликативной полугруппе натуральных чисел. Все эндоморфизмы порождаются частичными изометриями вида  $VP$ , причем  $VP = PVP$ , где  $P$  – проектор и  $V$  – неунитарная изометрия.

### Список литературы

1. Coburn L.  $C^*$ -algebra generated by an isometry I / L. Coburn // Bulletin of the American Mathematical Society. – 1967. – No. 73. – P. 722–726.
2. Murphy G.J.  $C^*$ -algebras and operator theory / G.J. Murphy. – N.Y.; London: Academic Press, 1990.
3. Huef A. Structure theorems for star-commuting power partial isometries / A. Huef, I. Raeburn, I. Tolich // Linear algebra and its applications. – Elsevier, 2015. – Vol. 481. – P. 107–114.

**МЕТОД РЕКОНСТРУКЦИИ  
В СКАЛЯРНО-ТЕНЗОРНОЙ ТЕОРИИ ХОРНДЕСКИ  
В РАМКАХ КОСМОЛОГИИ БИАНКИ-I**

**Руслан Камильевич Мухарлямов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: rmukhar@mail.ru*

**Ключевые слова:** теория гравитации Хорндески, анизотропные космологические модели, метод реконструкции.

Предлагается метод реконструкции для подкласса теории Хорндески:  $G_4 = 1/(16\pi)$ ,  $G_5 \sim \phi$ ,  $G_2(X) \neq 0$ ,  $G_3(X) \neq 0$ . Этот метод развивается в рамках космологической модели Биянки-I. Параметр Хаббла  $H(t)$  и канонический кинетический член  $X(t)$  задаются априори. Выбор функции  $X(t)$  определяет анизотропные свойства Вселенной. Это дает возможность обеспечить правдоподобную динамику анизотропии Вселенной. Метод позволяет для выбранной модели Вселенной просто реконструировать некоторую скалярную теорию поля. Приведен пример реконструкции для анизотропной модели постинфляционного перехода в радиационно-доминированную фазу Вселенной. Модель исследуется на наличие призраков и лапласовских неустойчивостей.

## ОБ УНИВЕРСАЛЬНЫХ И РЕДУЦИРОВАННЫХ ПОЛУГРУППОВЫХ $C^*$ -АЛГЕБРАХ

**Игорь Сергеевич Бердников, Ренат Нельсонович Гумеров,  
Екатерина Владимировна Липачева, Евгений Владимирович Патрин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: mciya3857@gmail.com, renat.gumerov@kpfu.ru,*

*elipacheva@gmail.com, Evgeniipatrin@mail.ru*

**Ключевые слова:** универсальная  $C^*$ -алгебра, редуцированная полугрупповая  $C^*$ -алгебра, полупрямое произведение полугрупп.

Универсальные конструкции играют важную роль в некоммутативной топологии. Многие  $C^*$ -алгебры могут быть достаточно просто описаны как универсальные  $C^*$ -алгебры в терминах порождающих и соотношений. Универсальная  $C^*$ -алгебра – это абстрактная  $C^*$ -алгебра  $C^*(X, R)$ , порожденная множеством порождающих  $X = \{x_j \mid j \in I\}$ , удовлетворяющих некоторым свойствам  $R$ . Эта алгебра обладает следующим универсальным свойством. Пусть  $A$  – произвольная  $C^*$ -алгебра и  $\{a_j \mid j \in I\}$  – некоторое подмножество ее элементов, удовлетворяющее свойствам  $R$ . Тогда для сопоставления  $\pi : x_j \rightarrow a_j, j \in I$  существует единственный  $*$ -гомоморфизм  $\Phi$ , делающий коммутативной некоторую диаграмму. В докладе обсуждаются универсальные свойства редуцированных полугрупповых  $C^*$ -алгебр для дискретных полугрупп. Это операторные алгебры, которые порождаются левым регулярным представлением полугрупп с левым сокращением. В основе данной теории лежит идея описания таких  $C^*$ -алгебр в терминах изометрий и попытка выявить связи между свойствами полугрупп и свойствами соответствующих полугрупповых  $C^*$ -алгебр. Так, например, изучение расширений полугрупп и изучение соответствующих редуцированных полугрупповых  $C^*$ -алгебр тесно связаны [1–3]. Пусть  $Z$  – аддитивная группа целых чисел,  $Z^\times := Z \setminus \{0\}$  – мультипликативная полугруппа целых чисел без нуля. Зададим представление  $\varphi : Z^\times \rightarrow \text{End}(Z)$  полугруппы  $Z^\times$  в полугруппу эндоморфизмов  $Z$  либо тождественным отображением, либо инверсией. Тогда полупрямое произведение  $Z \rtimes \varphi Z^\times$  является полугруппой с сокращением. В работе [3] рассматривалась редуцированная полугрупповая  $C^*$ -алгебра  $C_r^*(Z \rtimes \varphi Z^\times)$ . В настоящем докладе, в частности, определяется множество порождающих  $X$  и соотношений  $R$ , относительно которых  $C^*$ -алгебра  $C_r^*(Z \rtimes \varphi Z^\times)$  описывается как универсальная  $C^*$ -алгебра  $C^*(X, R)$ .

### Список литературы

1. *Липачева Е.В.* Расширения полугрупп и морфизмы полугрупповых  $C^*$ -алгебр / Е.В. Липачева // Сибирский математический журнал. – 2021. – Т. 62. – № 1. – С. 82–96.
2. *Berdnikov I.S.* On the Stone-Čech compactification functor and the normal extensions of monoids / I.S. Berdnikov, R.N. Gumerov, E.V. Lipacheva // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2021. – Vol. 42. – No. 10. – P. 2295–2305.
3. *Липачева Е.В.* Расширение полугрупп с помощью диэдральной группы и полугрупповые  $C^*$ -алгебры / Е.В. Липачева // Теория функций, теория операторов и квантовая теория информации: сборник тезисов Международной конференции (Уфа, 4–7 октября 2021 г.). – Уфа: Аэтерна, 2021. – С. 26–27.

**ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ  
В ПОЛНОЙ МОДЕЛИ КОСМОЛОГИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ  
НА ОСНОВЕ КЛАССИЧЕСКОГО СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ  
С ХИГГСОВЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ**

**Алсу Ринатовна Самигуллина**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: alsu\_sam@mail.ru*

**Ключевые слова:** космологические модели, поля Хиггса, гиперповерхности Эйнштейна – Хиггса, глобальное поведение.

Проведено исследование и компьютерное моделирование полной модели космологической эволюции классического скалярного поля с хиггсовым потенциалом без предположения о неотрицательности постоянной Хаббла. Показано, что в большинстве случаев начальных условий космологическая модель переходит из стадии расширения в стадию сжатия. Таким образом, космологические модели, основанные на классическом поле Хиггса, неустойчивы по отношению к конечным возмущениям [1].

**Список литературы**

1. *Ignat'ev Yu.G. Complete cosmological evolution model of a classical scalar field with a Higgs potential. III. Features of phase trajectory flows / Yu.G. Ignat'ev, A.R. Samigullina // Russian Physics Journal. – 2022. – Vol. 64. – No. 10. – P. 1808–1814.*

## УСТОЙЧИВОСТЬ ГРАВИТАЦИОННО-СВЯЗАННОГО КОНДЕНСАТА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БОЗОНОВ

**Никита Алексеевич Самородов, Владимир Александрович Попов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: niksamorodov@gmail.com, vladipopov@mail.ru*

**Ключевые слова:** конденсат Бозе – Эйнштейна, темная материя, устойчивость бозе-звезд.

Один из ключевых вопросов современной астрофизики и космологии – природа темной материи (ТМ). Прямыми методами наблюдения ее скопления обнаруживаются в галактиках с помощью наблюдения за кривыми вращения и по данным гравитационного линзирования. Однако до сих пор неизвестно, какие частицы составляют ТМ, поскольку единственным проявлением этих частиц является гравитационное воздействие на «видимые» объекты. Многочисленные эксперименты для различных частиц, которые рассматриваются как возможные кандидаты в ТМ, положительного результата пока дали.

Одна из моделей ТМ предполагает, что легкие бозоны образуют компактные гравитационно-связанные конденсаты Бозе – Эйнштейна, которые называют бозе-звездами. Равновесие в таком конденсате может достигаться за счет так называемого квантового давления или отталкивающего взаимодействия между частицами.

В настоящей работе мы исследуем на устойчивость нерелятивистские бозе-звезды, где доминирующим механизмом равновесия является взаимодействие между бозонами. Обычно устойчивость нерелятивистских звезд рассматривается в приближении Каулинга, т. е. без учета возмущений гравитационного потенциала. Численные расчеты показывают, что в этом приближении возмущения в бозе-звездах носят осциллирующий характер как для радиальных, так и нерадиальных мод.

В данной работе при исследовании на устойчивость гравитационно-связанного конденсата приближение Каулинга не используется. Показано, что и в этом случае малые отклонения от равновесия не приводят к возникновению растущих мод как для радиальных, так и нерадиальных возмущений.

**АНИЗОТРОПНЫЕ КОСМОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ  
ТИПА БИАНКИ I, V И IX В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ  
С НЕМИНИМАЛЬНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ СВЯЗЬЮ**

**Рафкат Газинурович Галеев, Сергей Владимирович Сушков**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: rafggaleev@stud.kpfu.ru, sergey\_sushkov@mail.ru*

**Ключевые слова:** теория гравитации Хорндески, неминимальная кинетическая связь, анизотропные космологические модели.

В данной работе исследуются анизотропные космологические модели типа Бианки I, V, IX в скалярно-тензорной теории гравитации с неминимальной кинетической связью скалярного поля с кривизной (подкласс общей теории Хорндески). Выписан частный вид уравнений гравитационного и скалярного полей для этих моделей. Получены и проанализированы космологические решения полевых уравнений. Показано, что для всех трех моделей работает механизм экранировки анизотропии на ранних стадиях эволюции Вселенной.

## АКСИОННАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА В АНИЗОТРОПНЫХ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ТИПА БИАНКИ

**Амир Фаридович Шакирзянов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: AmFShakirzyanov@stud.kpfu.ru*

**Ключевые слова:** аксионы, аксионная электродинамика, анизотропные космологические модели.

Теория динамического эфира относится к классу модифицированных теорий гравитации и представлена в фундаментальной работе [1]. В рамках аксионного расширения мы исследуем расширенные основные уравнения при наличии электромагнитного поля для анизотропных однородных космологических моделей типа Бианки-I. Эти модели гарантируют, что скорость эфира обладает сдвигом, и мы акцентируем внимание на его роли в эволюции аксионно-фотонных систем. Мы обсудили расширенные основные уравнения, полученные в предположении, что скаляр растяжения и квадрат тензора сдвига скорости динамического эфира включены в потенциал аксионного поля. Ранее мы уже исследовали аксион-фотонные взаимодействия в рамках нелинейной электродинамики для анизотропной однородной космологической модели типа Бианки-VI в работе [2].

### Список литературы

1. *Jacobson T. Gravity with a dynamical preferred frame / T. Jacobson, D. Mattingly // Physical Review D. – 2001. – No. 64. – P. 024028.*
2. *Шакирзянов А.Ф. Взаимодействие аксионной темной материи с электромагнитным полем в анизотропной однородной Вселенной типа Бианки V и VI / А.Ф. Шакирзянов, А.Б. Балакин // Ученые записки физического факультета Московского государственного университета. – 2022. – № 4. – С. 2241509.*

## АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ ГИППОКАМПАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

**Алексей Анатольевич Колчев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: kolchevaa@mail.ru*

**Ключевые слова:** гиппокампальная активность, фильтрация сигнала, эмпирическая модовая декомпозиция.

Одним из типов синхронизированной активности в нейронных сетях головного мозга являются ранние острые волны – синхронные сетевые разряды нейронных ансамблей, наблюдаемые в развивающемся гиппокампе. Регистрация электрической гиппокампальной активности проводилась с помощью 16-канального электрода. Сигнал в отдельном канале представляет собой низкочастотный сигнал (менее 8 Гц) с большой амплитудой, на который накладываются колебания с более высокой частотой (более 8 Гц) и значительно (в 10–20 раз) меньшей амплитудой [1]. Наибольший интерес представляют колебания с высокой частотой, которые обычно выделяются с использованием полосовых фильтров с полосой пропускания 8–80 Гц [1]. Как показал анализ модельных и экспериментальных сигналов, из-за пилообразного вида сигналов и их несимметричности применение таких фильтров приводит к появлению дополнительных составляющих в сигнале, смещению положения его экстремумов и уменьшению несимметричности колебания.

В работе предлагается проводить низкочастотную фильтрацию с помощью функции локального удаления полиномиального тренда. Параметрами такой функции являются степень полинома и отрезки данных, для которых применяется функция. Фильтрацию высокочастотной составляющей проводили с помощью алгоритма эмпирической модовой декомпозиции. Реализация предлагаемых алгоритмов сигналов позволила устранить искажения сигналов, возникающие из-за применения полосовых фильтров.

### Список литературы

1. *Hagler D.J., Jr. Heterogeneous Origins of Human Sleep Spindles in Different Cortical Layers / D.J. Hagler, Jr., I. Ulbert, L. Wittner // The Journal of Neuroscience. – 2018. – Vol. 12. – Is. 38. – P. 3013–3025.*

## ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ ДЛЯ УДАЛЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ РОБОТИЗИРОВАННЫМИ УСТРОЙСТВАМИ

Ася Евгеньевна Зыкова, Евгений Юрьевич Зыков,  
Влада Владимировна Кугуракова  
Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: Evgeniy.Zykov@kpfu.ru

**Ключевые слова:** виртуальная реальность, телеуправление, робототехника, киберболезнь.

Предметом данного исследования является возможность телеуправления роботизированным устройством с использованием технологий виртуальной реальности. Дан анализ технологий интеллектуальных систем управления и рассмотрены примеры реализации использования технологий виртуальной реальности в телеробототехнике, благодаря чему выделены общая структура системы удаленного управления и основные проблемы в рамках реализации настоящего проекта. На основе проведенного анализа разработана и реализована универсальная программно-аппаратная платформа телеуправления на платформе Unity. Представлена архитектура приложения и реализована система управления выбором направления перемещения роботизированной единицы с использованием при этом одного из VR-контроллеров. Подробно рассмотрены реализованные алгоритмы получения качественного стереоскопического зрения в устройствах виртуальной реальности и методика синхронизация удаленного поворота стереопары, а также описана система передачи команд. Проведены эксперименты по использованию реализованной системы для проверки соответствия ее необходимым требованиям с целью получения надлежащего качества. Измерено время отклика системы и произведена минимизация задержек в канале связи. Разработанное программное обеспечение для телеуправления роботизированной единицей при помощи гарнитуры виртуальной реальности обеспечивает возможность устойчивого телеуправления удаленной роботизированной техникой.

### Список литературы

1. *Lipton J.I.* Baxter's homunculus: Virtual reality spaces for teleoperation in manufacturing / J.I. Lipton, A.J. Fay, D. Rus // IEEE Robotics and Automation Letters. – 2018. – Vol. 3. – No. 1. – P. 179–186. – DOI: 10.1109/lra.2017.2737046.
2. *Whitney D.* ROS reality: A virtual reality framework using consumer-grade hardware for ROS-enabled robots / D. Whitney, E. Rosen, D. Ullman et al. // Proceedings of the IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS). – 2018. – P. 1–9. – DOI: 10.1109/IROS.2018.8593513.
3. *Zhang T.* Deep imitation learning for complex manipulation tasks from virtual reality teleoperation / T. Zhang, Z. McCarthy, O. Jowl et al. // Proceedings of IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA). – 2018. – P. 5628–5635. – DOI: 10.1109/ICRA.2018.8461249.

## АВТОМАТИЗАЦИЯ ОЦЕНКИ ЗЕНИТНОЙ ТРОПОСФЕРНОЙ ЗАДЕРЖКИ СИГНАЛОВ СПУТНИКОВЫХ НАВИГАЦИОННЫХ СИСТЕМ

**Элина Маратовна Митушева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: mitushieva@mail.ru*

**Ключевые слова:** зенитная тропосферная задержка, ГНСС.

В современном мире задачи позиционирования решаются с использованием глобальных навигационных спутниковых систем. Серьезными источниками погрешности являются задержки сигналов в ионосфере и в нижней части атмосферы. Задержку в нижней, нейтральной части атмосферы принято называть тропосферной задержкой. Ее величина зависит от физических свойств атмосферы и от пути, который сигнал проходит через атмосферу. Этот путь минимален, если спутник находится в зените, задержку в это случае называют зенитной тропосферной задержкой.

Целью данной работы является автоматизация оценки зенитной тропосферной задержки сигналов спутниковых навигационных систем программно-аппаратного комплекса мониторинга атмосферы Казанского Федерального университета с использованием программного обеспечения TropoGNSS и выявление зависимости оценки зенитной тропосферной задержки от зенитного угла спутника, количества спутников и расстояния до них.

TropoGNSS – программное обеспечение для мониторинга параметров атмосферы и движений земной коры, рассчитываемых по измерениям сигналов глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС). Данное приложение разработано в Казанском федеральном университете.

### Список литературы

1. Хуторова О.Г. Зондирование атмосферы и ионосферы радиосигналами спутниковых навигационных систем: учебное пособие / О.Г. Хуторова. – Казань: Издательство Казанского университета, 2014. – 117 с.
2. TropoGNSS // Официальный сайт Казанского федерального университета. – URL: [https://kpfu.ru/main?p\\_id=38136&p\\_lang=&p\\_personal\\_menu\\_id=1244](https://kpfu.ru/main?p_id=38136&p_lang=&p_personal_menu_id=1244) (дата обращения: 25.12.2022).

**АВТОМАТИЗАЦИЯ ОЦЕНКИ  
ИНТЕГРАЛЬНОГО ВЛАГОСОДЕРЖАНИЯ  
В СИСТЕМЕ СПУТНИКОВОГО МОНИТОРИНГА АТМОСФЕРЫ**

**Александра Антоновна Алейникова**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: aaleynikova00@gmail.com*

**Ключевые слова:** интегральное влагосодержание, спутниковые навигационные системы, дистанционное зондирование.

Атмосферный водяной пар играет ключевую роль в тепловом балансе, а одной из важнейших характеристик, которая влияет на баланс атмосферы, является интегральное влагосодержание (IWV). В настоящее время должно быть уделено внимание расширению методов измерений, а также автоматизации оценки данной характеристики. Интегральное влагосодержание (IWV) является интегралом по высоте от плотности пара.

Использование сигналов глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС) является одним из распространенных методов дистанционного зондирования интегрального влагосодержания. Методы зондирования преимущественно основаны на использовании фазовой задержки сигнала на частотах L1 и L2 (1575,42 и 1227,60 МГц).

Целью данной работы является автоматизация оценки интегрального атмосферного влагосодержания, полученного по фазовым измерениям приемников спутниковых навигационных систем. С помощью программы, написанной на языке программирования Python, создается веб-интерфейс доступа к данным спутниковых измерений, где строятся следующие измерения: C1, D1, S1, L1 и L2. Веб-интерфейс также демонстрирует данные о влагосодержании и настраивается в комплексе мониторинга атмосферы Казанского федерального университета.

**Список литературы**

1. Хуторова О.Г. Зондирование атмосферы и ионосферы радиосигналами спутниковых навигационных систем: учебное пособие / О.Г. Хуторова. – Казань: Издательство Казанского университета, 2014. – 117 с.
2. Анализ влагосодержания атмосферы по данным приемников GPS // Официальный сайт Института радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова Российской академии наук – URL: <http://cplire.ru> (дата обращения: 06.01.2023).

## МОНИТОРИНГ МЕЗОМАСШТАБНЫХ КОНВЕКТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ ГНСС-СИГНАЛАМИ

**Дарья Борисовна Иванова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: daraivanova99937@gmail.com*

**Ключевые слова:** ГНСС, мезомасштабные конвективные процессы.

Мезомасштабные конвективные явления часто связаны с возникновением сильных ливней, гроз и шквалов, которые приводят к серьезным последствиям. Мониторинг мезомасштабных конвективных явлений представляет собой чрезвычайно сложную задачу, для решения которой необходимо учитывать максимально полную информацию о наблюдаемом состоянии атмосферы и его ожидаемых изменениях [1].

В данной работе решается задача мониторинга мезомасштабных конвективных процессов с использованием всепогодной технологии с высоким и пространственным разрешением – зондирования тропосферы сигналами глобальной навигационной спутниковой системы (ГНСС).

Принято решение исследовать базу данных штормовых событий Национальной метеорологической службы (NWS)NOAA, которая содержит данные с января 1950 г. по сентябрь 2022 г. [2]. В ходе исследования было выявлено, что методы сбора данных существенно изменились с течением времени.

Исследовано местоположение мезомасштабных конвективных процессов и выполнен поиск станций, ближайших к зарегистрированным опасным явлениям. Выявлена связь между параметрами атмосферы, измеряемыми с помощью ГНСС-приемников, и характеристиками конвективных процессов.

### Список литературы

1. Дистанционное зондирование тропосферы и конвективные процессы / О.Г. Хуторова, М.В. Маслова, В.Е. Хуторова и др. // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса (физические основы, методы и технологии мониторинга окружающей среды, потенциально опасных явлений и объектов): сборник тезисов Двадцатой международной конференции (Москва, 14–18 ноября 2022 г.). – М.: Институт космических исследований Российской академии наук, 2022. – URL: <http://conf.rse.geosmis.ru/> (дата обращения: 02.01.2023).

2. База данных штормовых событий Национальной метеорологической службы (NWS)NOAA. – URL: <https://www.ncdc.noaa.gov/stormevents/> (дата обращения: 28.12.2022).

**СВЯЗЬ СЕЗОННЫХ ВАРИАЦИЙ ВЫСОТНЫХ ПАРАМЕТРОВ  
ДНЕВНЫХ СРЕДНЕМАСШТАБНЫХ ПИВ  
С СЕЗОННЫМИ ВАРИАЦИЯМИ СКЛОНЕНИЯ ГЕОМАГНИТНОГО  
ПОЛЯ И НАКЛОНОМ КОЛЬЦЕВОГО ТОКА**

**Адель Джавидович Акчурин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: adel.akchurin@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** перемещающиеся ионосферные возмущения, ПИВ, ионограмма, кольцевой ток, Sq-ток.

В настоящей работе было решено проверить действенность возможной связи между вариациями высотных параметров среднemasштабных перемещающихся ионных возмущений (СМ ПИВ в виде прокси-параметра – сжатости касповой части слоя F, косвенно описывающего полуширину слоя F [1]), регистрируемых на ионозонде КФУ, и вариациями склонения геомагнитного поля D. Выявлены схожие сезонные тренды в межсуточных вариациях  $\sim 4$  мин/день в магнитном склонении на экваториальных станциях [2]. Такой тренд имеют появляемость схожих осенних СМ ПИВ и изменение среднесуточного склонения, что указывает на возможную связь между появляемостями СМ ПИВ и искажениями в Sq-токовой системе.

Продолжительный поиск в литературе сезонных трендов  $\sim 4$  мин/день в различных ионосферных параметрах и искажениях токовых Sq-вихрей позволил найти близкий сезонный сдвиг  $\sim 4$  мин/день во времени появления второго максимума в суточных вариациях вертикального ПЭС в тропической ионосфере [3].

**Список литературы**

1. *Akchurin A.* Isolation of the Small-Scale and Weak Medium-Scale TIDs on Daytime Midlatitude Ionograms / A. Akchurin, G. Smirnov, V. Ildiryakov // Proceedings of 34<sup>th</sup> URSI GASS, 2021. – URL: <https://doi.org/10.23919/URSIGASS51995.2021.9560394>.
2. *Fukushima N.* Some topics and historical episodes in geomagnetism and aeronomy / N. Fukushima // Journal of Geophysical Research. – 1994. – Vol. 99 (A10). – P. 19113–19142. – URL: <https://doi.org/10.1029/94JA00102>.
3. *Wang R.* Research on the ionospheric diurnal Double-Maxima patterns in Asia-Australian area based on the VTEC observations of BDS geostationary satellites / R. Wang, P. Chen, Y. Yao et al. // Advances in Space Research. – 2022. – Vol. 69 (10). – P. 3705–3716. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.asr.2022.02.041>.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОНОГРАММ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ДНЕВНЫХ СМ ПИВ

**Артур Эдуардович Сайфутдинов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: artur.sayf@mail.ru*

**Ключевые слова:** физика ионосферы, перемещающиеся ионосферные возмущения, ионограмма, численная модель.

В настоящей работе описано моделирование ионограмм на основе измерений электронной концентрации на высотах порядка 120–400 км при прохождении дневных среднемасштабных перемещающихся ионных возмущений (СМ ПИВ), полученных при помощи радара некогерентного рассеяния в обсерватории Аресибо [1]. Целью работы является выявление сходства между смоделированными ионограммами и экспериментальными, получаемыми учеными Казанского федерального университета, что может указывать на общую природу ионосферных возмущений над континентальной частью России и над Пуэрто-Рико.

В работе используется численное моделирование в среде Matlab. Для проверки правильности работы модели используется подмена экспериментальных данных электронной концентрации сгенерированными значениями для идеального параболического слоя и выполнено сопоставление с моделированиями других авторов [2, 3]. При моделировании учитывается влияние магнитного поля Земли с фиксированными значениями наклона силовых линий и гиромангнитной частоты. Для упрощения расчетов влияние соударений на распространение радиоволн не учитывается.

### Список литературы

1. *Djuth F.T.* Arecibo's thermospheric gravity waves and the case for an ocean source / F.T. Djuth, L.D. Zhang, D.J. Livneh et al. // *Journal of Geophysical Research*. – 2010. – No. 115. – P. 08305. – URL: <https://doi.org/10.1029/2009JA014799>.
2. *Lou P.* Numerical study of traveling ionosphere disturbances with vertical incidence data / P. Lou, N. Wei, L. Guo et al. // *Advances in Space Research*. – 2020. – No. 65. – P. 1306–1320. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.10.020>.
3. *Jiang C.* A study of the F2 layer stratification on ionograms using a simple model of TIDs / C. Jiang, G. Yang, J. Liu et al. // *Journal of Geophysical Research*. – 2019. – No. 124. – P. 1317–1327. – URL: <https://doi.org/10.1029/2018JA026040>.

## ТОНКАЯ ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МЕТЕОРНЫХ ПОТОКОВ ГЕМИНИДЫ И КВАДРАНТИДЫ ПО РАДИОЛОКАЦИОННЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ 2016–2022 ГГ.

**Аркадий Васильевич Карпов, Дмитрий Викторович Коротышкин,  
Владимир Валерьевич Жарков**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Arkadi.Karpov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** метеорный поток, структура, статистический критерий.

Целью работы является изучение пространственной структуры распределения частиц в метеорных потоках Геминиды и Квадрантиды.

В работе [1] обоснован статистический критерий, который является наиболее мощным для различения распределения Пуассона, Пойа и биномиального распределения.

$$\gamma = \frac{\sum_{i=1}^p n_i - k_1 - \frac{k_1(k_1-1)}{p}}{\sigma},$$

$$\text{где } k_1 = \sum_{i=1}^p n_i \sigma^2 = \frac{2(p-1)}{p} k_1 (k_1 - 1),$$

где  $n_i$  – число регистраций, полученных за время  $\Delta T$ ,  $p$  – число интервалов наблюдений длиной  $\Delta T$ ,  $\gamma$  – асимптотически нормальная оценка ( $m = 0$ ,  $\sigma = 1$ ).

Большие по абсолютной величине значения ( $|\gamma| > 3$ ) указывают на то, что процесс регистраций не пуассоновский.

Нами предложен статистический метод выявления структурных особенностей распределения частиц, зарегистрированных радиолокационным методом. Этот метод основан на расчете параметра  $\gamma$  для различных интервалов наблюдения  $\Delta T$ , таким образом, вычисляя параметр  $\gamma$  для различных интервалов наблюдения  $\Delta T$ , мы получаем статистическую  $\gamma(\Delta T)$ -функцию. С помощью метода статистического моделирования было показано, что максимальное значение  $\gamma(\Delta T)$ -функции в точке  $\Delta T_0$  можно связать с группированием (сгущением частиц) длиной  $\Delta T_0 \cdot V$ , где  $V$  – наблюдаемая скорость частиц метеорного потока.

Все экспериментальные данные были разбиты на десятиминутные интервалы. Для каждого десятиминутного интервала был проведен расчет  $\gamma(\Delta T)$ -функции. Анализ радиолокационных наблюдений показал, что распределение частиц явно не подчиняется пуассоновскому закону. Для метеорного потока Геминиды ярко выраженные группирования с  $\gamma > 3$  наблюдались для 28 % десятиминутных интервалов, для метеорного потока Квадрантиды таких интервалов было 35 %. Интервалов, где наличие группирований с  $\gamma > 2$  выражено не так ярко, соответственно 55 % и 60 %.

### Список литературы

1. Володин И.Н. О различии распределения Пуассона и Пойа по большому количеству малых выборок / И.Н. Володин // Теория вероятностей и ее применение. – М.: Издательство Академии наук СССР, 1965. – Т. 10. – Вып. 3. – С. 488–499.

## АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВВЕДЕНИЯ ЗАЩИТНЫХ ИНТЕРВАЛОВ ПРИ КВАНТОВАНИИ ФАЗОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Амир Ильдарович Сулимов

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: amir.sulimov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** обработка сигналов, дискретизация и квантование физических измерений, фаза, случайная двоичная последовательность, вероятность битовой ошибки.

Случайные двоичные последовательности находят широкое применение, в том числе в вопросах защиты информации. Перспективным способом их согласованной генерации в двух пунктах радиосвязи (А и В) является многолучевая генерация случайных последовательностей [1]. Одной из главных проблем данного способа является возникновение битовых ошибок, которые существенно снижают эффективность системы. Для снижения количества битовых ошибок в работе [2] предложено ввести защитные интервалы между соседними уровнями квантования фазовых измерений.

В данном исследовании выполняется оценка целесообразности введения защитных интервалов квантования измерений фазы радиосигнала. Прямым численным интегрированием определены оптимальные параметры защитных интервалов квантования измерений и обеспечиваемое ими повышение эффективности многолучевой генерации случайных последовательностей. Показано, что, в зависимости от плотности вероятности фазовых измерений, введение защитных интервалов может обеспечить более чем 20-кратный прирост объема генерируемой случайной последовательности.

### Список литературы

1. Zhang J. Key Generation from Wireless Channels: A Review / J. Zhang et al. // IEEE Access. – 2016. – Vol. 4. – P. 614–626.
2. Hamida S.T.-B. An adaptive quantization algorithm for secret key generation using radio channel measurements / S.T.-B. Hamida et al. // Proceedings of 3<sup>rd</sup> International Conference “New Technologies, Mobility and Security (NTMS)”. – Cairo, 2009. – P. 1–5.

**РЕАЛИЗАЦИЯ МНОГОЧАСТОТНОГО МЕТОДА  
ПРОСТРАНСТВЕННО-РАЗНЕСЕННОЙ ГЕНЕРАЦИИ  
СОГЛАСОВАННЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ  
НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ  
ПРОГРАММНО-КОНФИГУРИРУЕМОГО РАДИО**

**Айдар Ахатович Галиев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: AjdarAGaliev@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** многолучевое распространение, фаза, ключевая последовательность, помехоустойчивость.

В современном мире защита информационного канала между пользователями является актуальной проблемой. Случайные замирания радиоканала в системах подвижной связи могут быть использованы для формирования идентичных ключевых последовательностей (КП) у пользователей. В КФУ была разработана аппаратура для динамической генерации и распределения КП, использующая когерентные измерения фазы сигнала, передаваемого во встречных направлениях через многолучевой радиоканал.

Жесткая архитектура прежней экспериментальной установки не допускала дальнейшей модернизации аппаратуры для повышения скорости генерации КП. В рамках данной работы была разработана новая экспериментальная аппаратура, формирующая в двух точках связи идентичные экземпляры КП из измерений фазы многолучевого радиосигнала, с применением современной технологии программно-конфигурируемых радиосистем (ПКР). Применение данной технологии позволяет проводить гибкую настройку радиочастотных параметров и внедрять методы, направленные на улучшение характеристик системы.

В работе была экспериментально исследована частотная зависимость скорости генерации КП, что позволило определить частоту зондирующих сигналов, на которой достигается максимальная скорость генерации ключей. Предложена методика и экспериментально исследована помехоустойчивость системы к воздействию имитационных и маскирующих радиопомех.

Предложена методика и экспериментально исследована восприимчивость системы к внешней модуляции фазовых измерений абонентских пунктов путем воздействия синхронной и асинхронной имитационной помехи, что позволяет оценить безопасность системы с точки зрения криптографии.

## ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ И МОНИТОРИНГА ЛЭП СТАНДАРТА 6–10 КВ

**Дмитрий Валерьевич Сарычев, Аркадий Васильевич Карпов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: sarychev1607@gmail.com*

**Ключевые слова:** диагностика, мониторинг, линия электропередачи.

В работе представлена двухэтапная система диагностики и мониторинга линий электропередач (ЛЭП) с разветвленной структурой. Предлагаемая система мониторинга основана на использовании локационного метода определения места повреждения (ОМП), который показал себя достаточно хорошо на неразветвленных ЛЭП. ЛЭП 6–10 кВ имеют, как правило, сложную древовидную структуру, что при возросшем числе переотражений приводит к уменьшению отношения сигнал/шум на входе приемника и вследствие этого снижает точность ОМП. При наличии ответвлений помимо уменьшения отношения сигнал/шум, вызванного переотражениями от неоднородностей, возникает проблема определения той ветви ЛЭП, где именно произошло повреждение.

Целью работы является методами имитационного компьютерного моделирования обосновать возможность применения локационного метода на линиях с разветвленной структурой в зависимости от вида возможного повреждения ЛЭП.

Основным элементом системы диагностики и мониторинга является интеллектуальный электромодем – устройство, которое сочетает в себе функции локатора и системы мониторинга, осуществляет систему сбора и обработки информации о поврежденном участке ЛЭП и управляет всей информационной системой ЛЭП. По возросшей величине коэффициента битовых ошибок снимается неоднозначность определения поврежденного участка ЛЭП, полученная локационным методом.

Было проведено моделирование системы диагностики ЛЭП с количеством ответвлений от 0 (что соответствует магистральной линии без ответвлений) до 4. В данном исследовании упор сделан на такие повреждения, как межфазные замыкания фазных проводников и замыкание фазных проводников на землю.

Рассмотренные случаи демонстрируют, что при замыканиях проводников коэффициент битовых ошибок увеличивается по сравнению с результатами, полученными для неразветвленной ЛЭП. При одном ответвлении практически для всех повреждений подобного вида изменения уровня битовой ошибки были значимыми. При увеличении числа ответвлений трехфазные замыкания диагностируются достаточно успешно, а вот уверенная регистрация однофазных замыканий пока представляется сомнительной.

## ОЦЕНКА ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАНАЛА СВЯЗИ В МІМО-РАДИОСИСТЕМЕ МЕТОДОМ СВЕРХШИРОКОПОЛОСНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

**Реваз Фархатович Халиуллин, Амир Ильдарович Сулимов**  
Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: sven456634@gmail.com

**Ключевые слова:** МІМО, импульсная характеристика канала, многолучевое распространение радиоволн, сверхширокополосные сигналы.

Эффект многолучевого распространения сигнала оказывает сильное влияние на качество связи в МІМО-радиосистемах. В настоящее время технология МІМО находит широкое применение при анализе качества каналов 5G, а также при создании физических генераторов случайных последовательностей [1].

Для учета многолучевого эффекта выполнено моделирование оценки матрицы импульсных характеристик МІМО-радиосистемы размерности 4x4 методом максимального правдоподобия [2] по выборке измерений отклика канала на сверхширокополосный радиосигнал с модуляцией QAM-16. На рисунках 1 и 2 показан пример оценки ИХ для опорного канала TX1-RX1 при SNR = 12дБ.

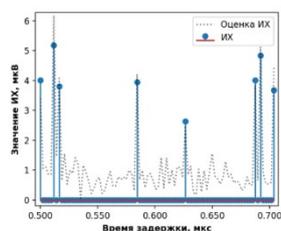


Рис. 1. Результаты оценки ИХ многолучевого канала

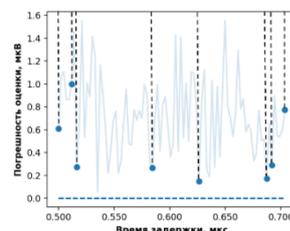


Рис. 2. Погрешность оценки ИХ многолучевого канала

В дальнейшем планируется экспериментальная верификация рассмотренного метода с использованием технологии программно-определяемого радио (SDR).

### Список литературы

1. *Ismyail Siyad C.* Chaotic deep neural network based physical layer key generation for massive MIMO / С. Ismyail Siyad, S. Tamilselvan. – New Delhi: Bharati Vidyapeeth's Institute of Computers Applications and Management (BVICAM), 2021. – P. 12.
2. *Ермолаев В.Т.* Адаптивная пространственная обработка сигналов в системах беспроводной связи: учебно-методическое пособие / В.Т. Ермолаев, А.Г. Флакман. – Н. Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 2006. – 99 с.

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЗВУКОВЫХ СООБЩЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ОБЛАЧНОГО РЕШЕНИЯ TELEGRAM

Сергей Александрович Калабанов<sup>1</sup>, Родион Валерьевич Сысолятин<sup>1</sup>,  
Рашид Аминович Ишмуратов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: kazansergei@mail.ru

<sup>2</sup>Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет  
Russia, Kazan, Kazan State Power Engineering University  
E-mail: rash-i@mail.ru

**Ключевые слова:** микроконтроллер, программное обеспечение, облачные технологии, языки программирования.

В современном цифровом мире все шире применяются распределенные информационные системы, которые используются в различных целях, в том числе для сбора данных от удаленных объектов и управления ими, а также для непосредственной связи этих объектов с человеком. Одной из форм связи является передача голосовых сообщений в режиме реального времени. В качестве устройства приема информации пользователем можно использовать смартфоны, работающие на платформах iOS и Android, а для организации передачи такой информации – современные облачные технологии, в роли которых может выступать популярный мессенджер Telegram. Нами был разработан электронный модуль для установки на удаленном объекте, который включает микроконтроллер ESP32 на платформе Arduino, микрофон и модуль SD-памяти [1, 2, 3]. Также было разработано программное обеспечение для микроконтроллера, написанное на языке C. Созданное устройство способно передавать аудиосообщения пользователю как на его компьютер, так и смартфон.

### Список литературы

1. Программирование устройств на основе модуля ESP32 // Информационный портал сообщества IT-специалистов. – URL: [https://habr.com/ru/company/epam\\_systems/blog/522730](https://habr.com/ru/company/epam_systems/blog/522730).
2. Описание отладочной платы на базе микроконтроллера ESP32. – URL: <https://docs.espressif.com/projects/esp-idf/en/stable/esp32/hw-reference/esp32/get-started-devkitc.html>.
3. Evans B. Beginning Arduino Programming / B. Evans. – N.Y.: Apress, 2011. – 252 p. – URL: [https://learn.skillman.eu/pluginfile.php/777/mod\\_resource/content/0/1.%20Arduino.pdf](https://learn.skillman.eu/pluginfile.php/777/mod_resource/content/0/1.%20Arduino.pdf).

## РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РАСЧЕТА И ПОСТРОЕНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ОРБИТ МЕТЕОРОИДОВ

Сергей Александрович Калабанов<sup>1</sup>, Алексей Викторович Изюмченко<sup>1</sup>,  
Рашид Аминович Ишмуратов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: kazansergei@mail.ru

<sup>2</sup>Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет  
Russia, Kazan, Kazan State Power Engineering University  
E-mail: rash-i@mail.ru

**Ключевые слова:** метеор, радиант, программный комплекс, элементы орбит.

В Казанском федеральном университете продолжаются активные радарные наблюдения метеоров для изучения распределения метеорного вещества в окрестности орбиты Земли [1]. Эти наблюдения представляют интерес как в плане прогнозирования метеорной опасности для космической отрасли, так и в плане изучения эволюции комет в Солнечной системе. В последнем случае необходимо провести переход от полученных в результате радарных измерений радиантов зарегистрированных метеоров к элементам индивидуальных орбит метеороидов [2]. Для осуществления такого расчета и, соответственно, построения индивидуальных орбит метеороидов нами был разработан специальный программный комплекс. В данный момент разработанная программа выводит числовые значения характеристик орбит метеора и статичные двумерные изображения орбиты в трех разных проекциях. Также есть возможность вывода на экран компьютера окна с трехмерной моделью, которую можно рассматривать с разных сторон (а не только с трех фиксированных проекций). Произведен тестовый расчет для метеорных потоков Геминиды, Апрельские Лириды, дневные лямбда-Тауриды, дневные Ариетиды.

### Список литературы

1. Kalabanov S. Observations of meteor showers with the meteor radar of KFU / S. Kalabanov, D. Korotyshkin, R. Ishmuratov et al. // Contributions of the Astronomical Observatory Skalnaté Pleso. – 2021. – Vol. 51. – P. 207–220. – DOI: 10.31577/CAOSP.2021.51.3.207.
2. Jones J. Meteor radiant activity mapping using single-station radar observations / J. Jones, W. Jones // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2006. – No. 367. – P. 1050–1056. – DOI: 10.1111/j.1365-2966.2006.10025.x.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ МНОГОЛУЧЕВОГО РАДИОСИГНАЛА

Амир Ильдарович Сулимов, Владимир Владимирович Бочкарев,

Айдар Ахатович Галиев

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: amir.sulimov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** канал связи, многолучевой эффект, замирания канала, автокорреляционная функция, интервал когерентности.

Распространение радиосигнала в современных системах беспроводной радиосвязи носит многолучевой характер. Многолучевой эффект существенно влияет на качество канала связи и может приводить к глубоким замираниям [1]. Важной характеристикой канала является интервал когерентности, определяющий промежуток времени, в течение которого возникновение глубоких замираний маловероятно и, следовательно, возможно вести передачу данных. Интервал когерентности определяется согласно заданной автокорреляционной функции радиосигнала. Одной из распространенных является модель автокорреляционной функции Джейкса [1]. К сожалению, эта модель некорректно описывает свойства канала при малом количестве рассеивателей либо при наличии доминирующих парциальных лучей в структуре регистрируемого радиосигнала.

В данном исследовании предлагается уточненная модель автокорреляционной функции многолучевого радиосигнала, учитывающая неравномерное распределение мощности между лучами, а также влияние траектории перемещения устройств связи и рассеивателей. Показано, что при типовых скоростях перемещения объектов от 1 м/с до 10 м/с интервал когерентности канала варьируется от 10 мс до 150 мс. В случае равномерного распределения мощности между лучами их количество не влияет на интервал когерентности, что подтверждается результатами экспериментальных исследований.

### Список литературы

1. Волков Л.Н. Системы цифровой радиосвязи: базовые методы и характеристики / Л.Н. Волков, М.С. Немировский, Ю.С. Шинаков. – М.: Эко-Трендз, 2005. – 392 с.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ЧАСТОТНО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ СВОЙСТВ МНОГОЛУЧЕВОГО  
РАДИОКАНАЛА ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ СОГЛАСОВАННЫХ СЛУЧАЙНЫХ  
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-ФАЗОВЫМ  
МЕТОДОМ**

**Айдар Ахатович Галиев, Амир Ильдарович Сулимов,  
Аркадий Васильевич Карпов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: AjdaraGaliev@kpfu.ru, Amir.Sulimov@kpfu.ru, Arkadi.Karpov@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** многолучевое распространение, дифференциальная фаза, синхронизация, ключевая последовательность, корреляционная функция.

Многолучевая генерация ключевых последовательностей (КП) использует случайность быстрых замираний в многолучевом радиоканале для создания в двух точках связи идентичных последовательностей. Фазовые методы генерации КП требуют высокоточной синхронизации сторон, что усложняет техническую реализацию. Перспективным методом генерации КП, не требующим высокоточной синхронизации, является использование измерений разностной фазы двух когерентных гармоник  $f_1$  и  $f_2$ :  $\Delta\phi = (\phi(f_1) - (f_1/f_2) \cdot \phi(f_2))$ .

Для генерации качественных КП требуется корректно выбрать разнесение  $\Delta f$  частот  $f_1$  и  $f_2$ , а также обеспечить равномерность распределения  $\Delta\phi$ . Целью данной работы является оценка минимально необходимого разнесения  $\Delta f$ , обеспечивающего приемлемые вероятностные свойства разностной фазы  $\Delta\phi$ .

Экспериментальная установка для встречного зондирования радиоканала многочастотным сигналом была реализована на основе технологии программно-конфигурируемых радиосистем. Применение данной технологии позволяет гибко варьировать разнесения  $\Delta f$ . В ходе экспериментов были получены измерения синфазных и квадратурных составляющих, амплитуды и фазы для каждой частотной компоненты сигнала. Рассчитаны частотные корреляционные функции для квадратур, амплитуды и фазы. Выполнены оценки полосы когерентности канала. Для случайных вариаций разностной фазы было построено распределение вероятностей, выполнены оценки степени его равномерности.

Полученные результаты могут представлять пользу для реализации многолучевой генерации КП-методом разностной фазы.

## ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКОГО КАБЕЛЯ

**Рамиль Рафаэльевич Зиядиев, Олег Николаевич Шерстюков,**

**Юлия Сергеевна Масленникова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ziyadiev96@mail.ru*

**Ключевые слова:** скважинная телеметрия, предсказание цифрового сигнала, QAM-модуляция, каротажный кабель.

Каротажный кабель вот уже много десятилетий широко применяется при геофизических исследованиях скважин, так как позволяет в режиме реального времени осуществлять контроль над скважинной измерительной аппаратурой и производить оперативный анализ регистрируемых данных. Однако развитие геофизических технологий требует существенного увеличения пропускной способности каротажного кабеля и его высокой помехоустойчивости при сохранении возможности использования в скважинных условиях. Целью данной работы является увеличение скорости передачи данных по одножильному геофизическому кабелю при помощи QAM-модуляции [2] (скорость передачи по данному кабелю составляет около 30 кбит/с).

В ходе выполнения работы проведен анализ электрических характеристик геофизического кабеля. По теореме Шеннона – Хартли, максимальная скорость, с которой информация может быть передана по 8-километровому одножильному геофизическому кабелю с полосой пропускания 3,5 кГц, равна 40 кбит/с. Имея заранее известную АЧХ кабеля, можно предсказать сигнал таким образом, что полоса пропускания системы будет увеличена [1]. В нашем случае удалось расширить полосу пропускания до 70 кГц, что, в свою очередь, позволило сдвинуть теоретическую максимальную скорость до 370 кбит/с.

Алгоритм успешно протестирован на геофизическом кабеле. Показано, что скорость передачи данных увеличена в 11 раз и составляет 350 кбит/с.

### Список литературы

1. Zhao H. A High-Speed Well Logging Telemetry System Based on Low-Power FPGA / H. Zhao, K. Song, K. Li et al. // IEEE Access. – 2021. – Vol. 9. – DOI: 10.1109/ACCESS.2021.3049799.
2. Сергиенко А.Б. Цифровая обработка сигналов / А.Б. Сергиенко. – СПб.: Питер, 2002. – 608 с.

**РАДИОТЕХНИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ СБОРА И ОБРАБОТКИ  
ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОГО НЕИНВАЗИВНОГО  
МОНИТОРИНГА СОСТОЯНИЯ ЗДОРОВЬЯ ЧЕЛОВЕКА:  
ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ТРЕМОРА ГОЛОВЫ**

**Адель Фердинандович Фахрутдинов, Дмитрий Евгеньевич Чикрин,  
Антон Александрович Егорчев**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: AdeFFahrutdinov@stud.kpfu.ru*

**Ключевые слова:** тремор головы, смартфонная техника, неинвазивная диагностика, неврология, спектральный анализ видео, болезнь Паркинсона.

Своевременная диагностика доступными средствами состояния здоровья работников на предприятиях является актуальной задачей, которая позволит уменьшить риски возникновения несчастных случаев на производстве. Нашей целью является разработка алгоритма определения тремора головы для применения в динамических системах мониторинга человека. В данной работе предлагается новый подход к определению одного из симптомов, могущего возникнуть у человека и требующего мониторинга, – тремора головы с использованием доступного средства диагностики – смартфона.

Авторы [1] рассмотрели способ использования колебания углов крена, тангажа, рыскания для определения тремора головы. На базе этого метода был предложен альтернативный подход к определению тремора головы – использование координат точек контура лица человека, определяемого с помощью [2] по видеоданным длительностью 15 с. Используя изменения координат, были определены амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) путем быстрого преобразования Фурье (БПФ), с помощью которых определялись доминирующие частоты. Нахождение доминирующих частот в диапазоне 3–18 Гц [3] фиксируется как тремор головы.

Был поставлен ряд экспериментов по определению качества работы реализованного решения, для этого было приглашено 20 испытуемых и было проведено не менее 10 испытаний на каждом. Испытуемые использовали смартфон с разработанным алгоритмом (Android 6+), который был размещен на жестко зафиксированной подставке, так как это является требованием успешной работы алгоритма.

В результате проведенных испытаний текущая реализованная версия алгоритма показала точность – вероятность возникновения ошибки 1 рода – 0,025 и

ошибки 2 рода – 0,08. Планируется доработка и модификация алгоритма для повышения точности детектирования.

#### Список литературы

1. Head tremor in cervical dystonia: Quantifying severity with computer vision // Sciencedirect. – URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022510X22000132> (дата обращения: 02.10.2022).

2. ML Kit // Google Developers. – URL: <https://developers.google.com/ml-kit> (дата обращения: 09.10.2022).

3. *Говорова Т.Г.* Тремор: классификация, клиническая характеристика / Т.Г. Говорова, А.А. Таппахов, Т.Е. Попова и др. // Consilium Medicum. – 2018. – № 9. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/tremor-klassifikatsiya-klinicheskaya-harakteristika> (дата обращения: 09.09.2022).

4. *Федорович А.А.* Смартфон в медицине – от справочника к диагностической системе. Обзор современного состояния вопроса / А.А. Федорович, А.Ю. Горшков, А.И. Королев и др. // Кардиоваскулярная терапия и профилактика. – 2022. – № 9. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/smartfon-v-medicine-ot-spravochnika-k-diagnosticheskoy-sisteme-obzor-sovremennogo-sostoyaniya-voprosa> (дата обращения: 25.04.2022).

5. *Жвалевский О.В.* Методы и модели для автоматизированной диагностики болезни Паркинсона / О.В. Жвалевский // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2018. – № 2 (42). – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/metody-i-modeli-dlya-avtomatizirovannoy-diagnostiki-bolezni-parkinsona> (дата обращения: 04.09.2022).

6. *Зорина В.О.* Обзор систем дистанционной мобильной диагностики состояния человека / В.О. Зорина // Евразийский союз ученых. – 2018. – № 5-1 (50). – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/obzor-sistem-distantionnoy-mobilnoy-diagnostiki-sostoyaniya-cheloveka> (дата обращения: 25.04.2022).

## МИКРОКОНТРОЛЛЕРЫ MEGAWIN СЕРИИ MG32F02 НА БАЗЕ ЯДРА CORTEX-M0

**Евгений Юрьевич Рябченко**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: reug@mail.ru*

**Ключевые слова:** микроконтроллер, архитектура ARM, ядро Cortex-M0.

Микроконтроллеры (МК) на базе 32-разрядного ядра ARM являются самыми распространенными в сегменте устройств среднего уровня сложности. Самые популярные МК таких производителей, как STMicroelectronics, Microchip, NXP и др., с 2022 г. стали недоступны для российского рынка из-за санкций. С 2019 г. в Россию официально поставляются МК на базе ядра Cortex-M0 тайваньской компании Megawin Technology Co., Ltd. (основана в 1999 г.).

Серия MG32F02 включает линейку МК общего назначения MG32F02A и линейку МК с USB-интерфейсом MG32F02U. Размер flash-памяти в зависимости от типа МК варьируется в пределах от 32 до 128 кбайт, размер ОЗУ – от 4 до 16 кбайт. Минимальное число выводов составляет 20 (корпус TSSOP20), максимальное – 80 (корпус LQFP80). Максимальная тактовая частота всех МК серии MG32F02 составляет 48 МГц, что является практически типовым значением для большинства реализаций ядер Cortex-M0 и Cortex-M0+. МК серии MG32F02 имеют расширенный индустриальный диапазон температур эксплуатации от –40 до +105 °С. Особенностью микросхем является также широкий диапазон напряжений питания от 1,8 до 5,5 В, что сегодня редко встречается у 32-разрядных контроллеров.

На данный момент серия включает следующие типы микроконтроллеров: MG32F02A032 – младшая модель с минимальными возможностями и числом выводов, MG32F02A064 и MG32F02A128 – МК с максимальными функциональными возможностями, MG32F02U064 и MG32F02U128 – аналогичные линейке MG32F02Axxx микроконтроллеры с интерфейсом USB, имеющие дополнительное ОЗУ объемом 512 байт для буферов USB [1].

### Список литературы

1. Микроконтроллеры Megawin серии MG32F02 на базе ядра Cortex-M0: цикл статей // Портал “Habr.com”. – 2022. – URL: <https://habr.com/ru/post/698110>.

**ПРОГРАММНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС  
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ  
ПЛАСТОВ С АНОМАЛЬНЫМ ЗАТУХАНИЕМ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ ПАССИВНОЙ НИЗКОЧАСТОТНОЙ  
СЕЙСМОРАЗВЕДКИ И ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ**

**Булат Фаридович Зарипов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: bulat-m82@yandex.ru*

**Ключевые слова:** цифровая обработка сигналов, фильтрация поверхностных волн, пассивная сейсморазведка.

Одной из задач, решаемых с помощью пассивных микросейсмических наблюдений, является задача обнаружения горизонтально простирающихся пластов с аномальными отражающими свойствами. К таким пластам относятся, например, нефтегазовые залежи. При решении этой задачи существенной является проблема фильтрации рассеянной компоненты поверхностных волн Рэлея, которую можно решить, используя взаимнокорреляционные функции (ВКФ) между всевозможными парами трехкомпонентных приемников. Чтобы подавить нежелательные поверхностные волны в ВКФ, был использован подход [1], основанный на поляризационных свойствах сейсмических волн. В результате такой фильтрации в ВКФ преимущественно остаются лишь Р-волны. Задача обнаружения пластов решается в приближении распространения вертикально-направленных Р-волн. Чтобы из предварительно отфильтрованных от волн Рэлея ВКФ выделить полезную часть, была разработана методика, которая заключается в построении так называемых интерферограмм (наборов ВКФ, собранных по средним точкам пары датчиков вокруг точек сетки изучения). Интерферограмма из ВКФ строится в порядке возрастания расстояния между приемниками, по которым рассчитывается ВКФ. Выполняется пространственная и пространственно-частотная фильтрация. После применения предложенной методики к реальным полевым данным для каждой точки сетки изучения были выделены вертикально направленные продольные волны сжатия из рассеянного микросейсмического шума. Благодаря данному подходу существенно улучшилось качество фильтрации, что влияет на точность прогноза положения нефтегазовых пластов.

**Список литературы**

1. *Takagi R. Separating body and Rayleigh waves with cross terms of the cross-correlation tensor of ambient noise / R. Takagi, H. Nakahara, T. Kono et al. // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. – 2014. – No. 119. – P. 2005–2018.*

**СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ БЕЛКОВОГО ФАКТОРА YsxC  
ПАТОГЕННОСТИ ЗОЛОТИСТОГО СТАФИЛОКОККА  
МЕТОДОМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА**

**Артем Дмитриевич Биктимиров<sup>1</sup>, Даут Ринатович Исламов<sup>1</sup>,  
Шамиль Завдатович Валидов<sup>1</sup>, Марат Миратович Юсупов<sup>2</sup>,  
Константин Сергеевич Усачев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Франция, Илькириш-Граффенштадтен,  
*Институт генетики, молекулярной и клеточной биологии*  
*France, Illkirch-Grattenstaden,*  
*Institut de genetique et de biologie moleculaire et cellulaire*  
*E-mail: biktimirov.artiom@gmail.com*

**Ключевые слова:** трансляция, YsxC, белковый фактор, ГТФазы, *Staphylococcus aureus*, созревание рибосомы, факторы сборки, метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР), рентгеноструктурный анализ (РСА).

Золотистый стафилококк является грамположительной шаровидной бактерией, вызывающей широкий спектр инфекционных заболеваний. Вследствие бесконтрольного применения антибиотиков возникают новые штаммы с множественной устойчивостью. Одной из стратегий борьбы с патогенными микроорганизмами является блокирование работы их белоксинтезирующего аппарата.

Именно поэтому в качестве объекта исследования нами был выбран ГТФ-связывающий белок YsxC, выполняющий структурную и организационную функции на поздних этапах сборки большой рибосомальной субъединицы. Данная работа посвящена поиску условий выделения и очистки белка, а также анализу формы молекул в растворе методом малоуглового рентгеновского рассеяния белка YsxC из *Staphylococcus aureus*.

Получены ряд структурных параметров и электронная плотность поверхности белка, которые указывают на то, что белок в растворе является мономером, компактно свернут и не имеет неструктурированных участков на профиле поверхности молекулы. Также найдены условия кристаллизации данного белка. Методом рентгеноструктурного анализа определена пространственная группа кристалла: P32 2 1 и параметры элементарной ячейки:  $a = 55.942 \text{ \AA}$ ,  $b = 55.942 \text{ \AA}$ ,  $c = 107.112 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ . Полученные данные будут использованы для определения пространственной структуры.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-74-20034).*

**СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ФАКТОРА  
СОЗРЕВАНИЯ РИБОСОМЫ P (RimP)  
С 30S СУБЪЕДИНИЦЕЙ ИЗ STAPHYLOCOCCUS AUREUS**

**Наталья Сергеевна Гараева<sup>1</sup>, Айдар Галимзанович Бикмуллин<sup>1</sup>,  
Булат Фаязович Фатхуллин<sup>2</sup>, Марат Миратович Юсупов<sup>2</sup>,  
Шамиль Завдатович Валидов<sup>1</sup>, Константин Сергеевич Усачев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Франция, Илькириш-Граффенштадтен,  
*Institut de genetique, молекулярной и клеточной биологии*  
*France, Ilkirch-Graffenstaden*

*Institut de genetique et de biologie moleculaire et cellulaire*  
*E-mail: natalia\_pavlova5@mail.ru*

**Ключевые слова:** *Staphylococcus aureus*, RimP, рибосома, ядерный магнитный резонанс (ЯМР), электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), криоэлектронная микроскопия.

*Staphylococcus aureus* (*S. aureus*) является одним из основных патогенов человека, вызывающих многочисленные внутрибольничные инфекции мягких тканей, и относится к числу наиболее известных причин бактериальных инфекций. *S. aureus* способен быстро приобретать резистентность к антибиотикам. Эта способность обуславливает необходимость разработки новых противомикробных агентов, которые будут замедлять или останавливать синтез белка у патогена и выделение факторов патогенности, т. е. будут действовать против макромолекулярного комплекса, осуществляющего синтез белка в клетке, – рибосомы [1].

В сборке рибосомных субъединиц участвует ряд белковых факторов. Их специфические и переходные взаимодействия с зарождающимися пре-рРНК и рибосомными белками необходимы для сборки рибосомных частиц. Даже небольшие дефекты в сборке рибосомы ведут к ошибкам в трансляции и вызывают фенотипы с тяжелыми нарушениями вплоть до гибели клеток. К факторам данного ряда относят фактор созревания рибосомы P (RimP, или Ribosome maturation factor). RimP связывается с несозревшей 30S субъединицей рибосомы, стабилизируя конформацию рРНК, тем самым обеспечивая правильное созревание рибосом [2, 3].

В рамках данной работы нами были подобраны и оптимизированы условия экспрессии белка RimP из *S. aureus* и его очистки методами аффинной и эксклюзионной хроматографии, установлена трехмерная структура белка RimP

в растворе методами спектроскопии ЯМР высокого разрешения, а также определено положение белка RimP относительно его партнера – рибосомного белка s12 путем введения парамагнитных меток MTSL к тиольным группам цистеинов и измерения расстояния между ними методами спектроскопии ЭПР. На основе криоэлектронной микроскопии получена структура комплекса 30S субъединицы рибосомы *S. aureus* с белком RimP с разрешением 4,6 Å.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-34-70021).*

#### Список литературы

1. *Khusainov I.* Structure of the 70S ribosome from human pathogen *Staphylococcus aureus* / I. Khusainov, Q. Vicens, A. Bochler et al. // *Nucleic Acids Research*. – 2016. – No. 44. – P. 10491–10504.
2. *Katoch P.* Ribosomal maturation factor (RimP) is essential for survival of nontuberculous mycobacteria *Mycobacterium fortuitum* under in vitro acidic stress conditions / P. Katoch, R.M. Yennamalli, G.S. Bisht et al. // *Biotech*. – 2019. – No. 9 (4). – P. 127.
3. *Maksimova E.* Protein Assistants of Small Ribosomal Subunit Biogenesis in Bacteria / E. Maksimova, O. Kravchenko, A. Korepanov et al. // *Microorganisms*. – 2022. – No. 10. – P. 747.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПЕРИНЕЙРОНАЛЬНЫХ СЕТЕЙ

Никита Сергеевич Липачев<sup>1</sup>, Анастасия Сергеевна Двоеглазова<sup>1</sup>,  
Амина Айратовна Садреева<sup>2</sup>, Альберт Варганович Аганов<sup>1</sup>,  
Михаил Николаевич Павельев<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Москва, Первый Московский государственный медицинский  
университет имени И.М. Сеченова

*Russia, Moscow, First Moscow State Medical University named after I.M. Sechenov*

<sup>3</sup> Финляндия, Хельсинки, Университет Хельсинки  
*Finland, Helsinki, University of Helsinki*

*E-mail: nikita.lipachev@gmail.com*

**Ключевые слова:** перинейрональная сеть, внеклеточный матрикс, нейрон, центральная нервная система (ЦНС).

Перинейрональная сеть (PNN) – это высокоструктурированный тип внеклеточного матрикса ЦНС, играющий важную роль в ее физиологии [1]. Ранее нами был предложен количественный метод изучения микроструктуры ячеек PNN, основанный на их ручном обведении [2]. В дальнейшем был создан метод, основанный на полуавтоматическом обведении ячеек [3].

В данной работе мы провели сравнительный анализ двух методов. Были использованы данные конфокальной микроскопии экспериментальной модели шизофрении крыс под воздействием кетамина [3]. В среднем полуавтоматическое обведение дает несколько большие значения площади и периметра ячеек с высокой корреляцией между их значениями. Для проверки толщины ячеек использовался тот же метод, что и в работе [4]. Средние величины толщины ячеек хорошо согласуются между собой и показывают высокую корреляцию между сравниваемыми методами обведения. Наши результаты демонстрируют надежность и воспроизводимость методов, использованных в публикациях [2, 3, 4]. Они также могут быть использованы при разработке более совершенных методов анализа ячеек PNN.

### Список литературы

1. Carulli D. An Extracellular Perspective on CNS Maturation: Perineuronal Nets and the Control of Plasticity // D. Carulli, J. Verhaagen // International Journal of Molecular Sciences. – 2021. – Vol. 22. – No. 5. – P. 2434.

2. *Arnst N.* Spatial patterns and cell surface clusters in perineuronal nets / N. Arnst et al. // *Brain Research.* – 2016 – Vol. 1648. – Pt. A. – P. 214–223.
3. *Kaushik R.* Fine structure analysis of perineuronal nets in the ketamine model of schizophrenia / R. Kaushik et al. // *European Journal of Neuroscience.* – 2021. – Vol. 53. – No. 12. – P. 3988–4004.
4. *Lipachev N.* Postnatal development of the microstructure of cortical GABAergic synapses and perineuronal nets requires sensory input / N. Lipachev et al. // *Journal of Neuroscience Research.* – 2022. – Vol. 182. – P. 32–40.

## ОПЫТ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРОЯВЛЕНИЙ НАРУШЕНИЯ ГОМЕОСТАЗА НЕЙРОНАЛЬНОЙ ТКАНИ

Булат Рустемович Мингазов<sup>1</sup>, Андрей Викторович Захаров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University

<sup>2</sup> Россия, Казань, Казанский государственный медицинский университет  
Russia, Kazan, Kazan State Medical University  
E-mail: AnVZaharov@kpfu.ru

**Ключевые слова:** кора мозга, электрическая активность, распространяющаяся деполяризация, терминальные явления, сверхмедленные отрицательные потенциалы.

В данной работе описаны методические приемы, примененные для измерения электрических потенциалов коры мозга крысы в условиях остановки дыхания и кровообращения, и некоторые полученные результаты. Условия и максимальное время выживания нейронов после остановки притока питательных веществ и кислорода являются не полностью изученными [1], что вынуждает проводить измерения в течение многих минут и часов после остановки сердца и дыхания животного. Для слежения за активностью коры больших полушарий преимущественно используются электроды из благородных металлов (Au, Pt, Ir). Такие электроды не токсичны и более удобны для размещения под оболочками мозга за счет их механических свойств [2]. Однако известно, что Pt/Ir-электроды в нейробиологических исследованиях проявляют чувствительность к кислороду и уровню кислотности [2]. В совокупности со сложной динамикой выживаемости нейронов и выравнивания трансмембранных электрохимических потенциалов это усложняет интерпретацию наблюдаемых сигналов. Так, нами было обнаружено, что изменения электрического потенциала в коре мозга крысы происходят в течение 25 ч и более после остановки кровообращения и дыхания. Причем отсутствие равновесия наблюдается на электродах разных типов (Ag/AgCl, Pt, Ir). Интересным также является наличие разницы не только между удаленными точками (опорный электрод в ноздре, измерительный в коре мозга), но и между близкими электродами (опорный в мозжечке). Данное наблюдение говорит о сложной динамике выравнивания электрохимических потенциалов с участием фиксированных зарядов возбудимых клеток [3].

### Список литературы

1. Juzekaeva E. Reappraisal of anoxic spreading depolarization as a terminal event during oxygen-glucose deprivation in brain slices in vitro / E. Juzekaeva, A. Gainutdinov, M. Mukhtarov et al. // Scientific Reports. – 2020. – Vol. 10. – Is. 1. – P. 18970.
2. Major S. Oxygen-induced and pH-induced direct current artifacts on invasive platinum/iridium electrodes for electrocorticography / S. Major, N. Gajovic-Eichelmann, J. Woitzik et al. // Neurocritical Care. – 2021. – No. 35. – P. 146–159.
3. Elkin B.S. Fixed negative charge and the Donnan effect: a description of the driving forces associated with brain tissue swelling and oedema / B.S. Elkin, M.A. Shaik, B. Morrison // Philosophical Transactions of the Royal Society A. – 2010. – No. 368. – P. 585–603.

**СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АМИЛОИДОГЕННЫХ ПЕПТИДОВ  
СЕМЕНИ ЧЕЛОВЕКА МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ  
ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА**

**Дарья Андреевна Осетрина, Евгения Алексеевна Семенова,  
Мария Олеговна Абрамова, Айдар Рафаилович Юльметов,  
Айдар Галимзанович Бикмуллин, Эвелина Андреевна Ключкова,  
Владимир Васильевич Ключков, Дмитрий Сергеевич Блохин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: dblohin@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** амилоидные фибриллы, вирус иммунодефицита человека (ВИЧ), ядерный магнитный резонанс (ЯМР), пространственная структура пептидов.

Амилоидные фибриллы представляют собой упорядоченные агрегаты растворимых белков и пептидов, которые связаны с более чем 20 заболеваниями человека, включая болезни Альцгеймера, Паркинсона и Гентингтона, а также ВИЧ-инфекцию [1]. Эффективность их лечения во многом зависит от понимания физико-химических параметров амилоидных фибрилл. Известно, что амилоидные фибриллы спермы увеличивают вероятность заражения ВИЧ-инфекцией в  $10^5$ – $10^6$  раз за счет снижения электростатического отталкивания между вирионом ВИЧ и клеткой-мишенью. Амилоиды спермы образуются из пептидных фрагментов белков PAP (простатическая кислая фосфотаза), семеногелина 1 (SEM1) и семеногелина 2 (SEM2) [2]. Наша работа посвящена структурным исследованиям данных пептидов методом спектроскопии ЯМР. Нами были определены следующие структуры пептидов: PAP(85-120), SEM1(86-107), SEM1(68-107), SEM1(49-107), SEM1(45-107).

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-73-10034).*

**Список литературы**

1. *Münch J.* Effect of semen and seminal amyloid on vaginal transmission of simian immunodeficiency virus / J. Münch, U. Sauermann, M. Yolamanova et al. // *Retrovirology*. – 2013. – Vol. 10. – Is. 148. – P. 1–9.
2. *Roan N.R.* Peptides released by physiological cleavage of semen coagulum proteins form amyloids that enhance HIV infection / N.R. Roan, J.A. Müller, H. Liu et al. // *Cell Host & Microbe*. – 2011. – Vol. 10. – Is. 6. – P. 541–550.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА, ДОПИРОВАННОГО ИОНАМИ ГАДОЛИНИЯ, МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ЭПР

Маргарита Александровна Садовникова<sup>1</sup>, Фадис Фанилович Мурзаханов<sup>1</sup>,  
Георгий Владимирович Мамин<sup>1</sup>, Анна Александровна Форысенкова<sup>2</sup>,  
Инна Вилоровна Фадеева<sup>2</sup>, Марат Ревгерovich Гафуров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University

<sup>2</sup> Россия, Москва, Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова  
Russia, Moscow, A.A. Baikov Institute of Metallurgy and Material Science,  
Russian Academy of Sciences  
E-mail: margaritaasadov@gmail.com

**Ключевые слова:** трикальцийфосфат (ТКФ), электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), редкоземельные ионы, гадолиний.

На сегодняшний день актуальной задачей является синтез новых многофункциональных материалов с улучшенными физико-химическими и биологическими свойствами. Синтетический  $\beta$ -трикальцийфосфат ( $\beta$ -ТКФ,  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ) используется для разработки биокерамики, является остеокондуктивным, остеоиндуктивным, обладает высокой биосовместимостью с костной тканью человека [1]. Замещение катионов кальция в структуре ТКФ катионами других металлов способствует улучшению свойств ТКФ. Соединения  $\beta$ -ТКФ с ионами гадолиния ( $\text{Gd}^{3+}$ ) являются многообещающими биоматериалами для костной инженерии, а редкоземельные комплексы в составе ТКФ могут выступать в качестве контрастных агентов для магнитно-резонансной визуализации, что позволит контролировать степень регенерации костной ткани.

Образцы ТКФ:  $\text{Gd}^{3+}$  мы синтезировали методом осаждения из водных растворов солей. Спектры электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) регистрировались в стационарном и импульсном режимах с помощью спектрометра Bruker Elexsys E580/680 с частотой  $\nu_{\text{СВЧ}} = 9$  ГГц в широком интервале температур.

Полученные результаты позволили однозначно установить, что  $\text{Gd}^{3+}$  встраивается в кристаллическую решетку ТКФ и занимает две структурно-неэквивалентные позиции ионов  $\text{Ca}^{2+}$ .

*Работа выполнена в рамках госзадания на НИР для КФУ (проект FZSM-2022-0021).*

### Список литературы

1. Jeong J. Bioactive calcium phosphate materials and applications in bone regeneration / J. Jeong, J.H. Kim, J.H. Shim et al. // Biomaterials Research. – 2019. – Vol. 23. – No. 1. – P. 1–11.

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

**Айзира Флюсовна Тимерова, Владимир Васильевич Клочков,  
Лилия Евгеньевна Никитина**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: aizirya96@bk.ru*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс (ЯМР), модель мембраны.

Артериальный тромбоз является наиболее важным фактором, ведущим к артериальным сердечно-сосудистым заболеваниям. Одним из основных факторов, приводящих к образованию тромба, являются изменения в фосфолипидных мембранах тромбоцитов. Спектроскопия ЯМР является одним из наиболее мощных инструментов, позволяющих устанавливать пространственную структуру соединений, что важно при разработке медикаментов. Терпеноиды 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 [1].

Таким образом, на основе анализа данных DOSY и двумерной  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOESY спектроскопии ЯМР было изучено комплексообразование трех миртеноловых монотерпеноидов с мицеллой на основе ДФХ [2]. Также было установлено, что миртеноловый сульфид может быть наиболее перспективным объектом для дальнейших исследований на биологическую активность, так как он встраивается внутрь мицеллы на основе ДФХ, т. е. образует устойчивый комплекс с модельной мембраной.

**Список литературы**

1. *Kallik D.A.* The use of dodecylphosphocholine micelles in solution NMR / D.A. Kallik, M.R. Tessmer, C.R. Watts et al. // *Journal of Magnetic Resonance*. – 1995. – Vol. 109. – P. 60–65.
2. *Nikitina L.E.* Structural details on the interaction of biologically active sulfur-containing monoterpenoids with lipid membranes / L.E. Nikitina, A.F. Timerova, V.V. Klochkov et al. // *Journal of Molecular Liquids*. – 2020. – Vol. 301. – P. 13.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ С ЛИПИДНОЙ СИСТЕМОЙ МЕТОДАМИ ЯМР

Альбина Рашитовна Хакимзянова, Андрей Васильевич Филиппов,

Алия Владимировна Халиуллина

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Aliya.Khaliullina@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** ионная жидкость (ИЖ), липиды, ядерный магнитный резонанс (ЯМР).

В последнее время многие исследования показали, что ионные жидкости оказывают токсичное воздействие на ферменты, бактерии, микроорганизмы, водоросли, высшие растения, животных и рыб [1]. Так как клеточные мембраны играют важную роль в клеточной защите, а также в контроле и переносе питательных веществ, важным становится понимание механизма взаимодействия ИЖ с клеточными мембранами для объяснения и прогнозирования их поведения в биологических и фармацевтических системах. С помощью метода ЯМР был проведен ряд исследований особенностей фазового поведения и молекулярной подвижности системы, состоящей из лецитина, при концентрации 2 % по весу в смеси растворителей этиламмония нитрата (EAN) с D<sub>2</sub>O.

Диффузионные эксперименты на ядрах <sup>1</sup>H позволяют сделать предположение, что компонента диффузионного затухания со значением коэффициента самодиффузии (КСД), относящегося к липидам в EAN, может быть связана с движением диффундирующих мицелл, регистрируемых в <sup>31</sup>P-спектре в виде изотропного сигнала. КСД, относящийся к липидам в D<sub>2</sub>O, может быть связан с движением диффундирующих везикул, форма линии которых в <sup>31</sup>P ЯМР-спектре определяется аксиально-симметричным тензором экранирования, что характерно для липидной системы в ламеллярной жидкокристаллической фазе. По данным <sup>31</sup>P ЯМР-спектроскопии в смеси растворителей D<sub>2</sub>O – EAN для липидной системы наблюдается корреляция соотношения этих двух фаз с долями растворителей D<sub>2</sub>O и EAN.

### Список литературы

1. Bernot R.J. Acute and chronic toxicity of imidazolium-based ionic liquids on *Daphnia magna* / R.J. Bernot, M.A. Brueseke, M.A. Evans-White et al. // *Environmental Toxicology and Chemistry*. – 2005. – Vol. 24. – Is. 1. – P. 87–92.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА ДЛИТЕЛЬНОСТИ  
ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА УФ-ДИАПАЗОНА СПЕКТРА  
НА КЛЕТКИ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА**

**Яра Хамдан, Таисия Александровна Телегина,  
Наиль Илдарович Шамсутдинов, Михаил Александрович Марисов,  
Павел Валерьевич Зеленихин, Вадим Владимирович Семашко,  
Алексей Сергеевич Низамутдинов, Андрей Андреевич Буглак**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: yara.hamda.z@gmail.com*

**Ключевые слова:** ультрафиолет (УФ), витилиго, фибробласты, лазер.

Витилиго – заболевание депигментации, характеризующееся потерей эпидермальных меланоцитов [1], причем одним из наиболее эффективных методов его лечения является экспозиция узкополосным ультрафиолетом В [2]. В данной работе нами была исследована зависимость жизнеспособности клеток от времени облучения, длительности импульса и времени МТТ-теста. Нами было использовано лазерное излучение активной среды  $\text{Li}(\text{Lu}, \text{Y})\text{F}_4:\text{Ce}+\text{Yb}$  [3]. Показано, что выживаемость клеток фибробластов меньше при облучении УФ-светом с меньшей длительностью импульса. При этом жизнеспособность клеток через 24 ч после облучения увеличивается. Также обнаружено, что при увеличении длины волны в диапазоне от 300 нм до 325 нм жизнеспособность клеток HSF также увеличивается. Методом проточной цитометрии установлено, что в результате УФ-лазерного облучения фибробластов в 80 % случаев происходит повреждение цитоплазматической мембраны. В заключение мы можем сообщить, что разная длительность импульса УФ-лазерного облучения оказывает цитотоксическое действие на фибробласты кожи человека.

**Список литературы**

1. *Esmat S. Phototherapy and Combination Therapies for Vitiligo / S. Esmat et al. // Dermatologic Clinics. – 2017. – No. 35. – P. 171–192.*
2. *De Souza R.O. Photochemoprotective effect of a fraction of a partially purified extract of Byrsonima crassi-fovia leaves against UVB-induced oxidative stress in fibroblasts and hairless mice / R.O. De Souza et al. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. – 2018. – No. 178. – P. 53–60.*
3. *Farukshin I.I. Ultra-short UV lasing in multifunctional Ce:  $\text{LiY}_0.3\text{Lu}_0.7\text{F}_4$  active medium / I.I. Farukshin et al. // Optical Materials Express. – 2016. – Vol. 6. – No. 4. – P. 1131–1137.*

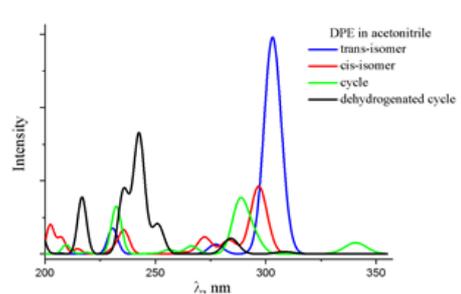
## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИИ 1,2-ДИ(4-ПИРИДИЛ)ЭТИЛЕНА

Амина Фирдусовна Шайдуллина, Аль-Халиди Гуфран Саади Ясин,  
Людмила Ивановна Савостина, Александр Николаевич Туранов  
Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: shaidullina.amina@yandex.ru

**Ключевые слова:** 1,2-ди(4-пиридил)этилен (DPE), фотоизомеризация, time-dependent density functional theory (TDDFT), ядерный магнитный резонанс (ЯМР).

Для молекул, обладающих двойной С=С-связью, характерен процесс цис-транс-фотоизомеризации с последующим образованием циклических продуктов. Фотоизомеризация молекулы 1,2-ди(4-пиридил)этилена (DPE) была изучена методами ЯМР и ультрафиолетовой спектроскопии под воздействием ультрафиолетового излучения на длине волны 365 нм.

Для более подробного изучения были проведены квантово-химические расчеты методом функционала плотности (DFT) в программном пакете ORCA [1]. Были получены энергетические и структурные характеристики оптимальных геометрий транс-, цис- и циклических структур DPE. С использованием время-разрешенного метода TDDFT для всех молекул были рассчитаны спектры поглощения на синглетной поверхности DPE с помощью функционала B3LYP и базиса 6-311G\*\* с учетом растворителя (ацетонитрила). На рисунке 1 представлены расчетные спектры и разность энергии  $\Delta E$  между основным состоянием и первым возбужденным состоянием.



	$\Delta E$ , aB
<i>cis</i>	93.34
<i>trans</i>	97.69
<i>cyclo</i>	48.98
<i>dehydrocyclo</i>	105.85

Рис. 1. Рассчитанные спектры цис-, транс-конформеров DPE, цикла и дегидрированного цикла DPE и разность энергии  $\Delta E$  между основным состоянием и первым возбужденным состоянием

### Список литературы

1. Neese F. The ORCA program system / F. Neese // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2012. – No. 2 (1). – P. 73–78.

**ГРАЖДАНСКО-ПАТРИОТИЧЕСКОЕ ВОСПИТАНИЕ  
УЧАЩИХСЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ  
СРЕДСТВАМИ УЧЕБНОГО ПРЕДМЕТА «ФИЗИКА»**

**Елена Юрьевна Фадеева, Гузель Ильдаровна Гарнаева,  
Эльмира Ильгамовна Низамова, Эльвера Дамировна Шигапова**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: guzka-1@yandex.ru*

**Ключевые слова:** патриотическое воспитание, патриотизм, личностные результаты обучения, обучение физике.

Первым пунктом в требованиях к результатам освоения основной образовательной программы в разделе «Личностные результаты освоения основной образовательной программы» ФГОС основного и среднего общего образования указано, что они должны отражать воспитание российской гражданской идентичности [1].

Существуют разнообразные приемы ознакомления учащихся с материалами гражданско-патриотического содержания в рамках школьного курса физики:

1. Сообщение учителем при изучении нового материала информации о научных и технических достижениях России, великих ученых и конструкторах.
2. Решение и составление задач, содержащих историко-краеведческий, военно-технический материал.
3. Проведение внеурочных мероприятий по физике гражданско-патриотической направленности.
4. Организация исследовательских проектов школьников по истории развития военного дела (космонавтики, науки), о современном оружии, о выдающихся физиках-конструкторах и т. п.

Школьный курс физики имеет возможность одновременно с формированием знаний о научной картине мира и умением оперировать данными знаниями в повседневной жизни осуществлять воспитание гражданственности, патриотизма и нравственности у учащихся.

**Список литературы**

1. ФГОС «Основное общее образование». – URL: <https://fgos.ru/fgos/fgos-ooo>.
2. Верещагина Н.И. О проблеме патриотического воспитания школьников в современной педагогике / Н.И. Верещагина // Новая наука: стратегии и векторы развития. – 2016. – № 5-2 (82). – С. 18–25.

## ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ШКОЛЬНИКОВ В УСЛОВИЯХ ИНДИВИДУАЛЬНО-ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОГО ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ

**Никита Вадимович Тележников, Гузель Ильдаровна Гарнаева,  
Елена Германовна Скобельцына**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: nikita.telezchnikoff@gmail.com*

**Ключевые слова:** исследовательская деятельность, процесс обучения, физическое образование, высшее образование.

Для удовлетворения имеющихся у общества потребностей перед системой высшего образования ставится задача по включению студентов в научно-исследовательскую деятельность. Однако, как отмечается в работе О.Ю. Бражник и Е.А. Батраченко, студенты испытывают трудности с вовлечением в научно-исследовательскую деятельность, особенно на первых двух курсах образовательного уровня бакалавриата: лишь 30 % студентов первого курса сопоставляют ее значимость с успешной профессиональной деятельностью [1].

Таким образом, возникает необходимость формирования и развития научно-исследовательских компетенций на уровне основного общего и среднего общего образования. Широкими возможностями для развития исследовательских умений учеников обладает школьный курс физики, так как спецификой данного курса является исследовательский характер его содержания.

Мы считаем, что процесс развития исследовательских умений школьников на уроках физики будет более эффективным, если:

- развитие этих умений выделено в качестве специальной задачи каждого урока;
- в образовательном процессе выявлены и соблюдаются педагогические условия и этапы развития исследовательских умений;
- определено учебное физическое содержание, изучение которого позволяет организовать исследовательскую деятельность школьников.

### Список литературы

1. Бражник О.Ю. Проблемы, сущность и формы организации научно-исследовательской деятельности студентов в системе высшего образования / О.Ю. Бражник, Е.А. Батраченко // Самарский научный вестник. – 2019. – Т. 8. – № 1 (26). – С. 230–234.

**РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ  
К ВИРТУАЛЬНОМУ ЛАБОРАТОРНОМУ ПРАКТИКУМУ  
ПО ВОЛНОВОЙ ОПТИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ  
ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ  
ПО УГЛУБЛЕННОМУ ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ**

**Леонид Анатольевич Нефедьев, Гузель Ильдаровна Гарнаева,  
Эльмира Ильгамовна Низамова, Эльвера Дамировна Шигапова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: guzka-1@yandex.ru*

**Ключевые слова:** лабораторный эксперимент, виртуальный эксперимент, моделирование физических явлений, обучение физике.

Внедрение цифровых технологий в систему образования позволяет ожидать следующих результатов:

- уменьшения числа неуспевающих и слабоуспевающих учащихся;
- увеличения числа обучающихся, проявляющих выдающиеся способности;
- повышения уровня учебной самостоятельности учащихся;
- повышения уровня мотивации учения и познавательного интереса к изучаемым предметам;
- повышения психологического комфорта обучающихся [1].

Авторы представляют собственный опыт по разработке комплекса моделированных лабораторных экспериментов по разделу «Волновая оптика». В состав комплекса помимо пакета компьютерных программ входят учебно-методические материалы к каждой лабораторной работе, содержащие: описание теории и закономерностей физического процесса, наблюдаемого в работе; описание алгоритма выполнения виртуального лабораторного эксперимента и обработки полученных данных; вопросы для самопроверки уровня понимания теоретических основ выполняемого эксперимента; задания для самостоятельной работы по формированию исследовательских и экспериментальных умений [2].

**Список литературы**

1. *Привалов А.Н.* Виртуальный лабораторный эксперимент как пример педагогической инновации в информационно-образовательной среде / А.Н. Привалов, Д.В. Шахаева // Ученые записки Института управления образованием Российской академии образования. – 2017. – № 1 (61). – С. 127–130.
2. *Нефедьев Л.А.* Цифровизация физического эксперимента при подготовке физиков педагогического направления / Л.А. Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова и др. // Казанский педагогический журнал. – 2021. – № 1. – С. 140–149.

## ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ

Елена Юрьевна Фадеева, Гузель Ильдаровна Гарнаева,  
Эльмира Ильгамовна Низамова, Эльвера Дамировна Шигапова

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: guzka-1@yandex.ru*

**Ключевые слова:** цифровые технологии, образовательная среда, обучение физике.

Цифровые технологии достаточно широко внедряются во все сферы общественной жизни. Они позволяют упростить работу в любой профессиональной деятельности, педагогика и образование не являются исключением. В последнее время эта тенденция прослеживается и на государственном уровне, так, в число последних распоряжений Правительства Российской Федерации входит Распоряжение об утверждении стратегического направления в области цифровой трансформации образования. Целью цифровизации является создание условий для работы электронной информационно-образовательной среды, включающей в себя электронные образовательные ресурсы и совокупность информационных технологий [2].

Поэтому перед учителями встает вопрос о том, как можно эффективно реализовать требования вышеназванного постановления. Наиболее актуальным это является для учителей физики, так как кроме теории и задач в курс физики входит большое количество практических работ, как демонстрационных, так и лабораторных. В настоящее время учителя активно используют в образовательной деятельности такие цифровые технологии, как: компьютерные программы и обучающие системы (учебники, лабораторные комплексы, дневники и т. д.), цифровые образовательные ресурсы, телекоммуникационные технологии, электронные библиотечные системы [1].

Школьный курс физики позволяет внедрять все эти технологии, кроме того, благодаря им обучение становится все более разносторонним и интересным.

### Список литературы

1. Озерский С.В. Информатизация образования – неотъемлемая часть формирования информационного общества / С.В. Озерский // Вестник Самарского юридического института. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/informatizatsiya-obrazovaniya-neotemlemaya-chast-formirovaniya-informatsionnogo-obschestva/viewer>.

2. Распоряжение Правительства Российской Федерации от 02.12.2021 № 3427-р «Об утверждении стратегического направления в области цифровой трансформации образования, относящейся к сфере деятельности Министерства просвещения Российской Федерации» // КонсультантПлюс. – URL: [http://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_402676](http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_402676).

**СОЗДАНИЕ КОМПЛЕКСА ВИРТУАЛЬНОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО УГЛУБЛЕННОМУ ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ**

**Леонид Анатольевич Нефедьев, Гузель Ильдаровна Гарнаева,  
Эльмира Ильгамовна Низамова, Эльвера Дамировна Шигапова**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: guzka-1@yandex.ru*

**Ключевые слова:** лабораторный эксперимент, виртуальный эксперимент, моделирование физических явлений, обучение физике.

Физические явления, рассматриваемые в разделе «Квантовая физика», являются сложными для понимания. Целесообразно изучение теоретического материала по этому разделу дополнить компьютерным моделированием физических процессов в виде лабораторных работ, выполнение которых в реальном режиме затруднительно, ведь компьютерное моделирование позволит лучше понять суть процессов, происходящих во время эксперимента [1].

Разработанный авторами виртуальный лабораторный практикум по квантовой физике включает в себя такие лабораторные работы, как: «Излучение абсолютно черного тела», «Цветовые характеристики излучения абсолютно черного тела», «Фотоэффект», «Опыт Резерфорда», «Модель атома Резерфорда – Бора». Каждая работа представляет собой учебно-методический комплекс, содержащий руководство по выполнению практической части работы, краткие материалы, относящиеся к теоретической части работы, интерактивную компьютерную модель физического эксперимента. Виртуальные модели экспериментов позволяют наглядно представить протекающие физические процессы и дают возможность, изменяя определенные параметры, влиять на ход эксперимента [2].

**Список литературы**

1. *Бобылев Ю.В.* О применении виртуального демонстрационного и лабораторного эксперимента по физике в высшей школе / Ю.В. Бобылев, А.И. Грибков, Р.В. Романов // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Гуманитарные науки. – 2016. – № \ 21. – С. 163–167.
2. *Nefediev L.A.* The use of digital laboratory work in quantum physics in the process of learning physics teachers / L.A. Nefediev, G.I. Garnaeva, E.I. Nizamova et al. // Proceedings of VI International Forum on Teacher Education (IFTE). – Kazan: Kazan University Press, 2020. – P. 1767–1777.

## АНАЛИЗ УСПЕВАЕМОСТИ И КАЧЕСТВА ОБУЧЕНИЯ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ В СЛУЧАЕ АДАПТАЦИИ ИХ К ПРОЦЕССУ ОБУЧЕНИЯ В КФУ

**Рустам Маратович Мустафин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: tatarstan.republic@yandex.ru*

**Ключевые слова:** иностранные студенты, успеваемость, качество обучения, процесс адаптации.

Одной из тенденций развития современного образования является его интернационализация, которая выражается в увеличении количества студентов, получающих образование за пределами родной страны.

Интеграция России в мировую систему образования усиливает ее роль в подготовке специалистов из зарубежных стран. Стратегической задачей государственной образовательной политики РФ остается качество знаний и умений иностранных студентов, которое должно соответствовать самым высоким международным стандартам.

Особенно важным моментом здесь является подготовка студентов в контексте технических дисциплин и дисциплин физико-математического направления, которые находятся в стадии постоянного развития, аккумулируя результаты научно-технического прогресса. Именно поэтому актуальной является проблема организации учебной деятельности в процессе преподавания физики студентам-иностранцам в российских вузах.

Во время обучения студентов-иностранцев физике на неродном языке обязательно необходимо учитывать уровень знания языка обучения, использовать адаптированное для студентов-иностранцев методическое обеспечение, поскольку анализ учебной литературы по физике, российской и англоязычной [1, 2], свидетельствует о следующих расхождениях: различные названия законов и обозначения физических величин. Например, в зарубежных учебниках площадь обозначается буквой  $A$  (area) вместо  $S$ , частота –  $f$  (frequency) вместо  $\nu$ , работа –  $W$  (work) вместо  $A$  и др., что способствует ассоциативному запоминанию и т. д.

### Список литературы

1. Смирнова З.М. Англо-русское билингвальное пособие по физике / З.М. Смирнова. – М.: Карпов Е.В., 2010.
2. Serway R.A. Principles of physics / R.A. Serway, J.W. Jewett, Jr. – Belmont: Brooks/Cole – Thomson Learning, 2005. – 1206 p.

## РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОГО ИНТЕРЕСА К ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ ВО ВНЕУРОЧНОЕ ВРЕМЯ У СЛАБОУСПЕВАЮЩИХ УЧАЩИХСЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ

**Альбина Феннуровна Зарипова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: sabina.gainulova@yandex.ru*

**Ключевые слова:** изучение физики, познавательный интерес, слабоуспевающие учащиеся, внеурочная деятельность.

На сегодняшний день мониторинг системы образования отмечает резкое снижение общего и психического здоровья школьников; усиление отрицательной мотивации учащихся в учебной деятельности; наличие в общеобразовательных учреждениях обучающихся, испытывающих затруднения в освоении образовательных программ; увеличение количества детей, имеющих отклонения в поведении и относящихся к группе риска школьной дезадаптации.

Решение данных проблем невозможно без выявления их причин, без широкой образовательной практики, направленной на предупреждение и преодоление школьной неуспеваемости обучающихся, возникающих у них трудностей в обучении.

Учащиеся образовательных учреждений отличаются не только степенью сформированности интеллектуальной сферы и основной ее компоненты – мышления, но и сформированностью мотивационной сферы, т. е. наличием и развитостью устойчивой мотивации учения, а также степенью зрелости эмоциональной, волевой и других сфер личности [1].

Арсенал приемов формирования устойчивого познавательного интереса разнообразен. Большое влияние на формирование интересов школьников оказывает форма организации учебной деятельности, четкая постановка познавательных задач урока, доказательное объяснение материала, использование в учебном процессе разнообразных самостоятельных работ, творческих заданий, создание проблемных ситуаций, а также занимательность и наглядность.

### Список литературы

1. Макарычева И.А. Мотивационная сфера школьника. общее понятие мотива и мотивации в учебной деятельности / И.А. Макарычева // Вестник науки и образования. – 2018. – Т. 1. – № 4 (40). – С. 82–86.

## СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОФУРОКСАНОВ

**Ирина Васильевна Галкина, Юлия Валерьевна Бахтиярова,  
Семен Романович Романов, Дмитрий Ильгизарович Бахтияров**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: vig54@mail.ru*

**Ключевые слова:** бензофуороксан, трифенилфосфин, соли фосфония, соли изотиурония, ониевые соединения.

Спрос на новые противомикробные и противопаразитарные препараты высок, потому что все больше и больше паразитов вырабатывают устойчивость к средствам, доступным в настоящее время на мировом рынке.

Направленный синтез биологически активных соединений на основе биомиметического подхода (имитация природы) является одним из основных подходов для получения новых лекарственных субстанций для медицины и ветеринарии. Поэтому были разработаны новые методы синтеза эффективных и малотоксичных биологически активных соединений на основе азотистых гетероциклов:

– предложен новый способ синтеза уникального азотистого гетероцикла 5,7-дихлор-4,6-динитробензофуороксана, впервые выращены кристаллы и доказана структура этого соединения методом рентгеноструктурного анализа. Методом ЭПР доказана способность этих структур генерировать NO;

– впервые осуществлен синтез солей *S-n*-алкилизотиуроний бромидов и хлоридов с длинными алкильными радикалами, аналогов фрагментов природных биомембран и комплексов этих солей с бензофуороксанами. Соли изотиурония изучены современными методами микроскопии;

– синтезированные соединения прошли испытания на наличие биологической активности в отношении патогенной и условно-патогенной микрофлоры человека и животных;

– на основе полученных фармацевтических субстанций созданы противовоспалительные и противопаразитарные препараты для домашних и сельскохозяйственных животных и птиц. Получено десять патентов РФ.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ, РАСЧЕТНЫЕ И КОМБИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Руслан Наильевич Нагриманов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: rnagrimanov@gmail.com*

**Ключевые слова:** фазовые переходы, энтальпия образования, давление пара, калориметрия растворения, энтальпия сольватации.

Термохимические свойства фазовых переходов имеют важное фундаментальное и прикладное значение. Эти параметры необходимы для расчета тепловых эффектов химических реакций, энергии внутри- и межмолекулярных взаимодействий, энергии образования в газовой фазе, а также для развития квантово-химических расчетов. Большинство экспериментальных методов определения термодинамических параметров фазовых переходов применимо только для хорошо летучих соединений ( $>1$ кПа) [1].

В настоящей работе разрабатываются методы определения энтальпии фазовых переходов органических соединений, основанные на методе калориметрии растворения. В основе этого метода лежит экспериментальное определение энтальпии растворения и расчет энтальпии сольватации. Если растворяемое вещество и растворитель образуют растворы, близкие по свойствам к идеальным, то рассчитанная энтальпия сольватации будет равна энтальпии испарения с обратным знаком.

Полученные значения термохимических свойств фазовых переходов проверялись с использованием метода сверхбыстрой калориметрии и транспирации. Использование независимых методов определения термохимических величин фазовых переходов позволило существенно повысить достоверность результатов, полученных методом калориметрии растворения.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00253.*

### Список литературы

1. *Verevkin S.P. Development of Direct and Indirect Methods for the Determination of Vaporization Enthalpies of Extremely Low-Volatile Compounds / S.P. Verevkin, D.H. Zaitsau, C. Schick, F. Heym // Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry / ed. by S. Vyazovkin, N. Koga, C. Schick. – Elsevier Science B.V., 2018. – P. 1–46.*

**НЕИНВАЗИВНОЕ ПРОТОЧНО-ИНЖЕКЦИОННОЕ  
АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ  
НЕКОТОРЫХ МАРКЕРОВ ЗАБОЛЕВАНИЙ  
В ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ**

**Ильвина Азатовна Гафиатова, Ирина Александровна Челнокова,  
Лариса Геннадиевна Шайдарова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ilvina1603@mail.ru*

**Ключевые слова:** модифицированные планарные электроды, частицы металлов, оксиды металлов, бинарные системы, биомаркеры, проточно-инжекционный анализ, последовательный инжекционный анализ, амперометрический детектор.

В клинической диагностике для выявления многих заболеваний на ранней стадии развития требуются новые экспрессные методы анализа. Для количественного определения органических соединений используют различные физико-химические методы, в том числе вольтамперометрию на модифицированных электродах (МЭ) с высокой чувствительностью и селективностью определения органических соединений. Для автоматизации и повышения производительности и экспрессности определений используют сочетание методологии проточного анализа с амперометрическим детектированием на МЭ. В лабораторной практике наиболее распространенными являются методы проточно-инжекционного и последовательного инжекционного анализа.

В настоящей работе разработаны высокочувствительные и селективные проточно-инжекционные амперометрические способы определения органических аналитов на МЭ с электроосажденными частицами металлов (Au, Ni, Co) и оксидами металлов ( $\text{IrO}_x$ ,  $\text{MnO}_x$ ,  $\text{BiO}_x$ ) и бинарными системами на их основе. Предложенные способы определения органических соединений – маркеров заболеваний – можно применять для неинвазивного, экспрессного и производительного анализа физиологических жидкостей в биохимических лабораториях для диагностики и лечения заболеваний.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».*

## ННС-КОМПЛЕКСЫ ПАЛЛАДИЯ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Булат Халимович Гафиатуллин, Владимир Александрович Бурилов,  
Игорь Сергеевич Антипин

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: bul1212@yandex.ru*

**Ключевые слова:** тиакаликс[4]арен, ННС-комплекс палладия, мицелярный катализ, амфирил, кросс-сочетание.

Тиакаликс[4]арены являются перспективной платформой для создания самоорганизующихся каталитических систем, так как могут быть легко модифицированы различными функциональными группами, что позволяет синтезировать комбинированные предорганизованные амфифильные структуры, применяемые в мицелярном катализе [1].

Синтез ННС-комплексов палладия на основе тиакаликс[4]арена показан на рис. 1.

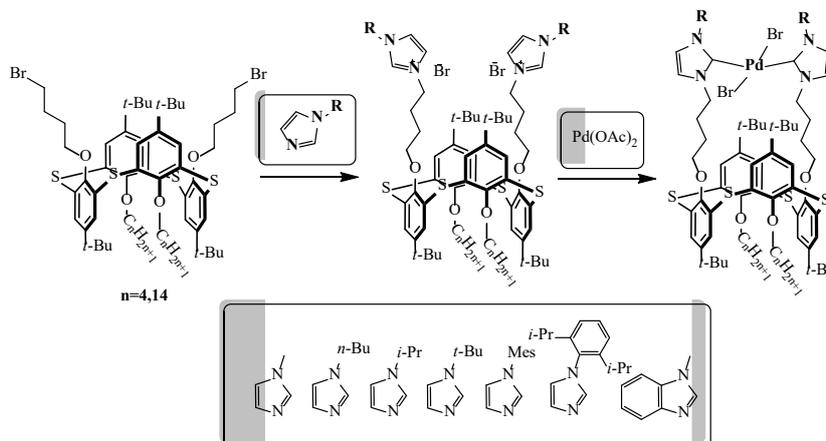


Рис. 1. Синтез ННС-комплексов палладия на основе тиакаликс[4]арена

По результатам данной работы был предложен подход к синтезу новых палладиевых комплексов на основе имидазолиевых производных тиакаликс[4]арена. Комплексы показали высокую каталитическую активность и селективность в реакциях кросс-сочетания, а также в реакциях восстановления [2].

### Список литературы

1. *La Sorella G.* Recent advances in catalysis in micellar media / G. La Sorella, G. Strukul, A. Scarso // *Green Chemistry*. – 2015. – P. 644–683.
2. *Burilov V.A.* Amphiphilic Pd (II)-NHC complexes on 1,3-alternate p-tertbutylthiacalix[4]arene platform: synthesis and catalytic activities in coupling and hydrogenation reactions / V.A. Burilov, B.H. Gafiatullin, D.A. Mironova et al. // *European Journal of Organic Chemistry*. – 2020. – P. 2180–2189.

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНТАЛЬПИИ ИСПАРЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ: НОВЫЙ ПОДХОД

Дмитрий Николаевич Болматенков, Михаил Искандерович Ягофаров,

Борис Николаевич Соломонов

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: bolmatenkov@yandex.ru*

**Ключевые слова:** энтальпия испарения, закон Кирхгофа, теплоемкость.

Энтальпия испарения представляет собой одну из ключевых характеристик равновесия жидкость-газ. Эта величина используется при расчете тепловых балансов, оптимизации процессов очистки и разделения органических соединений, экстраполяции температурной зависимости давления пара, служит мерой межмолекулярных взаимодействий в жидкой фазе. Температурная зависимость энтальпии испарения задается законом Кирхгофа:

$$\Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} H(T_2) = \Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} H(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} C_{\text{p,m}} dT \quad (1)$$

Для пересчета энтальпий испарения от одной температуры к другой требуется знание разности изобарных теплоемкостей идеального газа и жидкости –  $\Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} C_{\text{p,m}}$ . Вследствие несовершенства существующих способов оценки  $\Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} C_{\text{p,m}}$  [1] был разработан новый подход, в рамках которого разность теплоемкостей может быть рассчитана по эмпирической корреляции с энтальпией испарения:

$$-\Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} C_{\text{p,m}}(298,15 \text{ K}) / (\text{Дж К}^{-1} \text{ моль}^{-1}) = a \cdot \Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} H(298,15 \text{ K}) / (\text{кДж моль}^{-1}) + b \quad (2)$$

Эмпирические коэффициенты уравнения (2) различны для ароматических соединений, алифатических соединений, а также самоассоциированных соединений. Так как разность  $\Delta_{\text{ж}}^{\text{r}} H(298,15 \text{ K})$  легко может быть рассчитана по структуре молекулы, комбинация уравнений (1) и (2) позволяет предсказывать высокотемпературные энтальпии испарения с точностью, сопоставимой с экспериментом, что было проверено более чем на 1 000 экспериментальных точек.

### Список литературы

1. *Chickos J.S.* Heat capacity corrections to a standard state: a comparison of new and some literature methods for organic liquids and solids / J.S. Chickos, S. Hosseini, D.G. Hesse et al. // *Structural Chemistry*. – 1993. – Vol. 4. – Is. 4. – P. 271–278.

## 1,2-ОКСАФОСФОЛЕНЫ НА ОСНОВЕ ЦИКЛИЧЕСКИХ МОНОТЕРПЕНОИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ $\alpha,\beta$ -НЕПРЕДЕЛЬНЫЙ КЕТОННЫЙ ФРАГМЕНТ

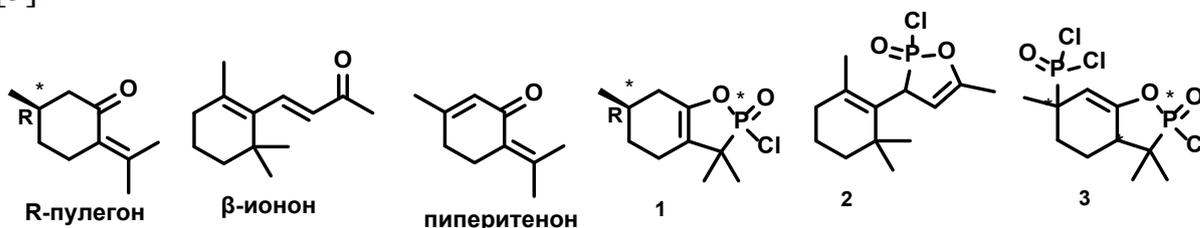
Мария Эдуардовна Шемахина<sup>1,2</sup>, Ульяна Павловна Урубкова<sup>1</sup>,  
Андрей Владимирович Немтарев<sup>1,2</sup>, Владимир Федорович Миронов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University

<sup>2</sup> Россия, Казань, Институт органической и физической химии  
имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН  
Russia, Kazan, Institute of Organic and Physical Chemistry  
named after A.E. Arbuzov FRC KazSC RAS  
E-mail: masha-shem@mail.ru

**Ключевые слова:** пулегон, пиперитенон,  $\beta$ -ионон, фосфолен, фосфолан.

Фосфорсодержащие гетероциклические соединения находят широкое применение в органическом синтезе [1–2]. В работе на примере пулегона,  $\beta$ -ионона и пиперитенона, содержащих сопряженные с карбонильной группой экзо- и/или эндоциклические кратные связи C=C, рассматриваются особенности формирования Р-гетероциклических соединений (1–3) в реакции с алкилдигалогенфосфитами [3].



Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».

### Список литературы

1. Schoene J. A General One-Pot Synthesis of 2*H*-Indazoles Using an Organophosphorus-Silane System / J. Schoene, H. Bel Abed, P. Schmieder et al. // Chemistry-A European Journal. – 2018. – Vol. 24. – Is. 36. – P. 9090–9100.
2. Yamada M. Preparation and characterization of novel 4-bromo-3,4-dimethyl-1-phenyl-2-phospholene 1-oxide and the analogous phosphorus heterocycles or phospho sugars / M. Yamada, M. Yamashita, T. Suyama et al. // Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. – 2010. – Vol. 20. – No. 19. – P. 5943.
3. Немтарев А.В. 3,3,6-Триметил-2-хлорциклогексено[1,2-*d*]-1,2-оксафосфол-4-ен-2-оксид – удобный прекурсор в синтезе аналогов лекарственного препарата димефосфон / А.В. Немтарев, М.Э. Шемахина, В.Ф. Миронов // Журнал общей химии. – 2017. – Т. 87. – № 4. – С. 691–693.

## НЕКОТОРЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ БИОНЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**Валерий Григорьевич Штырлин, Никита Юрьевич Серов,  
Михаил Сергеевич Бухаров, Эдуард Махмутович Гилязетдинов,  
Александр Александрович Крутиков, Ахмед Мохамед Али Мохамед,  
Айрат Ризванович Гарифзянов, Ильдар Ирекович Мирзаянов,  
Максим Александрович Жернаков, Антон Валерьевич Ермолаев,  
Никита Сергеевич Аксенин, Кира Валерьевна Уразаева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Valery.Shtyrlin@gmail.com*

**Ключевые слова:** координационная химия, биологическая активность, стереоселективность, структура, термодинамика, кинетика, моделирование.

Понимание причин специфичности и селективности процессов в живой природе является крупнейшей проблемой науки, решение которой во многом зависит от достижений координационной и бионеорганической химии. В настоящей работе представлены результаты синтеза, исследований структуры, термодинамики и стереоселективности образования, а также кинетики реакций замещения гомо- и гетеролигандных комплексов ряда 3d- и 4f-металлов с энантимерно однородными и рацемическими формами аминокислот, ди- и трипептидами, ароматическими N-донорами, новыми изоникотиноил-гидразами и фосфорилированными дитиокарбаматами на фоне солей разной концентрации при нескольких температурах. Для этого использован комплекс взаимодополняющих спектральных методов, включая статическую СФ-метрию, КД-спектроскопию, ЭПР, ЯМР, ЯМР-релаксацию, метод остановленной струи и рН-потенциометрию в сочетании с математическим моделированием путем использования ряда современных программ, в том числе авторских программ STALABS и STALABS-M, метод PCA и расчеты методами DFT и MD. Выявлены основные факторы, определяющие структуру, стереоселективность комплексообразования и замещения лигандов, стабильность и лабильность комплексов, и оценена биологическая активность ряда из них. Рассмотрен вклад координационной химии в решение проблемы происхождения жизни.

## ПИЛЛАР[*n*]АРЕНЫ: ОТ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНТИДОТОВ ДО КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Дмитрий Николаевич Шурпик, Юлия Игоревна Александрова,  
Ляйсан Илдусовна Махмутова, Алан Артурович Ахмедов,  
Ольга Александровна Мостовая, Иван Иванович Стойков  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: dnshurpik@mail.ru*

**Ключевые слова:** пиллар[5]арен, пиллар[6]арен, пиллар[7]арен, супрамолекулярные гели, супрамолекулярная химия, самосборка, комплексы включения, гели, наноконтейнеры, макроциклические соединения, полифункциональные соединения.

В 1987 г. за широкомасштабные исследования, включающие создание искусственных молекул, способных имитировать жизненно важные химические реакции, протекающие в живых организмах, Жан-Мари Лен, Чарльз Джон Педерсен и Доналд Джеймс Крам были удостоены Нобелевской премии. Потребовалось почти тридцать лет для того, чтобы эти фундаментальные исследования нашли применение в фармакологии и медицине. Макроциклические рецепторы на основе пиллар[*n*]аренов уже на протяжении 15 лет представляют интерес для создания макроциклических «контейнеров» под терапевтические агенты, а также прекурсоров для конструирования функциональных материалов биомедицинского назначения.

В данном исследовании нами были синтезированы и охарактеризованы новые макроциклические системы на основе производных пиллар[*n*]арена ( $n = 5, 6, 7$ ). Полученные соединения проявили себя как эффективные антидоты в реверсии нервно-мышечной блокады за счет связывания мышечного релаксанта – роркуроний бромида. Также продемонстрирована способность синтезированных соединений к самосборке в наноразмерные супрамолекулярные архитектуры различной морфологии в присутствии ионов металлов. Установлено, что большинство соединений не проявляет статистически достоверной цитотоксической активности во всем диапазоне исследованных концентраций (10–500 мкг/мл). Полученные результаты свидетельствуют о возможности применения замещенных пиллар[*n*]аренов в качестве универсальных синтетических блоков для конструирования биомедицинских систем нового поколения.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».*

## ТЕРМИЧЕСКИЕ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ОЛИГОПЕПТИДОВ

**Радик Анатольевич Ларионов, Марат Ахмедович Зиганшин,  
Суфия Асхатовна Зиганшина, Александр Евгеньевич Климовицкий,  
Хасан Рафаэлевич Хаяров, Ильдар Хамидович Ризванов**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
Russia, Kazan, Kazan Federal University  
E-mail: radik.larionov@gmail.com*

**Ключевые слова:** олигопептиды, циклизация, клатраты, самосборка.

В настоящее время на основе олигопептидов с использованием методов термической обработки получают разнообразные биосовместимые наноструктуры, имеющие широкое биомедицинское применение. Вместе с тем в литературе практически отсутствует информация о критических температурах, выше которых процессы самоорганизации олигопептидов переходят в химические реакции, кроме того, остаются практически не изученными термические свойства клатратов олигопептидов с органическими соединениями.

В связи с этим в настоящей работе было проведено изучение термических свойств ряда алифатических и ароматических дипептидов в твердой фазе, а также клатратов трилейцина с органическими соединениями. Были определены температуры начала реакций циклизации дипептидов в твердой фазе. Обнаружено, что с увеличением размера молекул дипептидов, в общем, происходит снижение температуры начала циклизации. В рамках неизотермической кинетики проведено кинетическое исследование этих реакций. Была обнаружена память кристаллов трилейцина к ранее связанным гостям, проявляющаяся в виде термических эффектов на кривой дифференциальной сканирующей калориметрии при отсутствии потери массы. Различие в самосборке линейных и циклических дипептидов было визуализировано 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.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».*

## СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ АМИНОФОСФАБЕТАИНОВ И ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ

**Рустам Рифхатович Давлетшин, Айдар Маратович Гайнеев,  
Никита Олегович Кузнецов, Ирина Васильевна Галкина**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: alchemy-rus07@yandex.ru*

**Ключевые слова:** синтез, аминоксфабетаины, антимикробная активность, фосфорилированные четвертичные соли аммония.

Для подавления размножения устойчивых к противомикробным препаратам возбудителей требуется постоянный поиск и создание новых соединений, обладающих высоким, эффективным и селективным антимикробным действием. Нами была получена серия фосфорилированных четвертичных аммониевых солей (ЧАС) и их производных – аминоксфабетаинов, содержащих длинноцепочечные алкильные заместители у атома азота (рис. 1).

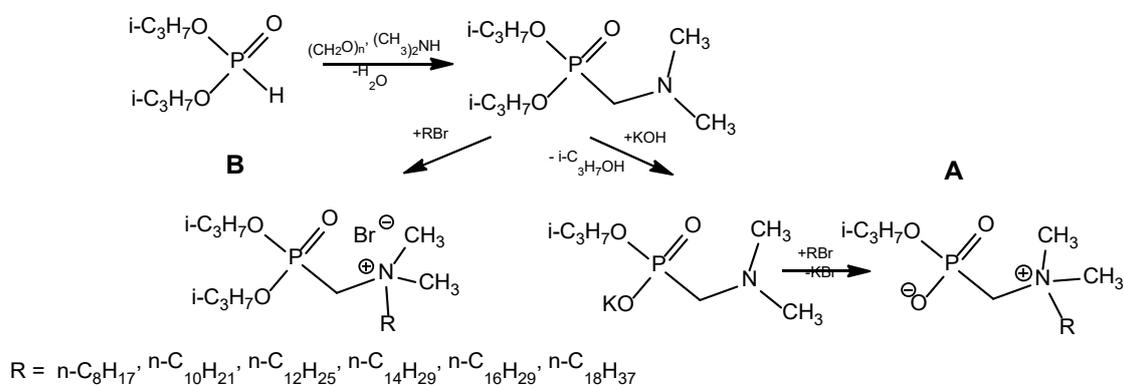


Рис. 1. Схема синтеза аминоксфабетаинов (А) и фосфорилированных ЧАС (В)

Продукты синтеза были выделены и охарактеризованы физическими методами исследования: ЯМР <sup>31</sup>P, <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, масс-спектрометрией, ИК-спектроскопией, ТГ- и ДСК-анализом, рентгеноструктурным анализом.

Установлено, что фосфорилированные ЧАС проявляют высокую антимикробную активность по отношению к штаммам бактерий: *Escherichia coli*, *Bacillus cereus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus*, в то время как аминоксфабетаины активны только в отношении *Bacillus cereus* и *Staphylococcus aureus*. Все соединения обладают высокой активностью в отношении грибов рода *Candida*.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-33-90255.*

**НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
В АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ БИОСЕНСОРАХ И ИММУНОАНАЛИЗЕ  
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ  
В МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ  
И ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ**

**Алсу Айдаровна Явишева, Регина Марковна Бейлинсон,  
Эльвина Павловна Медянцева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Alsuyav@mail.ru*

**Ключевые слова:** хлорамфеникол, диклофенак, поляризационный флуоресцентный иммуноанализ, электрохимические биосенсоры, иммуноанализ.

На сегодняшний день одними из наиболее часто применяемых препаратов являются антибиотики, в частности хлорамфеникол, и лекарственные соединения нестероидного и противовоспалительного действия, в частности диклофенак, имеющие широкий список побочных действий. Поэтому разработка экспрессных, специфичных, чувствительных методов анализа для определения этих лекарственных препаратов остается актуальной задачей. Среди таких методов выделяются поляризационный флуоресцентный иммуноанализ (ПФИА), использование электрохимических биосенсоров, модифицированных наноструктурированными материалами.

Для анализа нами был выбран вариант гомогенного конкурентного анализа ПФИА. В качестве метки при разработке методики ПФИА мы использовали зеленый флуоресцентный комплекс тербия (III) и квантовые точки. Линейный диапазон градуировочной зависимости наблюдался в области концентраций  $1 \times 10^{-11}$ – $1 \times 10^{-7}$  и  $1 \times 10^{-10}$ – $1 \times 10^{-6}$  М для хлорамфеникола и диклофенака соответственно.

Разработаны амперометрические биосенсоры для определения диклофенака на основе платиновых электродов. Для селективного определения хлорамфеникола разработан иммуноферментный сенсор с тирозиназой в качестве метки. Диапазоны определяемых концентраций составили  $1 \times 10^{-10}$ – $1 \times 10^{-6}$  М и  $1 \times 10^{-9}$ – $1 \times 10^{-6}$  М для хлорамфеникола и диклофенака соответственно. В работе были использованы углеродные нанотрубки (УНТ), восстановленный оксид графена (ВОГ), наноалмазы (НА), наночастицы золота (НЧ Au) и нанокомпозиты на их основе, которые позволили расширить диапазон определяемых концентраций.

Разработанные методики были апробированы в анализе пищевых продуктов (молока) и лекарственных препаратов (диклофенака и аэртала).

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ ПОДХОД  
ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГИПОКСИИ:  
НОВЫЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ  
АЗО-МЕТАЦИКЛОФАНОВ С КРАСИТЕЛЯМИ**

**Ахмед Мохамед Али Мохамед<sup>1</sup>, Фарида Баяновна Галиева<sup>2</sup>,  
Залия Валиевна Ахметзянова<sup>2</sup>, Диана Александровна Миронова<sup>1</sup>,  
Владимир Александрович Бурилов<sup>1</sup>, Светлана Евгеньевна Соловьева<sup>1,2</sup>,  
Игорь Сергеевич Антипин<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Казань, Институт органической и физической химии  
имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН  
*Russia, Kazan, Institute of Organic and Physical Chemistry  
named after A.E. Arbuzov FRC KazSC RAS*  
*E-mail: makchemistry22@yahoo.com*

**Ключевые слова:** гипоксия, супрамолекулярные комплексы, макроциклы, красители.

Состояние гипоксии сопутствует развитию многих патологических процессов в организме человека, а также является показателем агрессивности опухолей. В связи с этим важной задачей для исследователей является разработка подхода к созданию нетоксичных супрамолекулярных систем для обнаружения гипоксии на основе комплексов «гость-хозяин». Использование макроциклов метациклофановой природы в качестве синтетической платформы представляется перспективным подходом, поскольку он имеет ряд преимуществ в сравнении с традиционными лигандами. В настоящей работе был осуществлен синтез политопных лигандов на основе трех макроциклических платформ: каликс[4]арена **1**, **2** [1], тиакаликс[4]арена **1**, **2**, **3** [2] и метациклофана **4**, функционализированных азо-фрагментами по верхнему и нижнему ободам (рис. 1).

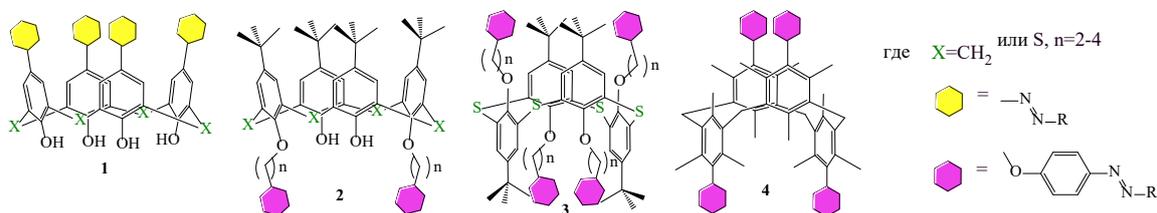


Рис. 1. Макроциклические платформы на основе каликс[4]арена **1**, **2**, тиакаликс[4]арена **1**, **2**, **3** и метациклофана **4**, функционализированные азо-фрагментами

Их структура была доказана комплексом физико-химических методов. Методами люминесцентного и УФ-титрования показано, что полученные азопроизводные образуют комплексы «гость-хозяин» с родамином 6G, родамином В, родамином 123, люцигенином и бромистым этидием.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-00138.*

## ОКСИД ГРАФЕНА: МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ, СТРУКТУРА И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**Айрат Маратович Димиев**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: AMDimiev@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** оксид графена, интеркалированные соединения графита, механизм образования оксида графена, структура оксида графена, взаимодействие с металлами.

Работа посвящена исследованию механизма последовательной трансформации графита в окислительных кислотных средах в серию промежуточных продуктов. Конечным продуктом этих трансформаций является оксид графита и оксид графена (ОГ). В работе исследованы структура и химия оксида графена в целом ряде процессов, начиная с возникновения кислородных групп при синтезе ОГ и заканчивая трансформацией этих групп в процессе его взаимодействия с водой. Отдельно исследовано взаимодействие ОГ с солями металлов в водных средах и структура образуемых композитов ОГ/металл. В работе сформулирована гипотеза, согласно которой структура и химические свойства ОГ во многом определяются подвижным характером кислородных функциональных групп.

### Список литературы

1. *Димиев А.М.* Оксид графена: механизм образования, структура и химические свойства: дис. ... докт. хим. наук / А.М. Димиев. – Казань, 2022. – 206 с.
2. *Dimiev A.M.* Mechanism of the graphene oxide formation: the role of water, “reversibility” of the oxidation, and mobility of the C–O bonds / А.М. Dimiev, К. Shukhina, А. Khannanov // Carbon. – 2020. – Vol. 166. – P. 1–14.

**ИТОГИ ИССЛЕДОВАНИЯ  
МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ТРЕТИЧНЫХ ФОСФИНОВ  
С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ**

**Алексей Валерьевич Салин**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: salin555@mail.ru*

**Ключевые слова:** фосфониевые еноляты, органокатализ.

Фосфониевые еноляты, образующиеся при присоединении третичных фосфинов к непредельным электрофильным соединениям, являются ключевыми интермедиатами фосфин-катализируемых реакций, нашедших широкое применение в органическом синтезе [1]. Удобной кинетической системой для изучения реакционной способности фосфониевых енолятов явилось присоединение третичных фосфинов к непредельным электрофильным соединениям в присутствии кислоты. Для данных реакций характерен общий кислотный катализ, свидетельствующий о том, что лимитирующей стадией является перенос протона. Такой механизм обусловлен высокой неустойчивостью фосфониевых енолятов, при которой их распад на исходные реагенты происходит быстрее протонирования в кислой среде. Рассчитанное время жизни таких интермедиатов оказалось находящимся в фемтосекундном диапазоне. Кинетические и квантово-химические данные выявили существенную роль внутримолекулярного  $P^+ \cdots O^{\delta-}$  взаимодействия в стабилизации фосфониевых енолятов. В реакциях с активированными алкенами, имеющими фиксированную *s*-*cis*-геометрию, обнаружен эффект анхимерного содействия. Данный эффект позволил разработать методы хемо- и стереоселективной функционализации природных сесквитерпеновых  $\alpha$ -метил- $\gamma$ -бутиролактонов на основе органокатализа третичными фосфинами. Среди синтезированных производных обнаружены соединения, обладающие селективным цитотоксическим действием в отношении раковых клеточных линий.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00029.*

**Список литературы**

1. Guo H. Phosphine organocatalysis / H. Guo, Y.C. Fan, Z. Sun et al. // Chemical Reviews. – 2018. – Vol. 118. – No. 20. – P. 10049–10293.

**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ДНК-СЕНСОРЫ  
НА ОСНОВЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА  
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОКСОРУБИЦИНА И ПОВРЕЖДЕНИЯ ДНК**

**Анастасия Николаевна Маланина, Юрий Иванович Кузин,  
Геннадий Артурович Евтюгин**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: malanast@mail.ru*

**Ключевые слова:** дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК), ДНК-сенсор, фенотиазины, электрополимеризация, определение доксорубицина.

Фенотиазиновые красители находят применение при создании электрохимических сенсоров и биосенсоров как медиаторы электронного переноса. Их реакционная способность, взаимодействие с биоконпонентами в пределах поверхностного слоя и способность к электрополимеризации напрямую зависят от природы функциональных групп заместителей. Поэтому представляет интерес характеристика новых синтезированных фенотиазиновых препаратов с катионными и анионными группами при фенотиазиновом ядре, влияющими на их редокс-свойства. Нами было изучено электрохимическое поведение полимерного покрытия на основе производного фенотиазина с фенилиминовыми фрагментами, а также влияние на него ДНК, физически адсорбированной поверх слоя. Установлена зависимость токов пика окисления/восстановления полимерного покрытия от молекулярной массы ДНК и оценена возможность дискриминации термического и окислительного повреждения ДНК на основе регистрации вольтамперометрического сигнала полимерной формы исследованного фенотиазина. Полученный ДНК-сенсор был также использован для вольтамперометрического определения модельного интеркалятора доксорубицина в интервале его концентраций от 0.1 нМ до 0.1 мМ. С учетом дозы применения указанного препарата в химиотерапии онкологических заболеваний разработанный ДНК-сенсор после дальнейшей оптимизации его конструкции может найти применение для контроля фармакокинетики препарата, индивидуального подбора его дозы и снижения побочного токсического действия на организм онкобольного, а также выявления потенциально канцерогенных факторов в окружающей среде.

## ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ СОЛИ, СОДЕРЖАЩИЕ ФРАГМЕНТЫ ЖИРНЫХ КИСЛОТ И ТЕРПЕНОИДОВ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

**Евгений Андреевич Титов<sup>1,2</sup>, Андрей Владимирович Немтарев<sup>1,2</sup>,  
Татьяна Никандровна Паширова<sup>1,2</sup>, Владимир Федорович Миронов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Казань, Институт органической и физической химии  
имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН  
*Russia, Kazan, Institute of Organic and Physical Chemistry  
named after A.E. Arbuzov FRC KazSC RAS*  
E-mail: EvATitov@kpfu.ru

**Ключевые слова:** противоопухолевая активность, направленная доставка, глицидиловые эфиры, терпеновые спирты, ментол, миртенол, камфоленовый спирт.

Моноциклические монотерпеноиды и их функционализированные аналоги характеризуются широким структурным многообразием, а также богатым набором биологически активных веществ, что делает их доступным сырьем для синтеза лекарственных препаратов. Ранее нами было показано [1], что с введением трифенилфосфониевого фрагмента в изначально биологически активное соединение его свойства усиливаются [1, 2] (рис. 1). В работе рассмотрены удобные подходы к синтезу фосфониевых производных, содержащих фрагменты жирных кислот и терпеноидов.

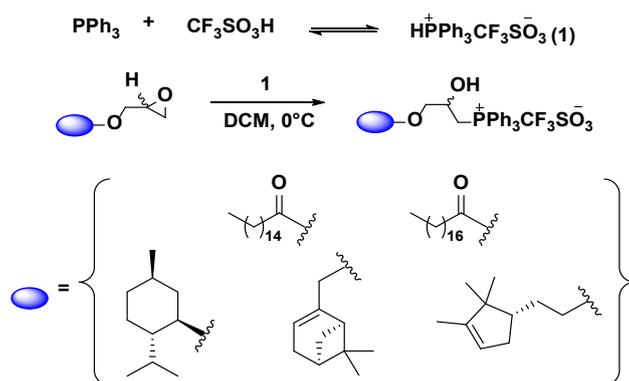


Рис. 1. Введение трифенилфосфониевого фрагмента  
в биологически активное соединение

### Список литературы

1. Mironov V.F. Rational Design 2-Hydroxypropylphosphonium Salts as Cancer Cell Mitochondria-Targeted Vectors: Synthesis, Structure, and Biological Properties / V.F. Mironov, A.V. Nemtarev, O.V. Tsepaveva et al. // *Molecules*. – 2021. – Vol. 26. – No. 21. – P. 6350.
2. Kulkarni C.A. A Novel Triphenylphosphonium Carrier to Target Mitochondria without Uncoupling Oxidative Phosphorylation / C.A. Kulkarni, B.D. Fink, B.E. Gibbs et al. // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2021. – Vol. 64. – No. 1. – P. 662–676.

## НОВЫЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СПОСОБЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВАНОНОВ В ЦИТРУСОВЫХ СОКАХ

Эльвира Наилевна Якупова, Гузель Камилевна Зиятдинова

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: elviraepakupova96@mail.ru*

**Ключевые слова:** вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, наночастицы оксидов металлов, поверхностно-активные вещества, электрополимеризация, фенольные антиоксиданты.

Флаваноны являются природными фенольными антиоксидантами плодов растений семейства цитрусовых и обладают рядом полезных свойств. Как и другие фенольные антиоксиданты, они способны проявлять прооксидантный эффект при высоких концентрациях, что требует строгого контроля их содержания в объектах и разработки способов их определения.

В качестве аналитов рассмотрены гесперидин и нарингин, являющиеся основными флаванонами апельсина и грейпфрута соответственно. Для их определения предложены химически модифицированные электроды на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ), наночастиц диоксида олова, а также послойного сочетания многостенных углеродных нанотрубок с электрополимеризованными фенольными кислотами. Оценено влияние природы ПАВ и проведена оптимизация условий электрополимеризации эллаговой или феруловой кислот по вольтамперометрическому отклику флаванонов. Электроды охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии, циклической вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса.

Разработаны способы определения нарингина и гесперицина в условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии, в том числе с адсорбционным концентрированием. Полученные аналитические характеристики существенно превосходят описанные для других модифицированных электродов. Кроме того, разработанные электроды демонстрируют высокую селективность отклика в присутствии структурно родственных природных фенольных антиоксидантов. Предложенные подходы успешно апробированы на цитрусовых соках.

**ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ СОЕДИНЕНИЙ  
ТРЕХ- И ЧЕТЫРЕХКООРДИНИРОВАННОГО ФОСФОРА  
СО СВЯЗЯМИ P=O, P=S, P=Se И АРИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ**

**Анастасия Андреевна Кузнецова<sup>1</sup>, Денис Владимирович Чачков<sup>2</sup>,  
Яна Александровна Верещагина<sup>1</sup>**

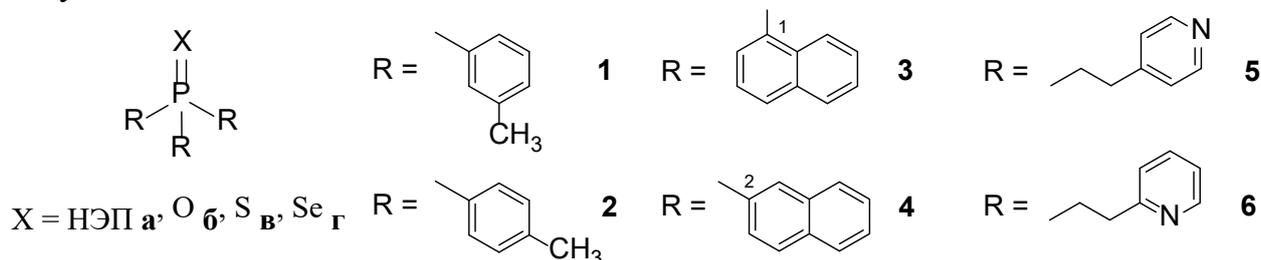
<sup>1</sup> Россия, Казань, Казанский федеральный университет  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

<sup>2</sup> Россия, Казань, Казанское отделение Межведомственного  
суперкомпьютерного центра РАН – филиал ФГУ «ФНЦ НИИСИ РАН»  
*Russia, Kazan, Kazan branch of the Interdepartmental supercomputing center  
of the Russian Academy of Sciences – branch of the Federal State Institution  
“FNTs NIISI RAS”*

*E-mail: kuznetsovaanastan@gmail.com*

**Ключевые слова:** фосфинхалькогениды, конформационный анализ, дипольные моменты, DFT-расчеты.

Фосфины и их халькогениды с тремя объемными заместителями являются востребованными лигандами для металлокомплексов [1], проявляющих биологическую активность, люминесцентные и каталитические свойства.



Определена экспериментальная полярность соединений **1а–г–6а–г** с помощью второго метода Дебая. Осуществлен конформационный анализ **1а–г–6а–г** методами дипольных моментов, ИК-спектроскопии и квантовой химии DFT V3PW91/6-311++G(df,p)+CPCM.

В зависимости от наличия и природы халькогена и расположения ароматического заместителя (3- и 4-толил, 1- и 2-нафтил, 2- и 4-пиридилэтил) выявлены общие закономерности и различия в конформационном поведении фосфинов и их халькогенидов с объемными группами в газовой фазе и в растворе.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-03-00119.*

#### Список литературы

1. *Kuimov V.A. Synthesis of Long-Chain n-Alkylphosphonic Acids by Phosphonylation of Alkyl Bromides with Red Phosphorus and Superbase under Micellar/Phase Transfer Catalysis / V.A. Kuimov, S.F. Malysheva, N.A. Belogorlova et al. // European Journal of Organic Chemistry. – 2021. – No. 36. – P. 6240–6245.*

**СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ  
ОПТИЧЕСКИ ЧИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ  
НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА, ТИОЛОВ И ТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ**

**Алсу Мунавировна Хабибрахманова, Энзе Салимзяновна Раббаниева,  
Лилия Зиннуровна Латыпова, Альмира Рафаэловна Курбангалиева**  
*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*  
*Russia, Kazan, Kazan Federal University*  
*E-mail: AMHabibrahmanova@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** 2(5H)-фураноны, тиоэфиры, *бис*-тиоэфиры, сульфоны, сульфоксиды, S-гетероциклы, селективность, антимикробная активность.

Данная работа посвящена разработке методов синтеза, изучению строения и биологически активных свойств оптически чистых гетероциклов на основе 3,4-дигалоген-2(5H)-фуранонов, моно-, дитиолов и терпеновых спиртов.

При взаимодействии 5(S)-(l-ментилокси)- и 5(S)-(l-борнилокси)-2(5H)-фуранонов с арилтиолами и алифатическими дитиолами в присутствии Et<sub>3</sub>N получены новые оптически активные тиоэфиры и *бис*-тиоэфиры. В реакциях окисления моно- и дитиопроизводных 5-ментилокси- и 5-борнилоксифуранонов избытком раствора пероксида водорода в уксусной кислоте синтезированы хиральные моно- и дисульфоны. Разработаны методы получения моно- и дисульфоксидов ряда 2(5H)-фуранона в оптически чистом виде, основанные на действии *m*-хлорнадбензойной кислоты или H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> на соответствующие арилтиоэфиры и *бис*-тиоэфиры. Реакции *m*-хлорнадбензойной кислоты с ментил- и борнилсодержащими производными ряда [1,4]дитиино[2,3-*c*]фуран-5(7H)-она протекают селективно с образованием моносульфоксидов с S=O группой у атома углерода, находящегося в α-положении по отношению к карбонильной группе.

Проведен направленный синтез флуоресцентного сульфона фуранона для изучения его способности проникать в клетки бактерий. В ряду синтезированных гетероциклов выявлены соединения с антимикробной, противогрибковой и противовоспалительной активностью, а также фураноны, проявившие синергизм с антибиотиками аминогликозидного ряда и бензалкония хлоридом.

## НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ГОМОГЕННОЙ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА И ГЕНЕРИРОВАНИЯ ВОДОРОДА

Дмитрий Григорьевич Яхваров

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: yakhvar@iopc.ru

**Ключевые слова:** гомогенный катализ, этилен, олигомеризация, альфа-олефины, металлоорганические сигма-комплексы, черный фосфор, водород.

Поиск новых экологически безопасных и ресурсосберегающих методов и подходов к получению высокоэффективных металлокомплексных катализаторов для процессов олиго- и полимеризации этилена является ключевым приоритетом современной синтетической металлоорганической химии [1].

В настоящей работе рассмотрены разработанные научные подходы к модификации известных и созданию новых каталитических систем для промышленных процессов. Особый акцент будет сделан на разработке новых постметаллоценовых каталитических систем для процессов димеризации этилена и селективного получения бутена-1 [1,2], использовании новых альтернативных источников энергии, таких, как электричество, для препаративного получения каталитически активных металлокомплексных катализаторов [3–6], применении  $\alpha$ -фосфорилированных  $\alpha$ -аминокислот для модификации катализаторов SHOP [7,8], а также использовании элементного (черного) фосфора в качестве катализатора процесса получения молекулярного водорода путем электрокаталитического расщепления воды [9].

### Список литературы

1. *Bekmukhamedov G.E.* Ni-Based Complexes in Selective Ethylene Oligomerization Processes / G.E. Bekmukhamedov, A.V. Sukhov, A.M. Kuchkaev et al. // *Catalysts*. – 2020. – Vol. 10. – Is. 5. – P. 498.
2. *Yakhvarov D.G., Bekmukhamedov G.E., Sukhov A.V., Kuchkaev A.M., Kuchkaev A.M.* Russian Patent 2 778 506. – 2022.
3. *Gafurov Z.N.* Electrochemical methods for synthesis and in situ generation of organometallic compounds / Z.N. Gafurov, A.O. Kantyukov, A.A. Kagilev et al. // *Coordination Chemistry Reviews*. – 2021. – No. 442. – P. 213986.
4. *Yakhvarov D.G.* Electrochemical Synthesis and Properties of Organonickel  $\sigma$ -Complexes / D.G. Yakhvarov, A.F. Khusnuriyalova, O.G. Sinyashin // *Organometallics*. – 2014. – Vol. 33. – Is. 18. – P. 4574–4589.
5. *Yakhvarov D.G., Ganushevich Yu.S., Trofimova E.A., Sinyashin O.G.* Russian Patent 2 396 375. – 2010.
6. *Yakhvarov D.G., Ganushevich Yu.S., Sinyashin O.G.* Russian Patent 2 400 488. – 2010.

7. Yakhvarov D.G. *O-Acylated 2-Phosphanylphenol Derivatives – Useful Ligands in the Nickel-Catalyzed Polymerization of Ethylene* / D.G. Yakhvarov, K.R. Basvani, M.K. Kindermann et al. // *European Journal of Inorganic Chemistry*. – 2009. – P. 1234.
8. Peulecke N. *Chemistry of  $\alpha$ -Phosphanyl  $\alpha$ -Amino Acids* / N. Peulecke, D.G. Yakhvarov, J.W. Heinicke et al. // *European Journal of Inorganic Chemistry*. – 2019. – P. 1507.
9. Kuchkaev A.M. *Chemical Functionalization of 2D Black Phosphorus toward Its Applications in Energy Devices and Catalysis: A Review* / A.M. Kuchkaev, S. Lavate, A.M. Kuchkaev et al. // *Energy Technology*. – 2021. – P. 2100581.

## ПРЕДСКАЗАНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ И ЕГО АНАЛОГОВ

**Аделия Альбертовна Фатыхова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: adafatyhova@kpfu.ru*

**Ключевые слова:** планирование синтеза, de novo дизайн молекул.

В настоящее время планирование химического синтеза каких-либо соединений, в частности лекарственных, является чрезвычайно важной задачей. Современные методы разработки лекарств, такие, как виртуальный скрининг, докинг, de novo дизайн, позволяют генерировать множество молекул, имеющих необходимую биологическую активность и другие свойства. Одной из проблем является то, что некоторая часть перспективных молекул не может перейти на следующий этап разработки в связи с проблемой их синтеза. В данной работе мы представляем подход к планированию прямого химического синтеза (от реагентов к продуктам), основанный на методе поиска по дереву Монте-Карло. В отличие от традиционного ретросинтетического подхода метод прямого синтеза позволяет предсказывать путь синтеза не только целевой молекулы, но и молекул, похожих на целевую. Это обусловлено тем, что, постепенно приближаясь к целевой молекуле, на каждом этапе алгоритм предсказывает множество соединений, которые потенциально могут обладать похожими свойствами.

Разработанный инструмент состоит из нескольких основных блоков, таких, как: базы данных молекул и реакционных правил, модули для проведения виртуальных реакционных превращений и эвристические алгоритмы для быстрого поиска, основанные на метриках сходства. Разработанный подход использует коммерчески доступные химические соединения в качестве начальных реагентов и правила реакционных превращений для генерации новых продуктов. Трансформации осуществляются с помощью виртуального реактора, который позволяет генерировать химически правильные структуры. Методы поиска по дереву Монте-Карло позволяют эффективно ориентироваться в огромном пространстве химических соединений, находя лучшие решения за оптимальное время.

*Работа финансировалась в рамках проекта, поддержанного Российским научным фондом, № 19-73-10137 (код ГРНТИ 31.01.77).*

**ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И СИСТЕМ  
НА ОСНОВЕ КЛАСТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ  
МЕТАЛЛОВ НА ИММУНОХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ  
ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ АНТИДЕПРЕССАНТОВ  
В БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОДАХ**

**Эльвина Рафаиловна Газизуллина, Даниил Владимирович Брусницын,  
Эльвина Павловна Медянцева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: elvina1704@yandex.ru*

**Ключевые слова:** иммуносенсор, углеродные материалы, гексарениевые кластерные комплексы, поляризационный флуоресцентный иммуноанализ, силикатные рутениевые наночастицы, трициклические антидепрессанты.

Определение содержания лекарственных соединений в фармацевтических препаратах и биоматериалах для контроля безопасности и эффективности медикаментозного лечения является актуальной задачей. Также важен мониторинг фармацевтических препаратов при их неправильной утилизации, что может привести к загрязнению поверхностных вод.

Предложены иммуносенсоры на основе гибридных модификаторов (сочетания углеродных нанотрубок, фуллерена, оксида графена и восстановленного оксида графена с гексарениевыми кластерными комплексами и наноалмазами) для определения трициклических антидепрессантов. Модификация электродов углеродными материалами обеспечивает высокую электропроводность и адсорбционную способность, а кластерами рения и наноалмазами – регистрацию иммунохимического взаимодействия.

В качестве альтернативного способа определения антидепрессантов предложен поляризационный флуоресцентный иммуноанализ, основанный на конкуренции определяемого антигена с трейсером (антигеном, меченным силикатными наночастицами, допированными комплексами рутения) за ограниченное число центров связывания специфических антител.

Разработаны и апробированы методики для иммунохимического определения антидепрессантов (амитриптилин, дезипрамин, имипрамин) в фармацевтических препаратах, водных и биологических объектах (урина, грудное молоко) с относительным стандартным отклонением не более 0.070.

## ХИНОПИМАРОВАЯ И ДЕГИДРОХИНОПИМАРОВАЯ КИСЛОТЫ В СИНТЕЗЕ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ, ОБЛАДАЮЩИХ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

**Анастасия Максимовна Шинкарева, Андрей Владимирович Немтарев,  
Владимир Федорович Миронов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

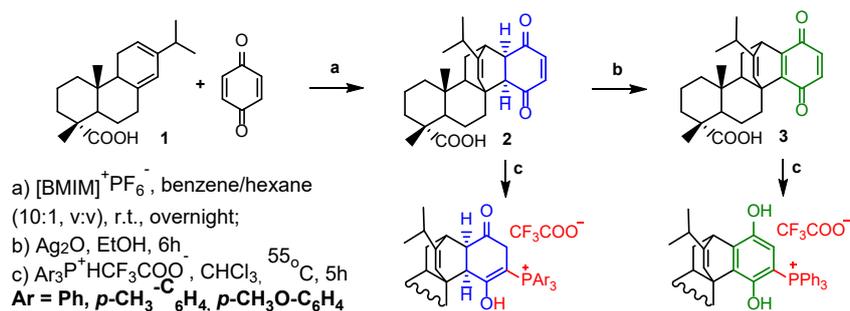
*E-mail: amshinkarjova@stud.kpfu.ru*

**Ключевые слова:** фосфониевые соли, пара-хиноны,  $\alpha,\beta$ -ненасыщенные  $\gamma$ -дикетоны, хинопимаровая кислота, дегидрохинопимаровая кислота.

Известно, что аддукты левопимаровой кислоты **1** с бензохинонами проявляют широкий спектр биологической активности [1]. В целях повышения противоопухолевой активности в последние годы широко используется введение в молекулы триарилфосфониевого фрагмента, который обеспечивает их направленный транспорт в митохондрии опухолевых клеток [2].

В представленной работе был получен ряд четвертичных фосфониевых солей на основе хинопимаровой **2** и дегидрохинопимаровой **3** кислот. Для полученных солей была оценена цитотоксичность в отношении нормальных и опухолевых клеточных линий человека *in vitro*. Протестированные соединения проявили умеренную цитотоксичность в отношении всех клеточных линий.

*Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета «Приоритет-2030».*



### Список литературы

1. *Tretyakova E.V.* Synthesis and antiviral activity of maleopimaric and quinopimaric acids' derivatives / E.V. Tretyakova, I.E. Smirnova, E.V. Salimova et al. // *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. – 2015. – Vol. 23. – Is. 20. – P. 6543–6550.

2. *Kulkarni C.A.* A Novel Triphenylphosphonium Carrier to Target Mitochondria without Uncoupling Oxidative Phosphorylation / C.A. Kulkarni, B.D. Fink, B.E. Gibbs et al. // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2021. – Vol. 64. – Is. 1. – P. 662–676.

## НОВЫЕ КАЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДИКИ ИЗУЧЕНИЯ АНФОЛДИНГА И РЕФОЛДИНГА БЕЛКОВ

Алиса Амировна Фатхутдинова, Тимур Анварович Мухаметзянов

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Fatkhutdinova.alisa.a@gmail.com*

**Ключевые слова:** калориметрия, белки.

Дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК) – один из важнейших методов, позволяющих измерить термодинамические параметры анфолдинга и рефолдинга белков. Особенностью ДСК является чувствительность к изменениям термической стабильности белковых молекул. В частности, метод ДСК позволяет обнаружить дезамидированную форму лизоцима, обладающую пониженной термической устойчивостью, хотя спектры КД и ИК этой формы практически неразличимы с нативной [1].

В последнее время развиваются новые калориметрические методики, такие, как сверхбыстрая калориметрия, термомодулированная калориметрия, однако в исследовании белков они практически не применяются.

Мы использовали метод сверхбыстрой калориметрии для изучения рефолдинга (повторного сворачивания) лизоцима в глицерине [2]. Установлено, что в ходе рефолдинга лизоцима образуется частично свернутый интермедиат, при этом сворачивание белка может идти двумя путями.

Также мы провели теоретическое моделирование калориметрических кривых анфолдинга белка в режиме ступенчатого сканирования и реализовали эту методику на практике при помощи капиллярного ДСК и сверхбыстрого калориметра [3]. Обработка калориметрических кривых ступенчатого нагрева позволяет наблюдать за изменением комплексной теплоемкости белка и отдельно оценивать вклады «обратимых» и «необратимых» процессов в общий тепловой поток, а также улучшает качество базовой линии.

### Список литературы

1. *Mukhametzyanov T.A.* Calorimetric observation of lysozyme degradation at elevated temperature in water and DMSO-water mixtures / T.A. Mukhametzyanov, A.A. Fatkhutdinova, I.A. Sedov et al. // *Thermochimica Acta.* – 2021. – Vol. 695. – P. 178826.
2. *Fatkhutdinova A.A.* Refolding of Lysozyme in Glycerol as Studied by Fast Scanning Calorimetry / A.A. Fatkhutdinova, T.A. Mukhametzyanov, C. Schick // *International Journal of Molecular Sciences.* – 2022. – Vol. 23. – No. 5. – P. 2773.
3. *Mukhametzyanov T.A.* Step-scan differential calorimetry of protein denaturation: Modeling and experiment / T.A. Mukhametzyanov, A.A. Fatkhutdinova, C. Schick // *Thermochimica Acta.* – 2022. – Vol. 710. – P. 179181.

## РАЦЕМИЧЕСКИЕ СПИРТЫ В СИНТЕЗЕ ХИРАЛЬНЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ

**Владимир Юрьевич Якимов, Ильяс Саидович Низамов,**

**Ильнар Дамирович Низамов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: vovancubic@mail.ru*

**Ключевые слова:** дитиофосфоновые кислоты, рацемические спирты, никотин, пиридоксин, атропин, цинхоновые алкалоиды, антимикробная активность.

Антимикробные препараты нового поколения могут быть созданы при введении хиральных центров в молекулы дитиофосфоновых кислот. Для решения этой проблемы перспективно использовать такие рацемические спирты, как бутанол-2, 2-этилгексанол и диэтилмалат. Азотистые гетероциклические органические соединения, в том числе природного происхождения, могут образовывать соли с хиральными дитиофосфоновыми кислотами. Среди них можно отметить пиридоксин, 3-гидроксипиридин, никотин, атропин, цинхоновые алкалоиды и аминокислоты.

Разработаны препаративные методы синтеза арилдитиофосфоновых кислот на основе рацемических бутанола-2, 2-этилгексанола и диэтилмалата. Полученные изомерные арилдитиофосфоновые кислоты введены в реакции с пиридоксином, (*S*)-(-)-никотином, атропином, 3-гидроксипиридином, (*8S,9R*)-хинином, (*8R,9S*)-хинидином, (*8S,9R*)-цинхонидином, (*8R,9S*)-цинхонином и (*8R,9S*)-гидрохинидином и *L*-аминокислотами. В этих реакциях образуются диастереомерные соли дитиофосфоновых кислот. В реакции никотина с дитиофосфоновыми кислотами получены пирролидиниевые соли. Рацемический атропин реагирует с дитиофосфоновыми кислотами с образованием смеси изомерных атропиниевых солей. Реакции дитиофосфоновых кислот с цинхоновыми алкалоидами протекают с участием хинукдинового атома азота и образованием хинуклидиниевых солей.

Полученные соли дитиофосфоновых кислот проявляют высокую антимикробную активность.

## ОЦЕНКА ЛИНЕЙНОЙ СКОРОСТИ РОСТА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗАРОДЫШЕЙ ПОЛИ-L-МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

**Руслан Артурович Андрианов, Тимур Анварович Мухаметзянов**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: ruslandomoney@mail.ru*

**Ключевые слова:** нуклеация, классическая теория нуклеации, поли-L-молочная кислота, быстрая сканирующая калориметрия, метод Таммана, линейная скорость роста зародышей.

Первым этапом в процессе кристаллизации является нуклеация - образование зародышей кристаллической фазы. Особенности этого процесса во многом определяют морфологию кристаллов. Однако зародыши практически недоступны для непосредственного наблюдения из-за нанометровых размеров и стохастического характера образования, поэтому для их изучения используют косвенные методы. В настоящей работе для определения линейной скорости роста зародышей поли-L-молочной кислоты (PLLA) применена быстрая сканирующая калориметрия при скоростях сканирования до  $10\,000\text{ K s}^{-1}$ . С использованием модифицированного двухстадийного метода Таммана можно оценить долю зародышей, выживших при нагреве от стадии нуклеации до стадии роста, что позволяет оценить эволюцию во времени радиуса самых крупных зародышей и определить линейную скорость их роста [1].

Оценка порядка величины линейной скорости роста кластеров PLLA размером от 2 до 5 нм для температур нуклеации от 55 до 80 °C дает значения в диапазоне от  $10^{-5}$  до  $10^{-3}$  нм  $\text{s}^{-1}$  соответственно. При 80 °C также доступна линейная скорость роста сферолитов из оптической микроскопии. Соответствующее значение составляет около 1 нм  $\text{s}^{-1}$ , что на три порядка выше, чем значение для зародышей нанометрового размера. Это различие может указывать на качественно разные механизмы роста и переходные эффекты при росте зародышей и кристаллов [2].

### Список литературы

1. *Andrianov R.A. Growth and dissolution of crystal nuclei in poly(l-lactic acid) (PLLA) in Tammann's development method / R.A. Andrianov, R. Androsch, R. Zhang et al. // Polymer. – 2020. – Vol. 196. – P. 122453.*
2. *Andrianov R.A. Radial growth rate of near-critical crystal nuclei in poly(l-lactic acid) (PLLA) in Tammann's two-stage development method / R.A. Andrianov, J.W.P. Schmelzer, R. Androsch et al. // Journal of Chemical Physics. – 2023. – Vol. 158. – Is. 5. – P. 054504.*

## СПЕЦИФИКА ОБУЧЕНИЯ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫМ ПРЕДМЕТАМ ДЕТЕЙ МИГРАНТОВ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Диляра Ленаровна Дарземанова, Сурия Ирековна Гильманшина

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: darzemanova.diluara@mail.ru*

**Ключевые слова:** дети мигрантов, естественнонаучные предметы, обучение.

В последние десятилетия в Российской Федерации наблюдается рост численности обучающихся детей мигрантов. Целью исследования является выявление организационно-методических особенностей обучения детей мигрантов естественнонаучным предметам. Свои исследования в данной области мы начали в 2016 г. [1]. Тогда мы выявили, что практикующие учителя имеют сложности при работе с детьми мигрантов (языковой барьер, социальные проблемы). Позднее это подтвердилось при анкетировании иностранных студентов [2]. Для обучения детей мигрантов естественнонаучным предметам мы предлагаем шире использовать метод проектов, адаптированные практические работы, интеллект-карты (подробнее в [3]). В результате применения вышеперечисленного будет происходить повышение мотивации к обучению, упрощение теоретического материала, лучшее его структурирование и, как следствие, усвоение. Выявленные организационно-методические особенности работы с детьми мигрантов при обучении в школе естественнонаучным предметам реализованы и в дальнейшем будут дополняться.

### Список литературы

1. *Космодемьянская С.С.* Подготовка студентов к обучению химии детей-мигрантов через экологические проекты в соответствии с требованиями ФГОС / С.С. Космодемьянская, Д.Л. Дарземанова // Сборник научных трудов 64-й Всероссийской научно-практической конференции химиков с международным участием (Санкт-Петербург, 13–15 апреля 2017 г.). – СПб.: Издательство Российского государственного педагогического университета имени А.И. Герцена, 2017. – С. 401–404.
2. *Дарземанова Д.Л.* Преподавание химии иностранным студентам: особенности и перспективы / Д.Л. Дарземанова, С.С. Космодемьянская // Инновационные технологии в образовании: сборник научных трудов V Международной научно-образовательной конференции (Казань, 30–31 марта 2018 г.). – Казань: Школа, 2018. – Ч. I. – С. 100–102.
3. *Гильманшина С.И.* Технология адаптации практических работ по химии для обучения детей мигрантов в русскоязычной среде / С.И. Гильманшина, Д.Л. Дарземанова, И.И. Агзамова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 11. – С. 127–132.

## ДИДАКТИЧЕСКАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ ПРОЦЕССА ОБУЧЕНИЯ С ПОЗИЦИЙ КОГНИТИВНОЙ ДИДАКТИКИ

**Алсу Рауфовна Камалеева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: Kamaleyeva\_Kazan@mai.ru*

**Ключевые слова:** когнитивная дидактика, информация, знание, умение, навыки, компетенции, профессиональная квалификация.

Дидактика как раздел современной российской педагогики занимается изучением проблем обучения в целом. Когнитивная педагогика при этом большое внимание уделяет механизмам формирования и развития познавательных структур и инструментария познания человека [1].

Рассмотрим поэтапно организацию учебно-познавательного процесса, начиная с предоставления информации обучающимся и заканчивая присвоением профессиональной квалификации выпускникам вузов. Умение (У) – способность личности к эффективному выполнению определенной деятельности на основе имеющихся знаний в новых условиях; навык (Н) – способность выполнять какие-либо действия автоматически, без поэлементного контроля, т. е. его можно трактовать как автоматизированное умение. Формирование обобщенных умений и навыков (ОУН) – дидактическая основа формирования самообразовательных умений и навыков (СУН) у обучающихся. Компетенции (К) определены нами как способность человека мобилизовать в ходе послевузовской деятельности приобретенные в вузе интегрированные естественнонаучные знания, умения, навыки и использовать обобщенные способы выполнения действий. Профессиональная квалификация (Пр. кв.) определяется как степень годности к какому-нибудь виду труда, уровень подготовленности [2].

### Список литературы

1. Камалеева А.Р. Алгоритм поэтапного когнитивного моделирования в естественнонаучной и гуманитарной составляющих профессионального образования / А.Р. Камалеева, Л.Ю. Мухаметзянова // Вестник Чувашского государственного педагогического университета имени И.Я. Яковлева. – 2019. – № 1 (101). – С. 129–136.
2. Толковый словарь Ожегова. – URL: <https://gufo.me/dict/ozhegov/квалификация> (дата обращения: 14.10.2021).

**АДАПТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
ПОДГОТОВКИ СОВРЕМЕННОГО УЧИТЕЛЯ ХИМИИ  
В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВИЗАЦИИ**

**Светлана Сергеевна Космодемьянская, Ильнар Дамирович Низамов,  
Юлия Игоревна Журавлева**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail:<sup>1</sup> svetlanakos@mail.ru, nizam-ilnar@yandex.ru, yulialab6@mail.ru*

**Ключевые слова:** адаптивные образовательные технологии, подготовка учителей, студент, методика обучения химии, неорганическая химия.

Наше исследование имеет более чем десятилетнюю историю практического поиска и определения наиболее эффективных вариантов адаптивных технологий подготовки специалистов. В данной работе рассматриваются основы адаптивных систем обучения (А.С. Границкая) и адаптивных педагогических систем вуза (С.В. Дроздов, В.Д. Шадриков). Данное исследование посвящено анализу организации профессиональной подготовки высококвалифицированных специалистов – учителей химии – по направлению 44.03.01 «Педагогическое образование» (профиль «Химия») в одном из ведущих вузов страны с применением адаптивных технологий [1, 2]. В своих статьях [3] авторы рассматривают методические особенности применения вариативных элементов адаптивных технологий для организации учебных и внеучебных занятий при изучении химико-методических дисциплин с применением цифровых образовательных ресурсов.

**Список литературы**

1. *Волянская Т.А.* Вопросы адаптивности в системах дистанционного обучения / Т.А. Волянская // Электронный журнал “System Informatics” («Системная информатика»). – 2020. – № 16. – URL: <https://www.system-informatics.ru/files/article/volyanskaya.pdf/> (дата обращения: 01.01.2022).
2. Адаптивное обучение: дайджест № 3 (март 2021 г.) // Официальный сайт Института передовых образовательных технологий КФУ. – URL: <https://kfu-open.kpfu.ru/> (дата обращения: 01.01.2022).
3. *Космодемьянская С.С.* Применение адаптивных цифровых технологий в преподавании химии / С.С. Космодемьянская, И.Д. Низамов, Д.И. Муринова и др. // Бизнес. Образование. Право. – 2022. – № 3 (60). – С. 360–365.

## ЦИФРОВЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПЛАТФОРМЫ КАК СРЕДСТВА ФОРМИРОВАНИЯ АКАДЕМИЧЕСКОЙ УСПЕШНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ

**Екатерина Олеговна Массарова, Сурия Ирековна Гильманшина**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: massarova\_e@mail.ru, gilmanshina@yandex.ru*

**Ключевые слова:** цифровые образовательные платформы, академическая успешность, платформа LMS Moodle.

Широкое использование цифровых образовательных платформ поставило перед нами задачу дать возможность современным формам обучения адаптироваться к новым реалиям и существующим возможностям [1]. Поэтому для обучающихся 7 классов мы разработали курс «Введение в химию», который включает в себя цифровой образовательный ресурс на платформе LMS Moodle. Для того чтобы разработанный курс способствовал формированию академической успешности обучающихся, на платформе предусмотрены: уровневая система сложности заданий, междисциплинарность, постоянная обратная связь с учеником по его достижениям и др. Важно, что успехи или трудности обучающегося в том или ином предмете вовремя улавливаются учителями [2]. Разработанный курс позволяет сделать вывод о необходимости применения цифровых обучающих платформ в обучении школьников: во-первых, для формирования у них академической успешности, во-вторых, для развития самостоятельности и самокоррекции в процессе обучения. При этом необходимость применения в общем образовании цифровых обучающих платформ может резко возрасти в период пандемийных ограничительных мер.

### Список литературы

1. *Гильманшина С.И.* Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // *Современные проблемы науки и образования.* – 2022. – № 1.
2. *Гильманшина С.И.* Педагогические условия формирования академической успешности обучающихся средствами цифровых образовательных платформ / С.И. Гильманшина, Е.О. Массарова // *Казанский педагогический журнал.* – 2022. – № 2 (151). – С. 155–162.

## РАЗВИТИЕ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В СТРАНАХ СРЕДНЕЙ И ЮГО-ВОСТОЧНОЙ АЗИИ В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВИЗАЦИИ

**Гульнар Фаритовна Мельникова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan Federal University*

*E-mail: ms.valitova1989@mail.ru*

**Ключевые слова:** цифровизация, химическое образование, цифровая трансформация, модернизация образования.

На сегодняшний день трансформация образования рассматривается как неизбежный процесс изменения содержания, организационных форм учебной работы, методов в развивающейся цифровой образовательной среде, который направлен на решение задач социально-экономического развития страны в условиях Четвертой промышленной революции и становления цифровой экономики. В Российской Федерации эти вопросы отражены в Указе Президента России от 7 мая 2018 г. № 204 «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года».

Целью работы являлось выявление основной специфики высшего химического образования, его форм и составных элементов в выбранных нами странах. Для исследования были выбраны Узбекистан, Китай и Сингапур. В каждой из этих стран активно идет модернизация системы образования, реализующаяся в том числе по программам цифровой экономики. Например, Указ Президента Узбекистана от 5 октября 2020 г. «Об утверждении Стратегии «Цифровой Узбекистан-2030» и мерах по ее эффективной реализации» [2], в странах Юго-Восточной Азии – модернизация образования к 2035 г. [1], одной из задач которой является ускорение реформы образования в информационную эпоху и т. д.

### Список литературы

1. Глузман А.В. Университетское образование в Китайской народной республике: опыт системного анализа / А.В. Глузман, А.А. Глузман // Гуманитарные науки. – 2019. – № 4 (48). – С. 10–21.

2. Хисматова Х.Ф. Путь усовершенствования химического образования в современных вузах Узбекистана / Х.Ф. Хисматова // Образование как фактор развития интеллектуально-нравственного потенциала личности и современного общества: материалы VIII Международной научной конференции (Санкт-Петербург, 8–9 ноября 2018 г.). – СПб.: Издательство Ленинградского государственного университета имени А.С. Пушкина, 2018. – С. 107–111.

## ФОРМИРОВАНИЕ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ У СТУДЕНТОВ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ОБУЧЕНИЯ ДИДАКТИКЕ ХИМИИ

**Виктория Андреевна Миннахметова, Сурия Ирековна Гильманшина**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: vika.vikto96@mail.ru*

**Ключевые слова:** подготовка будущих учителей химии, общепрофессиональные компетенции, дидактика химии, цифровизация образования.

В данной работе рассмотрена роль современных цифровых технологий в формировании общепрофессиональных компетенций у будущих учителей химии. Анализ научной литературы позволил сделать вывод о том, что дефиниция понятия «цифровые технологии» вариативна и подразумевает под собой комплект цифровых инструментов, способствующих формированию необходимых знаний, умений, навыков и компетенций, под которыми понимаются: дистанционные формы обучения, визуальные средства обучения (цифровые и виртуальные химические лаборатории), цифровой контент. Рассмотренные варианты применения цифрового контента в системе подготовки будущих учителей химии на примере дисциплины «Дидактика химии» позволили создать серию самостоятельного цифрового контента экологической направленности, включающего в себя такие опыты, как: «Влияние кислотных дождей на популяцию птиц», «Биоиндикаторы», «Определение глутаматов в пищевых продуктах». Каждый цифровой контент, как детально расписано в [1] и [2], включает в себя отбор содержания, оптимизацию методик выполнения опытов, непосредственно съемку и монтаж цифровых методических видеоматериалов [1]. Это, несомненно, помогает формировать общепрофессиональные компетенции у будущих учителей химии.

### Список литературы

1. Гильманшина С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. – С. 151–155.
2. Гильманшина С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1.

## ВИРТУАЛЬНЫЙ ШКОЛЬНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ ЭКСПЕРИМЕНТ КАК ПЕДАГОГИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИНТЕНСИВНОГО ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ

**Римма Надыровна Сагитова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: rns19@mail.ru*

**Ключевые слова:** лабораторный эксперимент, виртуальный эксперимент, моделирование химических явлений.

В виртуальном школьном химическом эксперименте широкое распространение получили видеозаписи натуральных опытов, которые способствуют формированию адекватного (истинного) представления о свойствах веществ, их реакционной способности. Особенно востребованными являются видеозаписи химических реакций с участием органических соединений и др. [1], [2], которые в силу сложности их воспроизведения или с точки зрения техники безопасности невозможно проводить в школьном кабинете химии. Виртуальный химический эксперимент, реализуемый в форме компьютерной имитации школьной учебной лаборатории, в настоящее время представлен в виде виртуальных лабораторий и лабораторий виртуальной реальности. В данных лабораториях реализуется педагогический сценарий с активным и интерактивным участием обучающихся. Компьютерная имитация способствует быстрому и прочному усвоению алгоритма и порядка действий при осуществлении химических опытов. Компьютерная имитация химического эксперимента может рассматриваться как подготовка к проведению реального эксперимента. Она положительно зарекомендовала себя при дистанционном обучении школьников.

### Список литературы

1. *Гильманшина С.И.* Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // *Современные наукоемкие технологии.* – 2022. – № 4. – С. 151–155.
2. *Гильманшина С.И.* Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // *Современные проблемы науки и образования.* – 2022. – № 1.

## ИННОВАЦИОННАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ УЧИТЕЛЯ КАК РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ С ОДАРЕННЫМИ УЧАЩИМИСЯ

**Фидалия Дамировна Халикова**

*Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

*Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*E-mail: fidaliya.halikova@mail.ru*

**Ключевые слова:** инновация, деятельность, учитель, одаренный учащийся, взаимодействие, сотворчество, результат.

Понятие «инновативность» определяется как эмоционально-оценочное отношение к новшествам, приводящим к инновационной компетентности, обеспечивающей высокую взаимозависимую результативность при работе с одаренными обучающимися.

Нами было проведено исследование учителей предметов естественнонаучного цикла, которые проходили курс «Психолого-педагогические технологии для работы с одаренными обучающимися» в целях обнаружения готовности учителей к инновационной образовательной деятельности. Участвовавшие в анкетировании учителя ответили на вопросы анкеты, состоящей из трех блоков готовности: творческого, технологического и рефлексивного компонентов. По набранным баллам был диагностирован и определен уровень готовности каждого учителя к инновационной образовательной деятельности.

Нами были указаны экстенсивные и интенсивные виды инноваций, применяемых учителями при организации работы с одаренными учащимися. Значимыми являются интенсивные инновации, подразумевающие развитие инновативности у учителей за счет собственных внутренних ресурсов, которые в результате приводят к совершенствованию компетенций учителей в организации работы с одаренными обучающимися. Именно непрерывная работа с успешными учителями в системе обучения одаренной молодежи приведет к ожидаемым результатам [1].

### Список литературы

1. Халикова Ф.Д. Непрерывная работа с успешными учителями в системе обучения одаренной молодежи / Ф.Д. Халикова, С.И. Гильманшина // Профессиональное образование в России и за рубежом. – 2020. – № 3 (39). – С. 430–436.

*Электронное научное издание  
сетевого распространения*

**ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА  
ИНСТИТУТА ФИЗИКИ  
И ХИМИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМЕНИ А.М. БУТЛЕРОВА  
КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**Казань, 23 января – 3 февраля 2023 г.**

**Сборник избранных тезисов**

Корректор  
***Р.Р. Аубакиров***

Компьютерная верстка  
***А.И. Галиуллиной***

Подписано к использованию 18.03.2023.  
Гарнитура «Times New Roman».  
Заказ 74/3.

Издательство Казанского университета

420008, г. Казань, ул. Профессора Нужина, 1/37  
тел. (843) 206-52-14 (1704), 206-52-14 (1705)