

**Правительство  
Республики Татарстан**



**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**



# **СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

**II МЕЖДУНАРОДНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ  
СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ  
И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**

## **«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»**



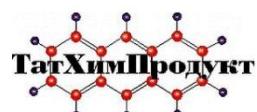
**SCIENCE  
OF THE FUTURE**



**НАУКА  
БУДУЩЕГО  
НАУКА  
МОЛОДЫХ**

**OPTEC**  
Connecting solutions

**BIO-RAD**



**sartorius**

**Казань, 20-23 сентября 2016 года**

**Правительство  
Республики Татарстан**



**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**



## **СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

**II МЕЖДУНАРОДНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ  
СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ  
И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**

## **«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»**



Сборник Тезисов II Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: КФУ, 2016. – 1 USB-flash-накопитель. – Систем. требования: ПК с процессором с тактовой частотой не менее 1 ГГц; Windows XP; USB 2.0; Adobe Acrobat Reader.

**Казань, 20-23 сентября 2016 года**

**Организатор**

Казанский (Приволжский) федеральный университет

**Организационный комитет**

***Председатель:***

Нургалиев Д.К. (проректор по научной деятельности КФУ)

***Сопредседатели:***

Галкин В.И. (директор Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ)

Киясов А.П. (директор Института фундаментальной медицины и биологии КФУ)

***Заместители председателя:***

Варфоломеев М.А.

Каюмов А.Р.

***Ученый секретарь:***

Челнокова И.А.

***Члены оргкомитета:***

Зиннатуллина З.Р.

Важнова Н.А.

Сулейманова А.Д.

Сидорова Е.Ю.

Голиков А.В.

Ескин А.А.

Хаертдинов Н.Н.

Яруллина Д.Р.

Тухбатова Р.И.

Сидоров В.В.

Вахин А.В.

Кольчугин А.Н.

Гедмина А.В.

Герасимов А.В.

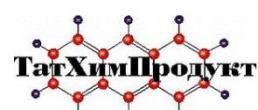
Сагиров Р.Н.

Салин А.В.

Титова А.А.

Курамшин А.И.

**Партнеры конференции**



**sartorius**

## **СОДЕРЖАНИЕ**

<b>СЕКЦИЯ 1 БИОМЕДИЦИНА И ФАРМАЦЕВТИКА .....</b>	<b>5</b>
<b>СЕКЦИЯ 2 НЕФТЕРАЗРАБОТКА, НЕФТЕПЕРЕРАБОТКА, НЕФТЕХИМИЯ .....</b>	<b>100</b>
<b>СЕКЦИЯ 3 ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ .....</b>	<b>159</b>

# **СЕКЦИЯ 1 БИОМЕДИЦИНА И ФАРМАЦЕВТИКА**

## ПОИСК И КЛОНИРОВАНИЕ ГЕНОВ БАКТЕРИАЛЬНЫХ ФИТАЗ

Агабекян И.А.

*Институт фундаментальной медицины и биологии К(П)ФУ, Казань, Россия*

*piseq929@mail.ru*

Фосфор является одним из основных минеральных элементов в питании прокариот и эукариот. Однако большая часть почвенного фосфора представлена недоступной для питания высших эукариот формой – фитатами. Переводить фитаты в доступное состояние путем высвобождения фосфатов способны бактерии, гидролизующие данные соединения до легко усваиваемых остатков фосфорной кислоты и мио-инозитола с помощью специфических ферментов фитаз. Однако в настоящее время не известны универсальные фитазы, эффективные для применения в сельском хозяйстве из-за различия условий пищеварительного тракта разных видов животных, а также условий почв. Поиск и исследование свойств новых бактериальных фитаз позволит оптимизировать их использование в сельском хозяйстве в качестве кормовых добавок и удобрений.

Цель работы – поиск новых бактериальных продуцентов фитаз и клонирование их генов для высокой экспрессии. В ходе работы проводили селекцию фитат-гидролизующих штаммов микроорганизмов на среде, содержащей фитат в качестве единственного источника фосфора. Штаммы были выделены из почв Татарстана и являются представителями классов кислых и щелочных фитаз. Из 10 штаммов, наибольшую способность к гидролизу фитата в среде показали штаммы *Pantoea* sp. 3.5.1, *Bacillus subtilis* GM4, *Bacillus ginsengihumi*. Для клонирования в экспрессионную систему была выбрана грам-отрицательная бактерия *Pantoea* sp. 3.5.1., содержащая активный фермент, гидролизующий фитат натрия. Для клонирования использовали векторную молекулу pET28a и клетки *E.coli* DH5 $\alpha$  и *E.coli* BL21 pLysS для эффективного клонирования и экспрессии белка. Экспрессия гена фитазы в рекомбинантном штамме подтверждена с помощью электрофореза в ПААГ в денатурирующих условиях и иммуноблотинга.

Таким образом, в ходе работы были отобраны грам-отрицательные и грам-положительные штаммы, экспрессирующие активные фитазы, также проведено клонирование кислой гистидиновой фитазы *Pantoea* sp. 3.5.1 в экспрессионный вектор. На основе фитаз отобранных штаммов в дальнейшем будут созданы эффективные системы экспрессии на основе различных прокариотических и эукариотических продуцентов, а также исследованы их свойства и активность при различных условиях среды.

*Работа выполнена в рамках Грантов: РФФИ 16-08-00583A, РФФИ 16-34-60191*

## **ВЛИЯНИЕ МОДУЛЯТОРА МЕТАБОЛИЗМА TX-14 НА АКТИВНОСТЬ КОМПЛЕКСОВ ДЫХАТЕЛЬНОЙ ЦЕПИ МИТОХОНДРИЙ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК MCF-7**

Алекбаева Г.Д., Иксанова А.Г., Пугачев М.В., Штырлин Ю.Г.

*ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Научно-образовательный центр фармацевтики, Казань, Россия*

*gulnaz.alekbaewa@yandex.ru*

Альтернативой соматической мутационной теории возникновения рака на современном этапе является гипотеза о возникновении заболевания ввиду нарушения митохондриального метаболизма. Основная гипотеза метаболического перепрограммирования опухолевых клеток заключается в постепенном возврате от аэробного гликолиза к окислительному фосфорилированию.

В настоящем исследовании проведена оценка биологических эффектов модулятора метаболизма TX-14 на митохондрии клеток рака молочной железы человека. В результате исследований было установлено, что TX-14 достоверно увеличивает количество митохондрий в опухолевых клетках MCF-7. Было выявлено, что TX-14 на 49 сутки инкубации достоверно снижает внутриклеточный уровень АФК на 25% и увеличивает митохондриальный потенциал в клетках MCF-7 на 170%. Показано, что TX-14 ингибирует I комплекс дыхательной цепи с 21 дня инкубации на 67%, активирует II и IV комплексы дыхательной цепи с 7 и 21 дня инкубации в 2 и в 100 раз соответственно, при этом не вызывая достоверных изменений в активности III комплекса дыхательной цепи. Таким образом, TX-14 способен вызывать последовательные и устойчивые изменения в опухолевых клетках MCF-7 и представляет интерес при разработке модуляторов метаболизма опухолевых клеток.

## ВЛИЯНИЕ МЕТАБОЛИТОВ ЭНТЕРОКОККОВ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КАНДИД С БУККАЛЬНЫМИ ЭПИТЕЛИОЦИТАМИ

Александрова Н.А., Заславская М.И.

*Нижегородская государственная медицинская академия, Нижний Новгород, Россия*

[natalyuskova@rambler.ru](mailto:natalyuskova@rambler.ru)

Представители нормальной микрофлоры способны оказывать влияние на взаимодействие кандид с эпителиоцитами слизистых оболочек. В нашей работе мы исследовали способность метаболитов энтерококков влиять на адгезию разных видов грибов рода *Candida* к буккальным (щечным) эпителиоцитам *in vitro*.

В работе использовали супернатант бульонной культуры пробиотического («Ламиналакт») штамма *Enterococcus faecium* L-3. Чистые культуры *Candida albicans* штамм 601, *Candida glabrata* штамм 44<sub>1</sub> и *Candida krusei* 583 (из коллекции микроорганизмов кафедры микробиологии и иммунологии НижГМА) выращивали в дрожжевой фазе на агаре Сабуро (24ч, 37°C), затем клетки микромицетов отмывали в забуференном физиологическом растворе (ЗФР; pH 7,2-7,4) и доводили до концентрации 10<sup>7</sup> кл/мл. Кандиды инкубировали с супернатантами бульонных культур энтерококков (30 мин, 37°) и трижды отмывали в ЗФР. В контроле использовали стерильный триптон-соевый бульон (ТСБ). Буккальные эпителиоциты получали от здоровых доноров, готовили взвесь с концентрацией 10<sup>6</sup> кл/мл в ЗФР. Равные объемы суспензий эпителиальных клеток и кандид инкубировали 30 минут при 37°C. Эпителиоциты отмывали от неприкрепившихся кандид путем центрифугирования (40g, 5 мин), из осадка готовили мазок, который после фиксации метанолом окрашивали 0,25% раствором азура А. Определяли среднее количество прикрепившихся кандид в пересчете на один эпителиоцит (учитывали 100 эпителиальных клеток).

В экспериментах был выявлен выраженный антиадгезивный эффект метаболитов энтерококков в отношении грибов рода *Candida*. Так, способность к адгезии на эпителиальных клетках достоверно снижалась у *C. glabrata*, *C. krusei* и *C. tropicalis* под действием метаболитов *E. faecium* L3 в 1,77±0,29, 1,63±0,22 и 1,25±0,09 раз соответственно ( $p<0,05$ ).

## МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА В Г. КАЗАНЬ

Алжирова И.В.

*Институт экологии и природопользования КФУ, Казань, Россия*

*irina\_alzhirova@mail.ru*

В работе поставлена цель по выявлению зависимости фонового загрязнения атмосферного воздуха в Казани от метеорологических условий.

В качестве показателя загрязнения атмосферы выбран параметр  $P$  – интегральный показатель загрязнения атмосферного воздуха [1,2].

Исходными данными для выполнения данного исследования послужили ежедневные данные показателя загрязнения воздуха ( $P$ ) и метеорологических условий (данные метеорологической станции «Казань-Опорная») за период с 2011 по 2015 гг.

Проанализировано 2937 случаев с различным уровнем загрязнения атмосферы. Установлено, что в рассматриваемый период преобладает пониженный уровень загрязнения атмосферы, высокий уровень загрязнения ( $P>0,23$ ) наблюдается в 10-13% случаев.

В Казани в летний период года не удалось выявить направления ветра, при котором наблюдается повышенное значение параметра  $P$ , в зимний период высокий уровень загрязнения наблюдается при ветрах южной четверти. В период 2011-2015 гг. в г. Казань наблюдалось 603 дня с условиями застоя воздуха. Выявлено, что число случаев повышенного уровня загрязнения в этих условиях одинаково как в холодный, так в теплый периоды года. Установлено, что отсутствие интенсивных осадков способствует накоплению примесей в атмосфере, в особенности в летнее полугодие.

1. Руководство по прогнозу загрязнения воздуха. РД 52.04.306-92/ Спб.: Гидрометеоиздат, 1993, 104 с.
2. Сонькин Л.Р. Синоптико-статистический анализ и краткосрочный прогноз загрязнения атмосферы/ Л.: Гидрометеоиздат, 1991, 206 с.

## АНАЛИЗ МОБИЛЬНОСТИ ГЕНОВ АНТИБИОТИКОРЕЗИСТЕНТНОСТИ У ЛАКТОБАЦИЛЛ

Анисимова Е.А., Бруслик Н.Л., Ахатова Д.Р., Исмагилова Р.К., Яруллина Д.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Казань

*elizaveta-real@mail.ru*

Важным критерием при отборе пробиотических штаммов является наличие у них устойчивости к антибиотикам. Тем не менее, существует риск распространения генов антибиотикорезистентности (AP) в микробиоме человека с помощью конъюгативных плазмид и транспозонов, что противоречит требованиям лекарственной безопасности пробиотиков. Целью данной работы является выявление и характеристика генетических детерминант AP у потенциально пробиотических штаммов лактобацилл.

Из кисломолочных продуктов, пробиотиков и фекалий человека нами было выделено 34 штамма лактобацилл. Диско-диффузионным методом оценена устойчивость исследуемых микроорганизмов к клинически распространенным антбактериальным препаратам девяти различных классов. У лактобацилл обнаружена высокая устойчивость к ципрофлоксации, ванкомицину и аминогликозидным антибиотикам. Гены устойчивости к эритромицину (*Erm*) и тетрациклину (*Tet*) особенно подвержены горизонтальному транспорту, поэтому у одного *Erm*-резистентного штамма и пяти *Tet*-резистентных штаммов гены, кодирующие устойчивость к данным антбактериальным препаратам, были амплифицированы методом ПЦР и просеквенированы. В геномной ДНК лактобацилл обнаружены гены *ermB* и *ermA* и ряд генов (*tetM*, *tetK*, *ermA*, *ermC*, *mefA*) - в плазмидной ДНК. Однако, у ряда штаммов, не проявляющих устойчивость к *Erm*, выявлены молчание гены *ermA*, *ermC* и *mefA*.

В работе также исследована возможность передачи генов AP от лактобацилл к условно-патогенным микроорганизмам. Установлено, что бактерии *Citrobacter freundii* способны приобретать ген устойчивости к Tet после электропорации плазмидной ДНК *L. fermentum* 5-1. С помощью метода «спаивания на мембране» было обнаружено приобретение устойчивости к Tet у бактерий *Acinetobacter baumannii* от *L. fermentum* HF-B1. Таким образом, мы показали, что данные штаммы лактобацилл обладают потенциально мобильными генами AP, поэтому не могут использоваться в пробиотических препаратах.

## МИКРОБНОЕ СООБЩЕСТВО ТОЛСТОГО КИШЕЧНИКА ЧЕЛОВЕКА ПРИ КОЛОСТАЗЕ

Арзамасцева А.А., Волкова А.С., Газизуллина Л.В., Зиганшина Э.Э., Григорьева Т.В., Елеев А.А., Карпухин О.Ю., Яруллина Д.Р.

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

*arzamasceva.nast@mail.ru*

Кишечная микрофлора, по результатам международных проектов НМР и MetaHIT, насчитывает более 35 000 видов. Снижение активности моторной функции кишечника, проявляющееся колостазом, оказывает существенное влияние на состав и топологию кишечной микрофлоры. Тем не менее, сведения о количественном и качественном составе кишечной микрофлоры при колостазе немногочисленны и необъективны, так как получены на фекальных образцах от страдающих стойким нарушением функции опорожнения толстого кишечника. Цель данной работы - выяснить состав микробного сообщества биоптатов толстой кишки пациентов с хроническим колостазом микробиологическими методами и методами метагеномики.

В данной работе биоптаты толстой кишки были получены от четырех пациентов с хроническим колостазом и исследованы в соответствии с разрешением Локального этического комитета ГБОУ ВПО КГМУ МЗ РТ (протокол №9 от 24.11.2015). Методами классической микробиологии с помощью сред специального назначения исследована общая обсемененность образцов аэробными и факультативно анаэробными бактериями, а также бифидобактериями, энтеробактериями, в том числе сальмонеллами и шигеллами, молочнокислыми бактериями (МКБ), в том числе лактобациллами. Установлено, что микробный пейзаж образцов биоптатов, полученных от разных пациентов, существенно отличается, что соответствует современным представлениям об индивидуальных различиях в микрофлоре индивидуумов как в норме, так и при патологиях. Тем не менее, все образцы характеризовались высоким содержанием бактерий группы МКБ: от  $10^4$  до  $10^{15}$  КОЕ/г. Ни в одном из исследованных образцов не обнаружены энтеробактерии и, в частности, представители родов *Salmonella* и *Shigella*. Методом секвенирования гена 16S рРНК показано, что в биоптате толстой кишки преобладают филы *Firmicutes* (52%) и *Bacteroidetes* (43%). Подтверждено низкое содержание энтеробактерий: представители филы *Proteobacteria* составили 4%, в том числе семейство *Enterobacteriaceae* - 1%. Количество МКБ, определенное культуральным методом и методом секвенирования, существенно отличалось. Таким образом, данное исследование расширяет наши представления о составе микрофлоры толстого кишечника человека при колостазе, а также доказывает необходимость параллельного использования традиционных культуральных методов и современных технологий ДНК-диагностики бактерий для объективной оценки состава микробного сообщества.

## НЕБЛАГОПРИЯТНЫЕ КЛИМАТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ И ИХ ПОСЛЕДСТВИЯ ДЛЯ ЗДОРОВЬЯ ЧЕЛОВЕКА НА ПРИМЕРЕ ПРИВОЛЖСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА

Аухадеев Т.Р.

*Институт экологии и природопользования КФУ, Казань, Россия*

*TRAuhadeev@kpfu.ru*

В последние годы изменения климата рассматриваются как один из ведущих факторов, оказывающих влияние на здоровье населения.

В рамках исследования рассчитывался один из наиболее информативных биометеорологических индексов – индекс патогенности. Для чего в качестве исходных данных использовались ряды метеорологических измерений с суточным разрешением на 19 станциях Приволжского федерального округа (ПФО) за 1966-2010гг. Анализировалось как пространственно-временное распределение суммарного индекса патогенности, так и его частных составляющие на территории ПФО.

Авторами также проводился анализ медицинских показателей за 8 лет (2008-2015гг.) по территории Татарстана, который показал, что в период экстремальной жары лета 2010г. (июль-август) произошло резкое увеличение числа случаев смертности на 2528 дополнительно по сравнению с июлем-августом 2009г.

На основе проведенного исследования были сформулированы следующие выводы:

- 1) Из-за усиления летней жары 2010 г. произошло резкое увеличение числа случаев смертности (примерно на 53%) на территории Татарстана;
- 2) В течение года по территории ПФО суммарный индекс патогенности изменяется от значений 35,5-50,3 (январь) до 5,7-14,3 (июль), Наиболесуровые климатические условия формируется на северо-востоке.

3) Наибольший вклад в суммарный индекс вносят составляющие зависящие от отклонения температуры воздуха от оптимальной, межсуточного перепада температуры, влажности и облачности.

4) Комфортные условия погоды в среднем по округу преобладают в период май-август (более 50% случаев), раздражающие в октябре, марте-апреле и острые в ноябре-феврале.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (грант №15-05-06349).*

## IN VITRO ТЕСТ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

Ахмадишина Р.А., Садриева Г.Р., Сабирзянова Л.Р., Кузнецова Е.В., Абдуллин Т.И.

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

*kyrchak@mail.ru*

Разработка и применение информативных методов анализа антиоксидантных свойств соединений является актуальной задачей биохимии, фармакологии и медицины. Антиоксидантная активность проявляется как способность соединений связывать или препятствовать образованию активных форм кислорода (АФК), прежде всего, свободных радикалов. Среди предложенных методов оценки антирадикальной активности наиболее популярным в настоящее время является DPPH-тест, основанный на спектрофотометрическом детектировании стабильного радикала 2,2-дифенил-1-пикрилгидразила (DPPH) ( $\lambda_{\text{макс}}=517 \text{ нм}$ ).

Нами разработана методика оценки антиоксидантных свойств, основанная на реакции Фентона. Генерируемый в реакции Фентона гидроксил-радикал детектировали с использованием флуоресцентного индикатора дихлорофлуоресцеина диацетата (ДХФ-ДА) на микропланшетном анализаторе ( $\lambda_{\text{ex}}=488$ ,  $\lambda_{\text{em}}=535 \text{ нм}$ ). Установлено, что среди бивалентных металлов, участвующих в реакции Фентона, наиболее стабильный и выраженный флуоресцентный сигнал производят ионы кобальта. Оптимизированы условия образования гидроксил-радикала в реакции кобальта (II) с пероксидом водорода в различных условиях.

Для количественной оценки антиоксидантной активности соединений с помощью разработанного теста предложено определять полумаксимальные эффективные (ингибирующие) концентрации ( $EC_{50}$ ) в стандартных условиях. Проведено сравнительное исследование активности модельных антиоксидантов с помощью разработанного флуоресцентного теста и DPPH-тест. Выявлена корреляция между результатами обоих тестов, однако предложенных тест характеризуется большей чувствительностью и в большей степени соответствует физиологическим условиям образования АФК.

*Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета и при поддержке гранта РФФИ №15-33-20914.*

1. G. Litwinienko, K.U. Ingold, J.Org.Chem., 2003, **68**, 3433-3438.
2. Jakubowski *et al.*, Cell Biology International, 2000, **24**, 757-760.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРЕДСКАЗАННЫХ СТРУКТУР БЕЛКА SAHPF

Аюпов Р.Х., Акберова Н.И.

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

*aurusta@mail.ru*

Белок SaHPF (*Staphylococcus aureus* hibernation-promoting factor) является фактором инактивации рибосомы [1]. Предположительно белок взаимодействует с малой субъединицей рибосомы и вызывает ее димеризацию [2]. Структура белка не определена биофизическими методами (ЯМР, РСА). Для предсказания структуры белка использовались он-лайн программы (Robetta, QUARK, I-TASSER), качество которых оценивается системой CASP [3]. Предсказанные модели были оценены программой Qmean. Лучшая предсказанная модель белка была сравнена с гомологичными белками из PDB, которые были найдены с помощью алгоритма pdb-blast на сервере Blast. Структурное выравнивание моделей проводилась в программе Chimera 1.10. Для структурного выравнивания белок SaHPF был поделен на два домена, так как для каждого домена были характерны свои гомологи. На рисунке 1 показаны результаты структурного выравнивания SaHPF с гомологичными белками.

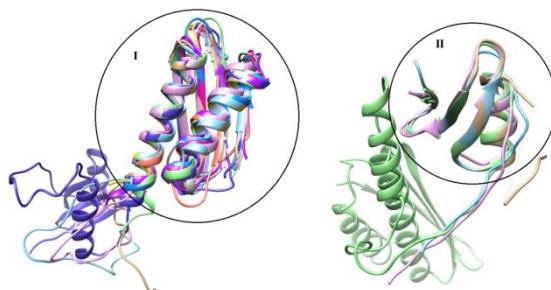


Рисунок 1 – Структурное выравнивание белка SaHPF с гомологичными белками: I – для первого домена, II – для второго домена.

Сравнение между пространственными структурами белков показали, что гомологичные структуры и для первого и для второго домена достаточно точно накладываются друг на друга, что косвенно свидетельствуют о высоком качестве предсказанной модели, которая может быть использована для экспериментального моделирования.

1. Y. Polikanov, G. Blaha, Th. Steitz. Science, 2012, **336** (6083), 915-918.
2. M. Ueta, Ch. Wada, A. Wada. Genes to Cells, 2010, **15** (1), 43-58.
3. CAPS. Site: <http://predictioncenter.org/>

## ИЗМЕРИТЕЛЬ КРИТИЧЕСКОЙ ЧАСТОТЫ СЛИЯНИЯ МЕРЦАНИЙ

Бирюкова К.С.

*Московский Авиационный институт (Национальный исследовательский университет)? Москва, Россия*

*k.s.biryukova@mail.ru*

Прибор для получения оперативной информации о здоровье, самочувствии и малейших изменениях пациента в процессе выполнения терапевтических процедур.

В последнее время в рефлексотерапии всё шире применяется метод измерения критической частоты слияния мерцаний – порога частоты, после которого глаз человека перестаёт воспринимать стробоскопический эффект. Этот порог индивидуален для каждого человека, но очень устойчив к внешним воздействиям. Изменение частотного порога происходит либо при очень сильном утомлении, либо при вредном воздействии на организм, в том числе лекарственных средств.

Актуальность заключается в новизне метода. А так же повышение интереса медиков к быстрой и точной диагностике, не требующей большого количества сложной аппаратуры.

Новизна в том, что я предлагаю отказаться от микропроцессорных устройств и передать их функции малогабаритному персональному компьютеру для получения, хранения и обработки информации.

Результатом работы станет система, готовая для испытаний и использования в клинических лабораториях и иных подразделениях, занимающихся биологическими исследованиями. В неё войдут:

- 1) прибор для измерения КЧСМ;
- 2) компьютер;
- 3) программа для обработки результатов;
- 4) база данных для хранения всей необходимой информации.

Решение предлагаемое мной, имеет следующие преимущества перед конкурентами: работа ведется со специалистами, которые непосредственно будут использовать систему, и будут выдавать требования для системы.

Аналоги, которые имеются в продаже обладают большими габаритами, не всегда поддерживают необходимые типы исследования, несут в себе множество неиспользуемых функций, которые напрямую влияют на стоимость оборудования.

Созданный прибор-стробоскоп на мультивибраторе повышенной стабильности с выдачей сигналов на светодиод, не нуждается в сложном программном обеспечении рабочего места - достаточно ноутбука.

Данный аппарат будет востребован во всех медицинских областях, особенно в рефлексотерапии. Этой работой интересуются так же для проверки состояния пилотов перед вылетом, спортсменов перед соревнованиями и т.п.

## АДАПТАЦИЯ ГЕНЕТИЧЕСКОГО КОДА СИНТЕТИЧЕСКИХ ГЕННО-ИНЖЕНЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ К ОСОБЕННОСТИЯМ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АППАРАТА ОРГАНИЗМА-ХОЗЯИНА

Богачев М.И.<sup>a</sup>, Маркелов О.А.<sup>a</sup>, Каюмов А.Р.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> С.-Петербургский государственный электротехнический университет, С.-Петербург,  
Россия

<sup>b</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*rogex@yandex.com*

С ростом длины генетической конструкции возрастает роль ее биофизических свойств, позволяющих принимать различные структурные конформации для успешной реализации основных функциональных свойств и участия в таких биологических процессах, как репликация, транскрипция или взаимодействие с регуляторными белками. Оптимизация кода генетических конструкций неразрывно связана с оптимизацией алгоритмов дополнения обратной трансляции протеомных данных с целью их адаптации к особенностям генетического аппарата организма-хозяина. Результаты наших исследований указывают на универсальный нетривиальный характер распределений интервалов между последовательными одноименными нуклеотидами [1]. Нами предложен вариант универсальной модели, воспроизводящей взаимное положение различных нуклеотидов и их комбинаций в последовательности ДНК, на основе суперстатистического подхода. Результаты тестирования алгоритма синтеза ДНК со случайным генетическим кодом и заданным набором свойств, воспроизводящих статистические свойства, определяющие взаимное положение различных (три)нуклеотидов, указывают на достаточно точное воспроизведение указанных свойств для различных модельных микроорганизмов. На основе разработанной модели предложен алгоритм дополнения заданного вырожденного генетического кода с учетом адаптации к условиям экспрессии и особенностям генетического аппарата организма-хозяина, а также конкретного положения встраиваемой конструкции в геноме.

1. Bogachev MI, Kayumov AR, Bunde A. Universal internucleotide statistics in full genomes: A footprint of DNA structure and packaging? *PLoS One*, 2014, **9**(12), e0112534. 2014.

## ВКЛАД УРЕАЗНОЙ АКТИВНОСТИ В УСТОЙЧИВОСТЬ ПРОБИОТИКОВ К ФАКТОРАМ ЖЕЛУДОЧНО-КИШЕЧНОГО ТРАКТА

Бруслик Н.Л., Шигапова Р.Р., Зеленихин П.В., Яруллина Д.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

*nbruslik@yandex.ru*

Пробиотики представляют собой живые микроорганизмы, которые при применении в адекватных количествах способны оказывать благоприятное воздействие на организм реципиента. Благодаря своим биологическим особенностям бактерии рода *Lactobacillus* находят широкое применение в пробиотикотерапии. Одним из основных требований, предъявляемых к пробиотическим штаммам, является их устойчивость к инактивирующему факторам желудочно-кишечного тракта (ЖКТ): соляной кислоте (HCl), протеолитическим ферментам, желчи. Известно, что уреазная активность, приводя к защелачиванию среды, способна обеспечивать выживание в условиях ЖКТ ряда микроорганизмов, в частности *Helicobacter pylori*, *Proteus mirabilis*, *Klebsiella pneumoniae*. Уреазная активность лактобацилл и ее значение для выживаемости пробиотиков в ЖКТ изучена мало. Целью данной работы является оценка вклада уреазной активности в устойчивость бактерий рода *Lactobacillus* к агрессивным факторам ЖКТ.

В работе определен уровень резистентности к симулированному желудочному соку (СЖС), раствору соляной кислоты (pH=2) и 2% раствору желчи 17 штаммов лактобацилл, выделенных нами из кисломолочных продуктов и пробиотических препаратов. Инкубация клеток лактобацилл в СЖС длилась 1 ч, в растворе HCl – 2 и 6 ч, в 2% растворе желчи – 6 ч. Количество жизнеспособных клеток измеряли методом проточной цитофлуориметрии после окрашивания йодидом пропидия (PI). Показано, что у половины исследуемых штаммов выживаемость при воздействии СЖС составила менее 50%. Наибольшая устойчивость к СЖС установлена для бактерий *L. fermentum* 5-3 (80% живых клеток) и *L. fermentum* 1-5 (83% живых клеток). При 2-часовой экспозиции клеток лактобацилл в растворе HCl выживаемость всех исследованных штаммов сохранялась высокой (89-100% живых клеток). Увеличение времени инкубации лактобацилл в растворе HCl до 6 ч приводило к значительному снижению числа жизнеспособных клеток (до 0.4 – 14% живых клеток). Следовательно, необходимо избегать долгого нахождения пробиотических бактерий в кислой среде желудка, то есть необходимо принимать пробиотики натощак или в сочетании с жидкими продуктами, обеспечивая таким образом их кратковременное нахождение в желудке. Анализ устойчивости лактобацилл к желчи показал, что наиболее устойчивыми являются штаммы *L. fermentum* Na (95% живых клеток), *L. plantarum* Ga (96% живых клеток), *L. fermentum* 1-2 (97% живых клеток).

Для определения уреазной активности лактобацилл использовали метод, основанный на изменении окраски реакционной смеси, содержащей в качестве индикаторного маркера краситель феноловый красный. У всех исследованных штаммов лактобацилл обнаружена уреазная активность, которая, тем не менее, не оказывала значительного влияния на устойчивость лактобацилл к воздействию СЖС, желчи и HCl. Таким образом, у лактобацилл резистентность к неблагоприятным факторам ЖКТ, по-видимому, обусловлена другими механизмами, например, системой декарбоксилазы глутамата, reparацией и удалением поврежденных макромолекул, адаптивными изменениями в составе и структуре клеточной стенки.

**ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ  $\beta$ -ГАЛАКТОЗИДАЗЫ  
ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БЕЗЛАКТОЗНОГО НАПИТКА НА ОСНОВЕ  
МОЛОЧНОЙ СЫВОРОТКИ**

*Букуру Л.К., Скворцов Е.В.*

*Кафедра биохимии и биотехнологии ИФМиБ,*

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

*blysechrista@yahoo.fr*

**Цель работы:** Получение газированного безлактозного напитка на основе гидролизованной молочной сыворотки.

**Материалы и методы:** В ходе работы проводили гидролиз молочной сыворотки с добавкой консерванта ферментом  $\beta$ -галактозидазы. Отбирали пробы. К пробам добавляли 80% ацетонитрил в соотношении 1:4. А затем методом высокоеффективной жидкостной хроматографии анализировали гидролизаты. В качестве элюента при проведении исследований использовали 75% чистого раствора ацетонитрила, 20 мкл объем инъекции анализируемого раствора и 0.3мл/мин скорость элюирования. Калибровку проводили, используя в качестве стандартов растворы лактозы, галактозы и глюкозы в смеси ацетонитрила и воды (80 : 20) приготовленные в концентрации 1 и 5 г/л.

**Результаты:** Используя калибровочный график, концентрация лактозы в негидролизованной молочной сыворотке для хроматографирования составляла 10.88 г/л. С расчетом разведения, содержание лактозы в исходной молочной сыворотке  $10.88 \text{ г/л} \times 5 = 54.4 \text{ г/л}$ . В гидролизованной молочной сыворотке с консервантом аскорбиновой кислоты концентрация лактозы составила 1.25г/л, а с лимонной кислотой концентрация лактозы составила 9.75г/л.

На основании данных хроматографических исследований определено, что эффективность гидролиза лактозы  $\beta$ -галактозидазой в гидролизованной молочной сыворотке с аскорбиновой кислотой составила 97.7 %, а с лимонной кислотой 82.07%.

1. Скворцов Е.В., Морозова Ю.А., Букуру Л.К., Алимова Ф.К., Канарская З.А. Эффективность применения  $\beta$  – галактозидазы для гидролиза лактозы молочной сыворотки. *Вестник Казанского технологического университета*, 2014, **17(13)**, 288-291.
2. Храмцов А.Г. Х-897 Феномен молочной сыворотки. СПб.: Профессия, 2011, 804 с.
3. Constanța S. Biotechnological valorisation of whey. *Innovative Romanian Food Biotechnology*, 2012, **10**, 1-8.

## ПРИМЕНЕНИЕ АЛЛОГЕННОГО ОСТЕОПЛАСТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА «ЛИОПЛАСТ» И АЛЛОГЕННЫХ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК В ВЕТЕРИНАРНОЙ ТРАВМАТОЛОГИИ

Булатова Н.Е.<sup>a</sup>, Закирова Е.Ю.<sup>b</sup>, Сергеев М.А<sup>a</sup>, Амиров Д.Р.<sup>a</sup>, Шагеева А.Р.<sup>a</sup>,  
Журавлева М.Н.<sup>b</sup>, Ризванов А.А.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Казанская государственная академия ветеринарной медицины, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский (Приволжский) государственный университет, Казань, Россия

*lenahamzina@yandex.ru*

В представленной работе в качестве имплантата и носителя для аллогенных мультипотентных мезенхимальных стволовых клеток (ММСК) при заполнении дефекта костной ткани трубчатой кости у кошек мы использовали аллогенный остеопластический материал «Лиопласт» (ООО «Лиоселл», Россия). Перед проведением оперативного вмешательства было получено информированное согласие всех владельцев кошек (n=4). Животные с диагнозом полный диафизарный перелом костей голени со смещением и дефектом костной ткани были поделены на 2 группы: 1 гр. фиксация отломков была выполнена при помощи интрамедуллярного металлокостеосинтеза спицами Киршнера. 2 гр. проведен чрезкостный металлокостеосинтез с проведением 4-5 спиц Киршнера и осуществлена внешняя фиксация их концов самотвердевающей пластмассой «Протакрил-М» (АТ «Стома», Россия). Между отломками кости в момент репозиции для замещения травматического дефекта костной ткани была помещена смесь 3 млн ММСК с крошкой материала «Лиопласт», склеивающий - компонент фибриновый клей Тиссукол. Кошки наблюдались 6 мес.

Выводы: интрамедуллярное проведение спицы Киршнера в костномозговой канал большеберцовой кости обеспечивает более надежную фиксацию отломков кости у кошек, по сравнению с чрезкостным остеосинтезом и внешней фиксацией спиц самотвердевающей пластмассой. Применение материала «Лиопласт» у кошек вызывает воспалительную реакцию с отторжением материала и образование свищей (в 50% случаев по нашим данным). Следовательно, дальнейшее его применение в ветеринарной практике для восстановления дефектов костной ткани у кошек требует дополнительных исследований.

# АНОМАЛЬНОСТЬ ПОЛЕЙ СРЕДНИХ МЕСЯЧНЫХ ТЕМПЕРАТУР ВОЗДУХА И ЕЕ МНОГОЛЕТНИЕ ТЕНДЕНЦИИ НА ТЕРРИТОРИИ ПРИВОЛЖСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА (ПФО)

Важнова Н.А.

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

*Nadezhda.Vazhnova@kpfu.ru*

В работе приведены значения аномальности полей температуры воздуха в ПФО в изучаемый период (1955 – 2009 гг.). Как показывают данные табл. 1, аномальность полей температуры воздуха в ПФО колеблется в широких пределах и подвержена, к тому же, ярко выраженным значительным межсезонным изменениям. Как видно, наибольшие значения аномальности свойственны осенне-зимнему времени, а наименьшие – летнему (июль) времени.

Таблица 1.– Средние многолетние ( $\bar{K}$ ) и экстремальные ( $\kappa_{max}$ ,  $\kappa_{min}$ ) значения показателей аномальности ( $\kappa$ ) полей температуры и средние многолетние значения показателей однородности ( $\rho$ ) полей АТВ

Месяцы	Показатели аномальности средних месячных и средних годовых (год) температур воздуха			$\bar{\rho}$
	$\bar{K}$ (год)	$\kappa_{max}$ (год)	$\kappa_{min}$ (год)	
Январь	1,00	7,21 (1969)	0,04 (1964)	0,11
Апрель	1,00	5,75 (1995)	0,05 (1969)	-0,17
Июль	1,00	3,56 (1988)	0,04 (1977)	-0,03
Октябрь	1,00	11,22 (1976)	0,05 (1958)	-0,04
Год	1,00	6,8 (1969)	0,03 (1973)	-0,08

Из приводимых данных о средних значениях показателя однородности ( $\rho$ ) полей следует, что в июле, октябре и в среднем за год площади полей с аномалиями температуры воздуха (АТВ) противоположных знаков почти уравновешивают друг друга. В январе (в средних выводах) на долю полей с положительными АТВ приходится около  $[(1+0,11)/2]100\% = 55\%$  территории округа. В апреле, напротив, некоторым территориальным «преимуществом» обладают поля с отрицательными АТВ, на долю которых в среднем приходится около 58% территории округа.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№15-05-06349).*

## ОЦЕНКА ГЕПАТОПРОТЕКТОРНЫХ СВОЙСТВ НОВОГО ПРОИЗВОДНОГО ПИРИМИДИНА

Выштакалюк А.Б., Зобов В.В., Варламова О.А.

*ФГБУН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра РАН, Казань, Россия;*  
*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

*oksvarlamova@mail.ru*

Одним из органов, наиболее подверженных негативному воздействию неблагоприятной экологической обстановки, является печень. В настоящее время наблюдается стремительное глобальное ухудшение состояния окружающей среды. Вместе с этим, неблагоприятная экологическая обстановка негативно сказывается на качестве продуктов питания и воды, которые в свою очередь оказывают отрицательное воздействие на печень, ровным счётом как и злоупотребление алкоголем, лекарственными препаратами и прочее.

Целью работы являлась оценка эффективности нового производного пирамидина – соединения №29Д (конъюгированной соли Ксимедона с аскорбиновой кислотой) в сравнении с Ксимедоном при токсическом поражении четыреххлористым углеродом.

Эксперименты были проведены на 9 нелинейных белых крысах массой 250-400 г. У животных моделировали острый токсический гепатит путем подкожного введения 50% масляного раствора четыреххлористого углерода ( $CCl_4$ ) в дозе 2 мл/кг. Введение тестируемых веществ проводили в виде растворов на дистиллированной воде внутрибрюшинно 1 раз в день в течение 12 дней в дозе 13 мг/кг (Ксимедон) и 11 мг/кг (29Д) соответственно. На 13-й день делали затравку введением гепатотоксина ( $CCl_4$ ). В течение последующих двух дней тестируемые соединения вводили при тех же условиях.

В результате было показано, что под влиянием соединения №29Д и Ксимедона патологические изменения значительно снизились. Структурно-морфологическая организация печеночных долек сохраняется, размеры клеток не увеличены, форма клеток соответствует нормальной форме гепатоцитов. Ядра сохраняются в большинстве клеток. Уменьшается количество некротизированных гепатоцитов и выраженность дистрофических изменений по сравнению с контрольной группой. Степень поражения органа менее выражена. Клетки лучше разделены, симметрия относительно кровеносных капилляров восстанавливается. Щелевидные пространства просматриваются лучше.

При исследовании динамики восстановления печеночной ткани, показано, что применение соединения №29Д и Ксимедона в течение 2 дней после токсического поражения печени приводят к восстановлению ее функции, ускоряются процессы регенерации печени и снижают патологические изменения. При исследовании биохимических показателей крови показано, что соединение №29Д и Ксимедон проявляет тенденцию к уменьшению степени поражения печени при токсическом воздействии, что может говорить о гепатопротекторном эффекте.

*Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 14-50-00014).*

## МОЛЕКУЛЯРНО-ГЕНЕТИЧЕСКАЯ ИНДИКАЦИЯ ЖИЗНЕСПОСОБНОСТИ БИОПАТОГЕНОВ В ПРИРОДНОЙ СРЕДЕ

Васильева А.В.

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

*anya4571@yandex.ru*

*Введение:* Борьба с инфекционными заболеваниями в большей степени зависит от организации и проведения эффективных мероприятий неспецифической профилактики, среди которых наиболее важны дезинфектологические методы, направленные на инактивацию биопатогенов в объектах окружающей среды. Молекулярно-генетические методы обладают высокой чувствительностью и специфичностью и требуют детального изучения возможности их применения и для оценки качества дезинфекции.

*Цель работы:* Оценить возможности применения молекулярно-генетических методов для контроля качества дезинфекции различных поверхностей.

*Материалы и методы:* Использовали бактериальные культуры микобактерий и кровь больного лейкозом крупного рогатого скота. Выделение нуклеиновых кислот проводили методами магнитной сорбции «МАГНО-сорб» и лизиса с последующей сорбцией ДНК на носителе «ПРОБА-ГС». Ставили ПЦР с электрофоретической детекцией продуктов амплификации в режиме реального времени.

*Результаты:* Оценку эффективности методов выделения нуклеиновых кислот проводили исследованием выделенных ДНК в ПЦР в режиме реального времени. Наиболее эффективным для выделения нуклеиновых кислот является метод магнитной сорбции.

Для оптимизации условий проведения обратной транскрипции проводили real-time ПЦР с использованием фермента ревертазы. Установлено, что накопление продуктов амплификации в обоих случаях происходило на 31 – 32 цикле, однако кДНК, полученная при использовании набора «Синтол», показала более равномерное накопление ампликонов, чем при использовании набора «Реверта L».

На следующем этапе исследовали образцы проб, обработанных ДНКазой, но без механизма обратной транскрипции. Обратную транскрипцию эффективнее проводить с набором «Синтол», результативность в этом случае выше, чем при использовании набора «Реверта L».

Сравнили методы постановки ПЦР с электрофоретической детекцией и в режиме реального времени. Поскольку полосы в геле достаточно чёткие, образец представляет собой дискретный набор макромолекул определённого размера, причём концентрация лёгких молекул наиболее велика. При постановке ПЦР в режиме реального времени детектировали флуоресценцию, отражающую накопление ампликонов на каждом цикле амплификации. С целью контроля качества дезинфекции эффективнее проведение ПЦР в режиме реального времени.

*Заключение:* В результате дезинфекции уничтожаются только вегетативные формы биопатогенов., поэтому продезинфицированные поверхности не всегда обеззараживаются полностью. В случае успешного проведения дезинфекции в пробе количество РНК погибшей бактериальной клетки постоянно падает и через какое-то время исчезает.

## **ВЛИЯНИЕ МОДУЛЯТОРА МЕТАБОЛИЗМА НА ПРОТЕОМНЫЙ ПРОФИЛЬ КЛЕТОК РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ ЧЕЛОВЕКА.**

Габбасова Р.Р., Иксанова А.Г., Агафонова М.Н., Пугачев М.В., Штырлин Ю.Г.

*ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Научно-образовательный центр фармацевтики, Казань, Россия*

*raylya.gabbasova@mail.ru*

При разработке метаболических модуляторов опухолевых клеток основное внимание исследователей направлено на разработку супрессоров тех или иных биосинтетических или биоэнергетических процессов.

Целью данного исследования является изучение динамики изменений протеомного профиля опухолевых клеток MCF-7 в процессе инкубации с предполагаемым модулятором внутриклеточного метаболизма – гетероциклическим соединением TX-14. Внутриклеточные изменения оценивали с помощью протеомного анализа с привлечением двумерного электрофореза и масс-спектрометрии.

Проведенные исследования позволили выявить и оценить изменения в составе и соотношении белков внутри клеток линии MCF-7, подверженных влиянию соединения TX-14. В ходе исследований было показано, что большая часть белков отличия, как приобретенных, так и потерянных, обладают каталитической, связывающей, транскрипторной и структурирующей активностями.

Установлено, что TX-14 вызывает увеличение скорости пролиферации у клеток MCF-7 с 27 суток инкубации. Идентифицированы белки отличия при инкубации клеток с данным модулятором метаболизма. Также было показано, что TX-14 прекращает экспрессию ряда онкомаркеров рака молочной железы. Установлено, что TX-14 увеличивает экспрессию антиоксидантного белка пероксиредоксина-2 и субъединиц 1 и 2 комплексов дыхательной цепи митохондрий.

Таким образом, результаты проведенных исследований позволяют заключить, что гетероциклическое соединение TX-14 является эффективным модулятором метаболизма опухолевых клеток и представляет интерес в качестве объекта исследований при разработке противоопухолевых препаратов.

## ФОРМИРОВАНИЕ БИОПЛЕНОК УРОПАТОГЕННЫМИ ШТАММАМИ *ESCHERICHIA COLI* В МОНОВИДОВОЙ И СМЕШАННОЙ КУЛЬТУРЕ IN VITRO

Гизатуллина Ю.С.<sup>a</sup>, Кузнецова М.В.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ГБОУ ВО ПГНИУ, Пермь, Россия

<sup>b</sup> ФГБУН ИЭГМ УрО РАН, Пермь, Россия

*gizatullina.julia@yandex.ru*

Наиболее частыми возбудителями инфекций мочевыделительной системы являются уропатогенные *Escherichia coli* (UPEC) [1]. При установке катетера бактерии могут существовать в прикрепленных сообществах соименных видов.

**Цель работы** – оценить жизнеспособность клеток и биомассу биопленки, сформированной клиническими штаммами *E. coli* при росте в моновидовой и смешанной культуре в различных модельных системах *in vitro*.

**Методы и материалы.** В работе использовали рекомбинантный штамм *E. coli* N4i pOX38 Gm<sup>r</sup>Cm<sup>r</sup> [2] и клинические изоляты *E. coli* Am<sup>r</sup> (n=6). Биопленки формировали 24 ч при 37 °C в моно- и микст-вариантах (формирующаяся биопленка *E. coli* N4i + *E. coli* Am<sup>r</sup>; сформированная 24 ч биопленка *E. coli* N4i + *E. coli* Am<sup>r</sup>; 24 ч биопленка *E. coli* Am<sup>r</sup> + *E. coli* N4i) в лунках полистиролового плоскодонного планшета, а также на фрагментах мочевого катетера Нелатона (ПВХ, "Apximed International BV"). Число клеток (колониеобразующих единиц, КОЕ) в биопленке оценивали после ее обработки ультразвуком (Elma 30S) путем высева децимальных разведений бактериальной суспензии на селективные агаризованные среды с антибиотиками. Биомассу биопленок оценивали согласно O'Toole G.F. et al. (2000) при длине волны 580 нм в ОЕ.

**Результаты.** Показатели массивности биопленки клинических штаммов на полистироле в моновидовой и смешанной культуре были невысокими и достоверно не отличались во всех вариантах: "формирующая биопленка" ( $0,099 \pm 0,021$  ОЕ против  $0,097 \pm 0,018$  ОЕ), "24 ч биопленка *E. coli* N4i + *E. coli* Am<sup>r</sup>" ( $0,099 \pm 0,011$  против  $0,110 \pm 0,015$ ), "24 ч биопленка *E. coli* Am<sup>r</sup> + *E. coli* N4i" ( $0,138 \pm 0,017$  против  $0,135 \pm 0,015$  ОЕ). Биомасса смешанной биопленки в варианте "24 ч биопленка *E. coli* Am<sup>r</sup> + *E. coli* N4i" была достоверно больше, чем в "формирующейся биопленке" ( $p=0,018$ ). Число бактерий *E. coli* Am<sup>r</sup> в моновидовых и смешанных биопленках в пределах варианта статистически не отличалось. Обнаружена корреляция между биомассой биопленки и количеством бактерий *E. coli* Am<sup>r</sup> в ее составе для моновидовой и смешанной "24 ч биопленка *E. coli* Am<sup>r</sup> + *E. coli* N4i" культур ( $r=0,904$  и  $0,909$  соответственно). В случае формирования биопленки на катетере достоверных различий по адгезии клеток клинических штаммов в моновидовой и смешанной культуре также не выявлено. Корреляции между массивностью и числом КОЕ как в моновидовой, так и в смешанной культуре не обнаружено.

1. Hamasuna R. et al. *J. Antimicrob Chemother.* 2014. **69(6)**. 1675-1680.
2. Starčić Erijavec M. et al. *Plasmid.* 2015. **3(82)**. 28-34.

## ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК ЖИРОВОЙ ТКАНИ ЧЕЛОВЕКА ПРИ ВЛИЯНИИ ЦИСПЛАТИНА

Гилазиева З., Архипова С., Тазетдинова Л., Соловьева В.

*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия*

*gilazieva.zarema@mail.ru*

В настоящее время традиционные методы лечения онкологических заболеваний имеют тяжелые последствия для организма человека, поэтому поиск новых подходов в терапии подобных заболеваний представляется чрезвычайно актуальным. Одним из новым направлений в развитии клеточной терапии рака является загрузка мезенхимных стволовых клеток химиотерапевтическими препаратами, одним из которых является цисплатин, затрудняющий деление поврежденной опухолевой клетки [1]. Однако влияние цисплатина на мезенхимные стволовые клетки остаются в значительной степени не изученными.

С помощью методов электронно-микроскопического и цитотоксического анализов была исследована ультраструктура и жизнеспособность мезенхимальных стволовых клеток жировой ткани человека при культивировании в среде с добавлением цисплатина в концентрациях: 10  $\mu\text{g}/\text{ml}$ , 5  $\mu\text{g}/\text{ml}$  и 2.5  $\mu\text{g}/\text{ml}$ . В качестве контроля исследовали нативные мезенхимальные стволовые клетки жировой ткани человека.

Установлено, что клетки жировой ткани человека устойчивы к действию цисплатина в концентрациях 5 и 2.5  $\mu\text{g}/\text{ml}$ . При таких концентрациях не происходит значительных ультраструктурных изменений. Существенные ультраструктурные изменения наблюдались при исследовании клеток, обработанных цисплатином в концентрации 10  $\mu\text{g}/\text{ml}$ . Видоизменялся эндоплазматический ретикулум этих клеток, увеличивалось количество аутофагических вакуолей в цитоплазме, цистерны гранулярного ЭПР становились расширенными, что, вероятно, свидетельствует о слабой интоксикации и возможном снижении синтетической функции. По данным цитотоксического исследования концентрация цисплатина 10  $\mu\text{g}/\text{ml}$  нарушает активность митохондриальных ферментов и снижает жизнеспособность клеток. Полученные данные свидетельствуют о том, что нетоксичные концентрации можно использовать для дальнейших исследований и разработке методов терапии онкологических заболеваний.

1. S. Dasari, P.B. Tchounwou. *Cisplatin in cancer therapy: molecular mechanisms of action*, 2014, **740**, 364-78.

## МИКРОБИОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ ВСПОМОГАТЕЛЬНЫХ РЕПРОДУКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Годовалов А.П., Осипович О.А., Бушкова Е.Ю., Степанов М.С.

*ФГБОУ ВО «Пермский государственный медицинский университет им. акад.  
Е.А. Вагнера» Минздрава России, Пермь, Россия*

*AGodovalov@gmail.com*

Последние десятилетия характеризуются стремительным прогрессом в области эмбрииологии, благодаря чему появились и широко применяются различные вспомогательные репродуктивные технологии (ВРТ), позволяющие большому количеству бесплодных пар иметь детей. Однако их результативность в разных странах колеблется от 28,5 до 32,5% [2]. Основное внимание исследователей и клиницистов при этом сосредоточено на морфо-функциональных характеристиках репродуктивных органов, тогда как их микробиологическому статусу уделяется недостаточно внимания. Между тем на успешную имплантацию эмбриона могут оказывать влияние такие факторы как микробная колонизация цервикального канала, субклинический эндометрит, которые обеспечивают и прямое, и опосредованное цитокинами негативное влияние [3]. С другой стороны, при бактериоспермии возможна контаминация сред культивирования эмбриона, что может нарушить оплодотворение или развитие эмбриона [1]. Цель исследования – изучить состав микрофлоры эякулята и вагинального содержимого пациентов, планирующих применение ВРТ.

**Материалы и методы.** Проведено микробиологическое исследование эякулята мужчин и вагинального секрета женщин 92 пар, состоящих в бесплодном браке. Средний возраст обследованных  $37,7 \pm 0,7$  и  $34,1 \pm 0,8$  года соответственно. Взятие материала и его исследование проводили согласно общепринятым стандартизованным методикам.

**Результаты.** Показано, что у большинства мужчин и женщин, состоящих в бесплодном браке, в генитальном тракте встречаются соименные виды условно патогенных микроорганизмов. Так, грамположительные кокки выделены из эякулята 72% мужчин и вагинального содержимого 65% женщин. Наиболее часто как у мужчин, так и у женщин были обнаружены коагулазоотрицательные виды – *Staphylococcus epidermidis* и *S. haemolyticus*. В эякуляте 34% мужчин и вагинальном содержимом 28% женщин обнаружен рост представителей семейства *Enterobacteriaceae*, причем основная масса выделенных штаммов относилась к *Escherichia coli*. Грибы рода *Candida* обнаружены преимущественно у женщин – 20% (у мужчин – 1%). Таким образом, зачастую проведению процедуры ВРТ предшествует, а, возможно, и сопровождает микробная контаминация эякулята и влагалищного отделяемого, более того в секретах обнаруживаются идентичные таксоны, которые могут оказывать негативное влияние как на сперматозоиды, так и на яйцеклетки. Можно полагать, что именно они представляют один из ведущих факторов риска в подобных случаях. Это указывает на необходимость адекватного микробиологического мониторинга и деконтаминации половых путей партнеров из бесплодных пар при планировании ВРТ.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-44-590429 и Администрации Пермского края.*

1. M. Askienazy-Elbhar. *Gynecol. Obstet. Fertil.*, 2005, **33**, 691-697.
2. P. Kuivasaari-Pirinen, K. Raatikainen, H. Madverse. *ISRN. Obstet. Gynecol.*, 2012, **12**, 1-5.
3. R. Salim, I. Ben-Shlomo, R. Colodner, Y. Keness, E. Shalev. *Hum. Reprod.*, 2002, **17**(2), 337-340.

## ДИАГНОСТИКА СОСТОЯНИЯ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТОЙ СИСТЕМЫ СПОРТСМЕНОВ С ПОМОЩЬЮ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ

Головачев А.М., Биктемирова Р.Г., Зиятдинова Н.И., Зефиров Т.Л.

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

*argogo@list.ru*

В последние годы участились случаи нарушения работы сердца у спортсменов во время тренировок и соревнований, причиной которых были чрезмерные физические нагрузки [2]. В подобных случаях предположительно имела место несвоевременная, либо недостаточная диагностика состояния сердечно-сосудистой системы; при этом не всегда учитываются индивидуальные особенности сердечно-сосудистой системы и ее адаптационные возможности [1]. В связи с тем, что в некоторых случаях невозможно решить вопрос о готовности сердечно-сосудистой системы к увеличению физических нагрузок, а также продолжению занятий спортом вообще, имея в арсенале только традиционные для спортивной медицины способы измерения показателей, необходимо использование дополнительных способов исследования наряду со стандартными.

Целью нашего исследования явилось измерение параметров работы сердечно-сосудистой системы (частота сердечных сокращений, артериальное давление, давление в легочной артерии) лиц, занимавшихся спортом и физической культурой с помощью различных методов измерения показателей.

Исследование, в котором приняли участие мужчины 40-50 лет, занимавшиеся физкультурой и спортом, проводилось на базе лечебно-профилактического учреждения г.Казани. Проведен анализ таких показателей, как артериальное давление, частота сердечный сокращений, давление в легочной артерии (ДЛА), полученные с помощью электрокардиографии, сфигмоманометра, эхокардиографии, инвазивного мониторинга (с использованием баллонного катетера Сван-Ганца) в состоянии покоя. Полученные показатели ДЛА существенно отличались при измерении различными методами. Кроме того, предварительный вывод о состоянии сердечно-сосудистой системы испытуемых после проведения стандартных методов измерения был скорректирован после дополнительного обследования с помощью инвазивного мониторинга. Следовательно, в некоторых случаях внедрение дополнительных методов исследования будет способствовать более раннему выявлению нарушений работы сердечно-сосудистой системы у лиц, занимающихся спортом. Приведенные в работе данные могут быть использованы в спортивной физиологии, для более дифференцированного и углубленного медицинского обследования лиц, занимающихся спортом.

*Работа выполнена при поддержке РГНФ и Правительства Республики Татарстан в рамках научного проекта №15-16-16007*

1. Ботова, Л.Н. Индивидуальные особенности гемодинамики у гимнасток 8-10 лет в тренировочном процессе: дис. ... канд. биол. наук. Казань, 2014. 143 с.
2. Васильева, И.Г. Спорт и физическая культура: мнения молодежи // Материалы V Международной научной конференции студентов и молодых ученых «Университетский спорт: здоровье и процветание нации». Казань: Поволжская ГАФКСиТ, 2015. Т.1. С.18-21.

## НЕКОТОРЫЕ СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПЛЕНОЦИТОВ МЫШЕЙ В УСЛОВИЯХ ФОТОДИНАМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Голубничая М.А., Лысенко Ю.А., Артюхов В.Г.

*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия*

*mgolubnichaja@gmail.com*

В настоящее время одним из способов лечения онкозаболеваний является метод фотодинамической терапии (ФДТ). Одной из составляющих конечного эффекта резорбции опухолей в процессе ФДТ является активация компонентов иммунной системы опухоленосителя. Клетки иммунной системы, инфильтрирующие зону опухоли, также могут претерпевать модификации в процессе экзогенного воздействия: изменять свои функциональные свойства и, возможно, направления трансформации неопластического образования. С целью моделирования протекающих при этом процессов представляло интерес исследование фоточувствительности спленоцитов (в частности, жизнеспособности клеток селезенки и изменений морфологии их поверхности, уровня свободного цитоплазматического кальция) к действию красного света (665 нм; 9 Дж/см<sup>2</sup>) в присутствии сенсибилизатора – метиленового голубого (МГ).

В качестве объекта исследования использовали клетки селезенки мышей-самцов аутбредного стока MNRI в возрасте 2-3 месяцев. Определение концентрации клеток в суспензии осуществляли с использованием камеры Горяева. Жизнеспособность клеток оценивали по изменению целостности клеточных мембран (путем эксклюзии трипанового синего) и уровня общей дегидрогеназной активности (МТТ-тест). Внутриклеточный уровень свободных ионов кальция определяли с помощью флуоресцентного зонда FURA-2/AM. Визуализацию клеточной поверхности проводили с использованием растрового электронного микроскопа JSM-6380 LV, JEOL (Япония). В результате проведенных экспериментов нами выявлено, что облучение суспензии спленоцитов (665 нм; 9 Дж/см<sup>2</sup>) в смеси с метиленовым голубым ( $10^{-4}$  моль/л) и дальнейшая инкубация образцов в течение 4 ч сопровождаются нарушением целостности мембран части клеток и снижению уровня их общей дегидрогеназной активности. Показано, что темновая инкубация и фотомодификация спленоцитов с красителем способствуют снижению концентрации свободных ионов кальция в цитоплазме клеток через 4 ч после экзогенного воздействия на 25 и 59 % соответственно. Установлено также, что клетки селезенки, инкубированные с МГ, проявляют тенденцию к распластыванию на субстрате и образованию более выраженных по сравнению с немодифицированными образцами клеточных прорезей.

## ИЗМЕНЕНИЕ БЕЛКОВОГО ПРОФИЛЯ *BACILLUS PUMILUS* GA-1 ПОД ДЕЙСТВИЕМ 2,4,6-ТРИНИТРОТОЛУОЛА

Горбунова А.С.<sup>a</sup>, Ибрагимов Э.М.<sup>a</sup>, Романова Ю.Д.<sup>b</sup>, Яковлева Г.Ю.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Междисциплинарный центр протеомных исследований, Казань, Россия

*GorbunovaAnna94@gmail.com*

Нитроароматические соединения традиционно используются в качестве красителей, взрывчатых веществ и пестицидов. К числу таких соединений относится 2,4,6-тринитротолуол (TNT) – вещество, обладающее токсическими и мутагенными свойствами, а также устойчивостью к биодеградации [1]. Биологическая очистка при помощи микроорганизмов является одним из универсальных и безопасных способов удаления химических соединений из загрязненных объектов. Это связано с наличием у них различных ферментативных систем деструкции ксенобиотиков [2].

В основе адаптации микроорганизмов к токсическим веществам лежит использование как специальных ферментов детоксикации, так и различных ферментных систем обмена веществ клетки. В связи с этим, с использованием метода двумерного гель-электрофореза нами был проведен анализ изменения протеомного профиля *Bacillus pumilus* GA-1 под действием 2,4,6-тринитротолуола, с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) и ионообменной хроматографии были идентифицированы продукты трансформации TNT.

В экспериментах использовался широкий диапазон концентраций TNT – от 20 до 200 мг/л. Несмотря на подавление роста культуры в присутствии ксенобиотика, к 24 ч *B. pumilus* GA-1 полностью элиминировала TNT из среды культивирования при его исходной концентрации 20 и 50 мг/л и к 48 ч на 40, 24 и 18 % при концентрации 100, 150 и 200 мг/л соответственно. Трансформация TNT при всех исследуемых концентрациях шла по пути восстановления нитрогрупп с образованием 4-амино-2,6-динитротолуола.

Сравнительный протеомный анализ продемонстрировал различие в составе белков в клетках *B. pumilus* GA-1, находящихся в контакте с TNT (20 и 200 мг/л), с клетками контрольного (без TNT) варианта. Высокие концентрации ксенобиотика (200 мг/л) оказывали более выраженное токсическое действие в отношении *B. pumilus*, что нашло свое отражение в изменении белкового профиля данного микроорганизма. Количество совпадающих белков контрольного и опытного вариантов было значительно меньше, чем при действии низкой концентрации ксенобиотика (20 мг/л). Значительно увеличилось количество ингибируемых белков. Так если при действии TNT в концентрации 20 мг/л мы визуально наблюдали подавление продукции лишь 3 белков, то TNT в концентрации 200 мг/л ингибировал экспрессию 38. При действии высокой концентрации ксенобиотика, кроме ингибируемых белков, были продетектированы 26 белков, которые индуцировались в присутствии TNT. Среди индуцируемых белков *B. pumilus* GA-1 преобладали белки, ответственные за восстановительный путь трансформации ксенобиотика, снятие окислительного стресса и репарацию молекулы ДНК и клеточной стенки. В числе ингибируемых TNT белков отмечались белки характерные для клеток, находящихся на стадии активного роста.

1. M. I. Khan, J. Lee, K. Yoo, S. Kim, J. Park Improved TNT detoxification by starch addition in a nitrogen-fixing *Methylophilus*-dominant aerobic microbial consortium. *Journal of Hazardous Materials*, 2015, **300**, 873-881.
2. G. Liu, J. Zhou, H. Lv, X. Xiang, J. Wang, M. Zhou, Y. Qv Azoreductase from *Rhodobacter sphaeroides* AS1.1737 is a flavodoxin that also functions as nitroreductase and flavin mononucleotide reductase. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 2007, **76**, 1271-1279.

## АНТИМУТАГЕННЫЙ ЭФФЕКТ ЭКСТРАКТОВ РАСТЕНИЙ *SANSEVIERIA CYLINDRICA* И *SANSEVIERIA TRIFASCIATA*

Гумерова С.К.<sup>a</sup>, Джаббарова Э.М.<sup>a</sup>, Иссам Йосеф Абдул-Хафиз<sup>b</sup>, Карамова Н.С.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Асьютский университет, Асьют, Египет

*syumbelya07@mail.ru*

Экспериментальные исследования, проведенные в течение последних трех десятилетий, показали, что немалое число химических соединений применяемых в промышленности, сельском хозяйстве и в быту обладает мутагенной активностью, вызывая наследственные изменения. С повреждающим действием мутагенов на генетические структуры связывают возникновение злокачественных опухолей, врожденных пороков развития, а также преждевременное старение. Поэтому поиск и характеристика соединений, снижающих частоту спонтанных и индуцированных мутаций, является одним из перспективных направлений профилактической медицины.

Целью данной работы явилась оценка антимутагенного эффекта органических экстрактов растений *Sansevieria trifasciata* и *Sansevieria cylindrica* в тесте Эймса. Растительный материал был собран в разных регионах Египта. Антимутагенную активность экстрактов оценивали по ингибированию мутагенного эффекта известных мутагенов: 2-нитрофлуорена (2-НФ) и азида натрия (NaN<sub>3</sub>).

Показано, что одновременная инкубация тестерного штамма *Salmonella typhimurium* TA98 с 2-НФ с экстрактом *S. trifasciata*, приводит к значительному снижению числа His<sup>+</sup>-ревертантов, индуцированных 2-НФ. Наивысший десмутагенный эффект (80%) выявлен для экстракта корневищ *S. trifasciata* в концентрации 1000 мкг/чаш. Экстракты *S. trifasciata* и *S. cylindrica* также проявили сильную антимутагенную активность (75% и 76% соответственно) в отношении NaN<sub>3</sub>, индуцирующего мутации типа замены пар оснований. Таким образом, результаты данной работы свидетельствуют о том, что экстракты корневищ растений *S. cylindrica* и *S. trifasciata* могут быть потенциальными источниками природных антимутагенов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-54-61024)*

## ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ И АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПОЛИСУКЦИНИМИДА И ПОЛИАСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Гумерова Д.Р., Салахиева Д.В., Ахмадишина А.А., Камалов М.И., Абдуллин Т.И.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

dilka-gume@mail.ru

Актуальной задачей биологии и медицины является использование полисукциниамида, полииаспарагиновой кислоты и их производных в качестве потенциальных лекарственных носителей для противораковых соединений [1], генных терапевтических средств [2], а также стимул-чувствительных и образующихся *in situ* гидрогелей для тканевой инженерии [3].

Полисукциниид (ПСИ) синтезировали путем термической поликонденсации L-аспарагиновой кислоты в присутствии фосфорной кислоты в атмосфере аргона. Образцы ПСИ синтезировали по времени 3 ч и 1.5 ч и далее гидролизовали до получения соответствующих натриевых солей полииаспарагиновой кислоты (ПАСП). Структуру синтезированных ПСИ и ПАСП подтверждала методом ИК-спектроскопии [4].

Молекулярные массы (ММ) ПАСП, полученных из соответствующих полисукцинидов, определяли методом статического рассеяния света. ММ образцов ПАСП составили 8.3 и 3.9 кДа, соответственно. Изучение цитотоксической активности синтезированных полимеров показало, что на опухолевых клетках рака простаты (PC-3) и фибробластах мыши (NIH 3T3) ПАСП не оказывает цитотоксическое действие в концентрациях до 3 мг/мл, что свидетельствует о высокой биосовместимости этих полипептидов. ПСИ снижает жизнеспособность клеток с различными значениями полумаксимальной ингибирующей концентрации ( $IC_{50}$ ). Увеличение молекулярной массы ПСИ сопровождалось усилением цитотоксичности полипептида для клеток PC-3 и ее снижением для 3T3 фибробластов примерно в 1.5 раза.

Исследовано влияние ПСИ и ПАСП на реакцию Фентона. Установлено, что ПАСП с молекулярной массой 8.3 кДа проявляет заметное ингибирование образования гидроксильных радикалов с эффективной полумаксимальной концентрацией  $90.8 \pm 1.4$  мкг/мл, в то время как другие полимеры не проявляли данного эффекта. Однако все изучаемые полимеры, не вступают в реакцию с дифенилпикрилгидразильным хромогенным радикалом. Следовательно, как ПАСП, так и ПСИ не обладают способностью связывать свободные радикалы, а наблюдаемое ингибирование реакции Фентона обусловлено способностью ПАСП связывать и хелатировать ионы переходных металлов. Полученные результаты представляют интерес для создания лекарственных носителей и биологически совместимых материалов на основе ПАСП и ПСИ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №15-33-20914 и в рамках программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 гг.

1. Osada, K., Christie, R. J., Kataoka, K. J. Royal Soci., Interface, 2009, **6**, S325–S339.
2. Uchida, H., Miyata, K., et al. J. Amer. Chem.Soci., 2011, **133**, 15524–15532.
3. Krisch, E., Messager, L., et al. Macromol. Mater. Eng., 2015, **301**, 260-266.
4. Salakhieva, D., Gumerova, D., et al. BioNanoSci., 2016, DOI 10.1007/s12668-016-0230-0.

## ПРИМЕНЕНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ДОПЛЕРОВСКОЙ ФЛОУМЕТРИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РАЗДРАЖАЮЩЕГО ДЕЙСТВИЯ ВЕЩЕСТВ НА КОЖУ

Данг Т.В.Ч., Сираева З.Ю., Ергешов А.А., Абдуллин Т.И.

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

*dtvtrinh@gmail.com*

Система мониторинга лазерной доплеровской флоуметрии (ЛДФ) и оксигенации является полезным инструментом для оценки риска и активности контактирующих с кожей веществ и материалов.

В работе крыс Вистар наркотизировали и депилировали на дорсолатеральной поверхности. Четыре зоны на депилированной поверхности крысы ( $2 \times 2$  см каждая) приводили в контакт с аппликацией, смоченной аликвотами тестируемых водных растворов: 0,9 % натрия хлорида, 1,0 % формальдегида и 10,0 % формальдегида.

Контрольный раствор (0,9 % NaCl) не вызывал раздражения на коже. Местное раздражающее действие формальдегида вызывало быстрое, но обратимое увеличение микроциркуляции кожи при концентрации 1 % в течение первых дней наблюдения. При более высокой концентрации формальдегида (10 %) вызывал значительное снижение микроциркуляции в 2,4 раза через 1 ч после аппликации с последующим постепенным увеличением микроциркуляции к 48 часу.

Результаты показывают, что система ЛДФ и оксигенации позволяет выявлять раздражение кожи при действии химических агентов на модели крысы. Изменение микроциркуляции и оксигенации проявляется в течение первого часа после обработки, сохраняется в течение первых дней наблюдения, и коррелирует с более поздним проявлением отека и эритемы. Таким образом, сигнал ЛДФ служит ранним критерием раздражения кожи, что представляет интерес для выявления потенциальных ирритантов для кожи.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-54-10059 и в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета.*

1. Z. Siraeva, T. Dang, A. Yergeshov, et al. Evaluation of skin irritation in rats using simultaneous laser Doppler flowmetry and oxygenation monitoring. *BioNanoScience*. 2016 (accepted).

## АНАЛИЗ ГЕНОВ РАДИОРЕЗИСТЕНТНОСТИ ПРОБИОТИЧЕСКИХ ЛАКТОБАЦИЛЛ

До Тхи Зуен, Рычакова Ж.С., Исмагилова Р.К., Ильинская О.Н., Яруллина Д.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, ИФМиБ, Казань, Россия

doduuenthi@gmail.com

Лучевая терапия опухолей органов брюшной полости и малого таза часто сопровождаются развитием у пациентов воспаления кишечника, дисбактериоза и диареи. Для коррекции этих патологических состояний рекомендовано применять пробиотики – препараты на основе живых клеток лактобацилл, бифидобактерий и некоторых других микроорганизмов [1]. При этом сведения о радиорезистентности пробиотических бактерий крайне немногочисленны. Цель работы – анализ генов радиорезистентности лактобацилл.

В качестве объекта исследования использовали 12 штаммов 5 видов лактобацилл (*L. plantarum*, *L. rhamnosus*, *L. fermentum*, *L. helveticus*, *L. acidophilus*), выделенных нами из пробиотических препаратов и желудочно-кишечного тракта (ЖКТ) человека. В геномах исследуемых бактерий было проверено наличие генов *recN*, *urvA*, *urvB*, *recF*, *recG*, играющих ключевую роль в радиорезистентности бактерий. Ген *recG* кодирует АТФ-зависимую ДНК хеликазу, гены *recF* и *recN* отвечают за рекомбинационную репарацию, а гены *urvA* и *urvB* принадлежат к системе UvrABC репарации. В данной работе был проведен биоинформационный анализ последовательностей этих генов лактобацилл в базе данных GenBank, в результате чего были подобраны праймеры к консервативным областям генов, общим у пяти разных видов лактобацилл. Последовательности генов радиорезистентности были амплифицированы методом ПЦР, после чего ПЦР-продукты были просеквенированы методом Сэнгера на секвенаторе ABI Prism 3730 (Applied Biosystems, Швеция). Для того чтобы идентифицировать полученные последовательности, выполнили выравнивание каждого сиквенса в базе данных GenBank с помощью программы BLAST. В результате у бактерий рода *Lactobacillus* впервые были экспериментально обнаружены гены радиорезистентности *recF*, *recG*, *recN*, *urvA* и *urvB*, которые ранее были известны только из работ по полногеномному секвенированию лактобацилл [2-5]. Однако для выяснения функциональной роли этих генов у лактобацилл необходимы дальнейшие исследования с использованием высоких сублетальных доз облучения.

Работа выполнена с использованием оборудования Междисциплинарного ЦКП КФУ для обеспечения клеточных, геномных и постгеномных исследований в Приволжском регионе.

1. Isolauri, E., Salminen, S., Ouwehand, A.C. *Probiotics. Best Prac. Res. Cl. Em.* 2004, **18**, 299-313.
2. H. Morita, H. Toh, K. Oshima, M. Murakami, T.D. Taylor, S. Igimi, M. Hattori. *Journal of bacteriology*, 2009, – **191(24)**, 7630-7631.
3. R.J. Siezen, C. Francke, B. Renckens, J. Boekhorst, M. Wels, M. Kleerebezem, M. *Journal of bacteriology*. 2012, **194(1)**, 195-196.
4. E. Altermann, W. M. Russell, M. A. Azcarate-Peril, R Barrangou, B. L. Buck, O. McAuliffe, S. Lick. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 2005, **102(11)**, 3906-3912.
5. J.R. Broadbent, J.E. Hughes, D.L. Welker, T.A. Tompkins, J.L. Steele. *Genome announcements*. 2013, **1(4)**, 1.

## МОДИФИКАЦИЯ НЕКОТОРЫХ СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КЛЕТОК АСЦИТНОЙ КАРЦИНОМЫ ЭРЛИХА И ИХ КОМПОНЕНТОВ В ПРИСУТСТВИИ ДОКСОРУБИЦИНА

Духанина Е.В., Лысенко Ю.А., Артюхов В.Г.

*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия*

*renata\_elena@rambler.ru*

Антраклиновый антибиотик – доксорубицин (ДР), используется в клинической практике при лечении онкозаболеваний, однако, физико-химические механизмы процессов, лежащих в основе его противоопухолевого действия, исследованы далеко не полностью. В связи с этим целью настоящей работы явилось выявление изменений: 1) чувствительности клеток асцитной карциномы Эрлиха (АКЭ), находящихся на экспоненциальной и терминальной стадиях роста опухоли в перitoneальной полости мышей NMRI, к действию ДР различных концентраций; 2) физико-химических характеристик комплекса ДНК АКЭ – ДР в условиях различного микроокружения (варьирование ионной силы раствора, термоденатурация).

В качестве объектов исследования использовались клетки АКЭ, извлеченные на 7 и 12 сутки после инокуляции в перitoneальную полость мышей. Исследуемые образцы инкубировали в присутствии ДР ( $10^{-6}$ ,  $10^{-5}$  и  $10^{-4}$  моль/л) в течение 24 и 48 ч. Далее осуществляли: подсчет концентрации клеток, определение уровня их жизнеспособности путем оценки степени целостности клеточных мембран (эксклюзия трипанового синего) и уровня общей дегидрогеназной активности (МТТ-тест), а также анализ электрофоретических характеристик геномной ДНК, выделенной из клеток АКЭ. Изменения морфологии клеточной поверхности выявляли методом растровой электронной микроскопии.

В отношении комплексов ДНК – ДР оценивали изменения: спектров поглощения растворов в видимой и ИК-областях, гидродинамического радиуса (методом динамического светорассеяния), электрофоретических характеристик (в 1,5 % геле агарозы). Визуализацию молекул ДНК в свободной форме и в комплексе с ДР осуществляли методом атомно-силовой микроскопии. В результате проведенных экспериментов установлено, что клетки АКЭ, находящиеся на экспоненциальной стадии роста (7 сут), более чувствительны к действию ДР ( $10^{-4}$  моль/л), чем таковые, изъятые на 12 сут пролиферации, в условиях их инкубации *in vitro*; связывание ДР с ДНК, выделенной из клеток АКЭ, способствует модификации физико-химических характеристик обоих соединений и может модулировать чувствительность ДНК к действию внешних агентов (изменение ионной силы раствора (0,01; 0,1 моль/л NaCl), термоденатурация).

## РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ ИЗМЕРЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОЧЕИСПУСКАНИЯ ДЛЯ УРОДИНАМИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

Дьячков К.В.<sup>а</sup>, Долгов П.М.<sup>б</sup>, Порунов А.А<sup>а</sup>, Тюрина М.М.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Институт автоматики и электронного приборостроения,  
КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, Казань, Россия

<sup>б</sup> ООО «НПО «СЕТАЛ», Казань Россия

Kostt74@yandex.ru

В последнее время все более возрастает распространенность урологических заболеваний мочевыделительной системы как среди взрослых, так и детей, которые вызывают эвакуаторную несостоятельность мочевых путей. Так по данным ВОЗ воспалительные заболевания мочевых путей у детей занимают второе место после ОРВИ. В тоже время до 90 % мужчин старше 60 лет страдают заболеваниями почек, мочевого пузыря, хроническими простатитами, а 70 % женщин в возрасте старше 50 лет страдают почечно-каменной болезнью и циститами. Поэтому разработка и исследование методов и средств измерения параметров уродинамики при диагностике мочевыделительной системы представляют одну из актуальных проблем в современной медицинской технике, применяемой в урологии [1,2]. Это связано с недостаточной оснащенностью отечественных больниц и клиник техническими средствами контроля параметров уродинамики и, в частности, урофлоуметров, не отвечающих современным требованиям медицинской практики.

В представленном докладе разработаны и обоснованы принципы и схемы структурного построения многоканальной системы измерения параметров мочеиспускания для уродинамического мониторинга, который базируется на урофлоуметре, построенном на эффекте вытеснения воздуха мочой, поступающей в результате акта мочеиспускания пациента. Данная работа проводится совместно с ООО «НПО «СЕТАЛ» по инициативе врачей-урологов казанских медицинских учреждений.

1. Акопян И.Г. Урофлоуметрия как метод уродинамического тестирования. *Лечачий врач*, 2005, **10**, 62-66.
2. Шатылко Т.В. Использование урофлоуметрии в диагностике и оценке эффективности лечения урологических заболеваний. *Бюллетень медицинских интернет-конференций*, 2012, **2(2)**, 137.

## РАЗРАБОТКА НОВОЙ КОРМОВОЙ ДОБАВКИ НАНОСТРУКТУРНЫЙ ФОСФОРИТ И ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НА АМИНОКИСЛОТНЫЙ СОСТАВ МЯСА ЦЫПЛЯТ-БРОЙЛЕРОВ

Ежков Д.В.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

*ezkov\_denis@mail.ru*

В последние годы широкое внедрение методов нанотехнологий обусловило появление на фармацевтическом рынке лечебных препаратов и средств нового поколения.

Одним из методов, используемых для получения наноразмерных материалов «сверху-вниз», является метод ультразвукового диспергирования, при котором формирование наночастиц достигается путем дробления макроаналога [1]. Этот метод был использован для разработки инновационной кормовой добавки наноструктурный фосфорит с размером частиц 60,0-120,0 нм. Выбор фосфорита был обусловлен его природным происхождением, экологичностью и содержанием широкого спектра биогенных, легкодоступных для организма животных макро- и микроэлементов. При токсикологических исследованиях наноструктурного фосфорита установлены безопасные дозы его использования [2].

В условиях КФХ «МАРС» Зеленодольского района Республики Татарстан был апробирован наноструктурный фосфорит в виде кормовой добавки цыплятам-бройлерам для улучшения аминокислотного состава мяса. Использование наноструктурного фосфорита обусловило повышение аланина на 34,1%, аспарагиновой кислоты – на 38,0%, глицина – на 5,6%, оксипролина – на 40,4%, пролина – на 19,1%, цистина – на 2,4%, в сравнении с контрольными аналогами. Содержание глютаминовой кислоты существенно не изменилось. Увеличение при использовании кормовой добавки фосфорит были менее значительными и составили: аланин – на 20,5%, аспарагиновая кислота – на 22,4%, глицин – на 1,7%, оксипролин – на 6,4%, цистин – на 1,7%, пролин – незначительно уменьшился.

1. В.О. Ежков, А.Х. Яппаров, Е.С. Нефедьев, А.М. Ежкова, И.А. Яппаров, А.П. Герасимов. *Вестник Казанского технологического университета*, 2014, **17(11)**, 41-45.

2. A.M. Ezhkova, A.Kh. Yapparov, V.O. Ezhkov, L.M.-Kh. Bikkinina, I.A. Yapparov, A.P. Gerasimov. *Doklady Biological Sciences*, 2016, **467(1)**, 65-67.

## РАНОЗАЖИВЛЯЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТРИКСОВ С ИОНАМИ ЦИНКА

Ергешов А.А.<sup>a</sup>, Лыонг Д.Т.<sup>a</sup>, Садыкова Ф.Р.<sup>a</sup>, Сираева З.Ю.<sup>b</sup>, Абдуллин Т.И.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский государственный медицинский университет, Казань, Россия

*abdulla.ergeshov@mail.ru*

Для современной медицины предложено большое разнообразие коммерческих ранозаживляющих биоматериалов, однако эффективных материалов для стимуляции регенерации кожи недостаточно. Перспективным направлением является разработка биоактивных матриксов на основе компонентов межклеточного вещества с модулируемыми физико-химическими и биологическими свойствами. Ранее нами были исследованы однокомпонентные матриксы на основе желатина с модулируемыми свойствами. Интерес для биомедицины представляет воздействия композиционных матриксов на регенерацию кожи и сравнение с ранее предложенным вариантом.

В условиях криополимеризации, с контролируемым введением ионов цинка были получены образцы матриксов на основе желатина. Ранозаживляющую активность матрикса и матрикса с цинком исследовали на модели эксцизионной травмы кожи [Ергешов с соавт., 2015] на крысах-самцах породы Wistar (ООО «Питомник» РАМНТ, Россия) с использованием гистологических методов.

Установлено, что при наложении как однокомпонентного, так и композиционного матрикса площадь раны через 120 ч после травмы уменьшилась ~ в 2 раза; эпидермис характеризовался послойной дифференциацией кератиноцитов. Однако при использовании композиционного матрикса инфильтрация регенерирующей дермы лейкоцитами была ниже по сравнению с однокомпонентным матриксом.

Таким образом, композиционный матрикс с цинком проявляет биологическую активность: стимулирует эпителизацию и дерматизацию, но в меньшей степени, чем однокомпонентный, и подавляет воспалительный процесс после травмы. Ингибирующий эффект цинка в составе матрикса позволяет рекомендовать композиционный матрикс для лечения длительно незаживающих (хронических) ран.

*Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета и с участием ООО «Биомедтех КФУ».*

## КЛОНИРОВАНИЕ ГЕНА ГЛУТАМИНСИНТЕАЗЫ ИЗ *LACTOBACILLUS PLANTARUM 8РА3*

Журавлева Д.Э., Каюмов А.Р.

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

*darya.ed@gmail.com*

Бактерии рода *Lactobacillus* широко используются в деятельности человека, но на сегодняшний день их обмен веществ плохо изучен, в частности азотный метаболизм.

У бактерий *Lactobacillus plantarum* в геноме нами был идентифицирован ген глутаминсингтазы *glnA*, и ген *glnR*, кодирующий фактор транскрипции. Эти два гена объединены в оперон *glnRA*, который имеет 81% идентичности с *glnRA* *Bacillus subtilis*. Возможно, многие закономерности регуляции и функционирования данных у *L. plantarum* и *B. subtilis* будут сопоставимы. Глутаминсингтаза (ГС) в клетках участвует в ассимиляции ионов аммония, а бациллы и лактобациллы обитают в разных экологических нишах; лактобациллы, как правило, обитают в условиях, богатых органическим азотом, поэтому остается неясным, для чего им необходим этот фермент.

Целью работы было клонирование гена глутаминсингтазы из *Lactobacillus plantarum* 8РА3 и очистка белка.

Перед клонированием проводили оценку экспрессии ГС в виде измерения ее активности с помощью биосинтетического теста в клетках бацилл и лактобацилл, культивируемых в условиях дефицита легкодоступного азота. Также проводили идентификацию ГС с помощью иммуноблоттинга с антителами против бациллярного фермента. Для очистки ГС ее ген был клонирован в вектор pET15b под промотор T7 с получением плазмида pET15b-LpGS. Этой лигазной смесью трансформировали лабораторный штамм *E.coli* XL1 blue. С помощью ПЦР проверяли наличие гена-вставки и его направление. Из клонов с правильным направлением вставки выделяли плазмиду и трансформировали ее лабораторный штамм *E.coli* BL21 и индуцировали IPTG. Анализировали накопление белка ГС в клетках с помощью ПААГ электрофореза в денатурирующих условиях.

После очистки на ПААГ электрофорезе идентифицировался белковый бэнд необходимой массы (53 кДа), а в растворе идентифицировалась глутаминсингтазическая активность. Присутствие большого количества неспецифических бэндов требует оптимизации условий очистки белка.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 15-04-02583.*

## ВЛИЯНИЕ ФТОРХИНОЛОНОВ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ФЕРМЕНТОВ ДНК-ГИРАЗЫ И ТОПОИЗОМЕРАЗЫ IV *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*

Замальдинова А.Э., Гарипов М.Р., Штырлин Н.В., Каюмов А.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*Alinka.zam@mail.ru*

Множественная лекарственная устойчивость патогенных и условно-патогенных микроорганизмов представляет в настоящее время значительную проблему в лечении инфекционных заболеваний. Поэтому поиск новых эффективных антибактериальных соединений является актуальной задачей современной фармацевтики. Одними из широко используемых в настоящее время антибиотиков являются соединения фторхинолонового ряда, например, моксифлоксацин, ципрофлоксацин. В НОЦ Фармацевтики КФУ на основе моксифлоксацина были произведены более пятидесяти соединений, три из которых под условными номерами FP16, FP31, FP48 продемонстрировали высокую эффективность против клеток *Staphylococcus aureus* и *Staphylococcus epidermidis*. Целью исследования было установить молекулярные мишени данных соединений в клетках стафилококков. Механизм действия фторхинолонов заключается в ингибировании каталитической активности ферментов ДНК-Гиразы и топоизомеразы IV бактериальной клетки, что приводит к нарушению репликации и транскрипции ДНК и последующей гибели клетки. Исследовали активность ДНК-Гиразы и топоизомеразы IV *S.aureus* в присутствии FP16, FP31, FP48 и моксифлоксацина в качестве антибиотика сравнения. Активность ДНК-Гиразы полностью подавлялась в присутствии 400  $\mu$ M моксифлоксацина, для полного ингибирования топоизомеразы IV требовалось 40  $\mu$ M моксифлоксацина. FP16 и FP48 ингибировали ДНК-Гиразу и топоизомеразу IV в концентрациях 400  $\mu$ M. Следовательно, их мишениями могут являться данные ферменты, однако эффективность соединений ниже по сравнению с моксифлоксацином. FP31 подавляло активность топоизомеразы IV при 40  $\mu$ M, ДНК – Гиразы при 4  $\mu$ M, следовательно, мишениями данного соединения в клетках *S.aureus* являются ДНК-Гираза и Топоизомераза IV, при этом эффективность ингибирования значительно выше по сравнению с моксифлоксацином. Таким образом, FP 31 и его аналоги являются перспективными антибактериальными препаратами.

## МИКРОБИОТА КИШЕЧНОГО ТРАКТА ЛИЧИНОК НЕКОТОРЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ЖУКОВ-КСИЛОФАГОВ

Зиганшина Э.Э., Ваньков П.Ю., Шаабан В., Зиганшин А.М.

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

*elvira051088@gmail.com*

Исследование симбиоза микроорганизмов и насекомых рассматривается как одно из актуальных фундаментальных направлений экологии микроорганизмов с потенциальной возможностью применения научных результатов в различных биотехнологиях, в частности, для анаэробной конверсии трудноразлагаемых отходов на примере целлюлозы (отходы лесоперерабатывающих предприятий и сельского хозяйства). Каждый год в процессе фотосинтеза образуется примерно  $1,5 \times 10^{12}$  тонн целлюлозы, что обуславливает важную экологическую роль разлагающих ее микроорганизмов – участие в глобальном цикле углерода. Научные результаты в области оценки микробных сообществ кишечных трактов личинок и взрослых жуков-ксилофагов, обладающих сложной ферментативной системой гидролиза целлюлозы, означают большой вклад в изучение вопроса симбиотических взаимоотношений различных организмов, а также имеют перспективное прикладное значение.

В работе проанализированы культивируемые бактерии кишечного тракта представителей пластинчатоусых жуков рода *Oryctes* и подсемейства *Cetoniinae* на личиночной стадии развития. Определение таксономической принадлежности выделенных бактерий производили с использованием масс-спектрометра MALDI Biotyper (Bruker). Из кишечника личинок удалось выделить и идентифицировать представителей семейств *Bacillaceae*, *Paenibacillaceae*, относящихся к file *Firmicutes*, семейств *Enterobacteriaceae*, *Brucellaceae*, *Sphingomonadaceae* и *Xanthomonadaceae* внутри филы *Proteobacteria*, а также бактерий семейств *Micrococcaceae*, *Streptomycetaceae* и *Microbacteriaceae* внутри филы *Actinobacteria*. Изучены культурально-морфологические и физиолого-биохимические особенности некоторых культивируемых бактериальных изолятов. Полученные микроорганизмы будут протестированы в технологиях деструкции целлюлозосодержащих субстратов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке «Российского фонда фундаментальных исследований» в рамках научного проекта №16-34-00547.*

## ОЦЕНКА УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ГОРОДА КАЗАНИ

Зубкова А.Д.<sup>a</sup>, Сибгатуллина Г.Ф.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> КНИТУ-КАИ, Казань, Россия

<sup>b</sup> К(П)ФУ, Казань, Россия

*zubkovaad@mail.ru, guzel\_kazan@mail.ru*

В настоящее время проблема загрязнения атмосферного воздуха в крупных городах является очень актуальной. Город Казань – крупный промышленный центр с большим количеством промышленных предприятий и высокой интенсивностью движения автомобильного транспорта.

В ходе работы были проанализированы данные мониторинга атмосферного воздуха г. Казани на пунктах наблюдения за загрязнением атмосферного воздуха (ПНЗ) Управления по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды Республики Татарстан за период 2012-2014 гг. Было показано, что на 7 станциях из 10 наибольшее количество превышений нормативов наблюдалось в 2012 г., а наименьшее – в 2014 г. По количеству превышений ПДКм.р. выделяются пункты наблюдения, расположенные вблизи крупных транспортных магистралей.

Уровень загрязненности атмосферного воздуха, оцененный по интегральному показателю КИЗА<sub>5</sub>, в течение всего периода наблюдения можно охарактеризовать как пониженный. По интегральному индексу СИ качество атмосферного воздуха в течение суток на всех станциях соответствует низкому уровню.

Оценку влияния загрязняющих веществ в составе атмосферного воздуха на здоровье населения произвели в величинах неканцерогенного и канцерогенного риска. Для всех районов суммарный неканцерогенный риск, рассчитанный по 8 приоритетным веществам, характеризуется как средний ( $1,0 < HQ_i \leq 5,0$ ). В составе атмосферного воздуха на ряде ПНЗ наблюдалось наличие формальдегида в диапазоне  $0 - 0,133 \text{ мг}/\text{м}^3$ . Расчет канцерогенного риска при пожизненном вдыхании воздуха, содержащего формальдегид, показал, что его уровень характеризуется как опасный ( $2,5 \times 10^{-2} - 5,1 \times 10^{-2}$ ).

Одним из возможных источников поступления формальдегида, помимо выбросов промышленных предприятий, является автомобильный транспорт. Сложившаяся ситуация требует вмешательства государственных надзорных органов для контроля за организованными источниками загрязнения атмосферного воздуха формальдегидом и оптимизации плотности транспортного потока на дорогах г.Казани.

## ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА Р-ИИ ПОДОБНОГО БЕЛКА GLNK ИЗ *LACTOBACILLUS BREVIS*

Исхакова З.И., Каюмов А.Р.

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

*zalinunya@mail.ru*

Р-ИИ белки в бактериях, археях и растениях [1], регулируя активность множества белков в ответ на специфические метаболические сигналы, которые определяют их структуру и взаимодействие [2]. Среди лактобацилл только у нескольких видов имеют в геноме ген кодирующий Р-ИИ белок. Здесь мы представим предварительную характеристику Р-ИИ подобного белка LbrGlnK из *Lactobacillus brevis*. Аминокислотное выравнивание последовательностей показало только 50-70% гомологии с другими изученными Р-ИИ белками. Белок LbrGlnK также имеет АТФ-связывающий сайт GDGK. Тримерная структура белка была подтверждена методом гель-фильтрации, это предполагает сходство свойств белка LbrGlnK с другими Р-ИИ белками. Изометрическая калометрия титрования (ITC) показала, что белок предпочтительнее связывается с АДФ ( $K_d = 50 \mu\text{M}$ ), чем с АТФ ( $K_d = 357 \mu\text{M}$ ), это говорит о том что, они конкурируют за связывание с белком LbrGlnK. Но ITC не показала связывание белка LbrGlnK ни с 2-OG ни с другими нуклеотидами. Мутация Gly91Ala в АТФ-связывающем сайте исключает взаимодействие белка LbrGlnK и с АДТ и с АТФ. Pull Down анализ идентифицировал шаперонин GroL, транскетолазу и GlnR-подобный фактор транскрипции семейства MerR как наиболее вероятные белки-партнёры для взаимодействия с белком LbrGlnK.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проект №15-04-02583а).*

1. Sant'Anna, F.H. *J. Mol.Evol.*, 2009, **68**, 322-336.
2. Forchhammer,K. *Trends Microbiol.*, 2008, **6**, 65-72.

## РАЗРАБОТКА БИОПРЕПАРАТА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ УРОВНЯ МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ РАСТЕНИЙ И АНТИФИТО И АНТИФИТОПАТОГЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ

Иткина Д.Л., Сулейманова А.Д.

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

*laia9301@mail.ru*

На сегодняшний день актуальной проблемой сельского хозяйства является борьба с заболеваниями растений, вызванными фитопатогенными микроорганизмами и увеличение качества и урожайности экономически ценных культур. Одной из главных проблем развития сельского хозяйства является использование удобрений разного рода с целью получения знатного урожая и наиболее стойких растений к неблагоприятным условиям. Используют органические, минеральные, либо комплексные удобрения, которые универсальны и удобны в использовании, важный недостаток в высокой цене препаратов, изменение свойств почвы, недостаточности для полноценного питания растений в связи быстрым вымыванием. К числу агротехнических приемов в борьбе с микозами растений относят выбор опрыскивания их биологическими и химическими фунгицидными препаратами, растворы которых после нанесения не дают спорам прорастать и предохраняют ее от заражения. Данные методы являются высокочувствительными, но в то же время дорогостоящими, в связи с чем, в решении проблем сельского хозяйства актуальной задачей является постоянный поиск новых агентов, способных подавлять рост патогенных микроорганизмов. В связи с этим, целью данной работы явилось создание биопрепарата на основе метаболитов *P. vagans* 3.2. для предотвращения заболеваний экономически значимых растений.

Из почв лесного массива Республики Татарстан выделен и идентифицирован штамм *Pantoea vagans* ВКПМ: В11689 (3.2). Показано, *P.vagans* секрецируют в окружающую среду метаболиты, такие как сидерофоры, цианиды, ИУК, способствующие росту растений и подавлению фитопатогенных микромицетов. Определена продукция индолилуксусной кислоты( ИУК ). Максимальный уровень биосинтеза ИУК был установлен на среде dLB при pH 7.0 и составлял 29 мкг/мл. При исследовании биосинтеза ИУК на среде LB, pH не оказывал влияния на продукцию ауксина – при pH 5.0 и 7.0 уровень продукции ИУК не менялась в течение времени культивирования и составлял примерно 21-22 мкг/мл.

Метод Арноу использовали для детекции сидерофор катехолового типа на жидкой среде M9 с внесением бипиридила. Среду M9, содержащую 5  $\mu$ M FeSO<sub>4</sub>, использовали в качестве контроля. Сидерофоры катехолового типа в концентрации 26,78  $\mu$ M были задетектированы после 4ч выращивания штамма *P. vagans* 3.2 на жидкой среде M9. Максимальная продукция сидерофор (82,05  $\mu$ M) приходилась на 28ч культивирования. Формирование минимальной зоны просветления (0,7 см) на CAS-агаре штаммом *P. vagans* 3.2 происходило через 16 часов инкубации при 37°C. Максимальная зона просветления (2,0 см) наблюдалась на трети сутки инкубации. В качестве контроля был использован штамм *Salmonella typhimurium*.

Кроме того, *P. vagans* экскретирует в окружающую среду гидролитические ферменты, участвующие в процессе разложения труднодоступных соединений фосфора, необходимого для роста и накопления биомассы растений. Создание биоудобрений на основе данного бактериального штамма и его метаболитов может служить базисом инновационных микробных агробиотехнологий для решения проблем, связанных с заболеваниями растений, вызванных фитопатогенными микроорганизмами и недостатком питательных элементов. Биопрепарат данного типа найдет широкое применение во всех сельскохозяйственных отраслях и в растениеводстве.

## ВЛИЯНИЕ МОЧЕВИНЫ НА ПОДВИЖНОСТЬ И БИОПЛЕНКООБРАЗОВАНИЕ ШТАММОВ *SERRATIA MARCESCENS*

Кабанов Д.А. Марданова А.М.

*ИФМиБ КФУ, Казань, Россия*

*dac100@mail.ru*

*Serratia marcescens* является возбудителем различных инфекций и обладает различными факторами вирулентности. Известно, что подвижность и биопленкообразование условно-патогенных бактерий регулируется различными механизмами и зависит от многих факторов. Показано, что мочевина может активировать разные факторы вирулентности энтеробактерий.

Целью работы является характеристика подвижности и биопленкообразования у дикого штамма *S.marcescens* и мутанта по эффлюкс системе MacAB в присутствии в среде мочевины.

Плавающую подвижность почвенного штамма *S.marcescens* SM6 и мутанта по эффлюкс-системе *S.marcescens* macAB<sup>-</sup> исследовали при 30°C на среде LBA (0.33% агара). Культивирование биопленок исследуемых штаммов *S.marcescens* проводили при 30 °C в 24-лучочных полистироловых планшетах на среде LB и LB, содержащей 50 мМ мочевины. Оценивали плотность биопленки путем окрашивания 0,1% генциан фиолетовым.

Было показано, что подвижность мутантного штамма на среде LBA снижается на 40% в сравнении с диким штаммом. Мочевина в среде приводила к сильному ингибираванию подвижности обоих штаммов. Так подвижность дикого и мутантного штаммов ингибировалась на 90 и 80% соответственно. Плотность биопленок оценивали на 3 и 6 сутки культивирования. Оба штамма одинаково образовывали биопленки на третьи сутки культивирования на контрольной среде. В присутствии мочевины на третьи сутки роста образование биопленок у обоих штаммов снижалось: у дикого штамма на 30% и мутанта на 18%. Однако на 6 сутки культивирования плотность биопленок у штаммов значительно различалась: плотность биопленки дикого штамма была на 25% выше, чем у мутанта. Плотность биопленок на среде с мочевиной на 6 сутки роста повышалась у обоих штаммов в сравнении с контролем: у дикого штамма на 25%, а мутанта на 10%. Показано, что мочевина в среде приводит к ингибированию биопленкообразования на ранних фазах и повышению эффективности образования биопленок при длительном культивировании бактерий. Эффективность биопленкообразования у дикого штамма повышалась на 25%, а мутанта на 10%.

Таким образом, показано, что мочевина сильно ингибирует подвижность штаммов *S. marcescens* и влияет на динамику образования биопленок. Инактивация эффлюкс системы MacAB влияет на подвижность бактерий и снижает влияние мочевины на биопленкообразование.

## РАЗРАБОТКА НОВОЙ МИЦЕЛЛЯРНОЙ ФОРМЫ МЕТИЛПРЕДНИЗОЛОНА

Камалов М.И., Данг Т.В.Ч., Лыонг Т.З., Абдуллин Т.И.

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

*kamalovmi@gmail.com*

Глюкокортикоиды широко используют для лечения спектра заболеваний благодаря их модулирующему влиянию на обмен веществ и иммунную систему, противовоспалительному и противоотечному действию [1]. Метилпреднизолон (МП) является единственным разрешенным в клинической практике препаратом для лечения острой травмы спинного мозга, однако в повышенных дозах МП обладает серьезными побочными эффектами [2]. Актуальной задачей является разработка новых фармацевтических форм МП и других кортикоидов, обладающих улучшенными фармакокинетическими свойствами и пониженной токсичностью.

Целью работы явилась разработка и исследование новой мицеллярной формы МП. Определены условия, при которых МП образует самоформирующиеся мицеллы с амфи菲尔ными сополимерами этиленоксида (ЭО) и пропиленоксида (ЭО). Формирование композиционных мицелл подтверждало методом динамического рассеяния света (ДРС). По данным ДРС гидродинамический диаметр мицелл для композиции три- и двуфункционального сополимеров ЭО и ПО составил 16 и 30 нм соответственно. Полученные мицеллы характеризуются низким значением индекса полидисперсности (0.15) и высокой стабильностью при разбавлении.

Биодоступность мицеллярной формы МП оценивали *in vitro* с помощью МТТ-теста на клетках нейробластомы человека (SH-SY5Y) в нетоксичных концентрациях амфи菲尔ного полимера. Установлено, что по сравнению с исходным МП его мицеллярная форма обладает большей цитотоксичностью, предположительно, вследствие ее усиленной проникающей способности через клеточную мембрану. Результаты показывают, что разработанная мицеллярная форма МП является перспективным препаратом, который может найти применение для лечения ряда заболеваний.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-54-10059 и в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета.*

1. E.D. Hall, J. M. Braughler. *Surg Neurol.* 1982, **18(5)**, 320-327.
2. M.I. Kamalov, I.A. Lavrov, A.A. Yergeshov, Z.Y. Siraeva, M.E. Baltin, A.A. Rizvanov, S.V. Kuznetcova, N.V. Petrova, I.N. Savina, T.I. Abdullin. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2016, **140(1)**, 196-203.

## ЦИТОТОКСИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ ЭКСТРАКТОВ РАСТЕНИЙ СЕМЕЙСТВА ASPARAGACEAE НА КЛЕТКИ КАРЦИНОМЫ КИШЕЧНИКА ЧЕЛОВЕКА

Камалова Я.Н., Зеленихин П.В.

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

*yazgulen@mail.ru*

Известно, что лекарственные растения являются источником новых перспективных препаратов для противоопухолевой терапии [1]. В связи с вышесказанным, целью нашего исследования явилась оценка цитотоксического действия экстрактов различных частей растений семейства *Asparagaceae* (листьев и корневищ *Sansevieria cylindrica* и *S. trifasciata* (подсемейство *Nolinoideae*); листьев и клубней *Polianthes tuberosa*, листьев *Yucca filamentosa* и *Furcraea gigantea* (подсемейство *Agavoideae*) на клеточные линии адено-карциномы двенадцатиперстной кишки человека (HuTu80) и карциномы сигмовидной кишки (Colo320).

Клетки культивировали на средах RPMI 1640 (Colo320) и DMEM (HuTu 80), содержащих 10% эмбриональной сыворотки телят, 2мМ глутамина и 100 ед./мл пенициллина и стрептомицина, при 37°C во влажной атмосфере с 5% CO<sub>2</sub> с добавлением экстрактов в концентрациях 50 и 100 мкг/мл в течение 4 часов. Цитотоксическое действие водных растворов растительных компонентов, полученных из биомассы растений экстракцией метанолом с последующим упариванием при пониженном давлении, оценивали с использованием проточного цитофлуориметра BD FACSCanto II при окрашивании клеток йодидом пропидия.

Показано, что компоненты экстрактов листьев и корневищ *S. cylindrica* и *S. trifasciata* во всем диапазоне исследуемых концентраций не проявляли цитотоксическое действия по отношению к клеточным линиям HuTu80 и Colo320, в отличие от экстрактов полученных из других исследованных растений. Наиболее выраженным цитотоксическим действием обладали экстракты листьев *P. tuberosa* и *F. gigantea*. Обработка клеток HuTu80 данными экстрактами в концентрации 50 мкг/мл в течение 4 ч приводила к гибели 62% и 56,3% соответственно, при концентрации экстрактов 100 мкг/мл за указанное время гибли более 92% клеток. При обработке экстрактами листьев *P. tuberosa* и *F. gigantea* в концентрации 50 мкг/мл клеток линии Colo320 через 4 ч инкубации гибли 63,7% и 43,4% клеток, в концентрации 100 мкг/мл – 98,1% и 86,2% клеток, соответственно. Экстракты клубней *P. tuberosa* и листьев *Y. filamentosa* обладали меньшей цитотоксичностью, обработка данными экстрактами в концентрации 50 мкг/мл приводила к гибели 41,2% и 33,3% клеток HuTu80; 30,2% и 26,2% клеток Colo320, соответственно. При использовании экстрактов в концентрации 100 мкг/мл гибли 87,55% и 64,3% клеток HuTu80 и 64,55% и 59,65% клеток Colo320, в то время как в вариантах без обработки экстрактами значения данного показателя не превышали 2%.

Таким образом, установлено, что компоненты спиртовых экстрактов *P. tuberosa*, *Y. filamentosa* и *F. gigantea* оказывают острое цитотоксическое действие на клетки карциномы кишечника человека и могут являться источником перспективных агентов для терапии онкопатологий желудочно-кишечного тракта.

1. Unnati S., Ripal S., Sanjeev A., Niyati A. Novel anticancer agents from plant sources. *Chin. J. Natur. Med.*, 2013, **11(1)**, 16-23.

## **СХЕМЫ ПРОВЕДЕНИЯ КЛИНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕПАРАТОВ И МЕТОДОВ ЛЕЧЕНИЯ, ОСНОВАННЫЕ НА ПРОЦЕДУРАХ СТАТИСТИЧЕСКОГО ОТБОРА**

Кареев И.А., Салимов Р.Ф.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань,  
Россия*

*kareevia@gmail.com*

При планировании схемы проведения клинических испытаний новых медицинских препаратов и методик лечения бывает важно минимизировать количество испытаний как с целью уменьшения расходов на проведение исследования, так и для уменьшения рисков для испытуемых [1]. Математической основной для такого рода оптимизации выступают процедуры статистического отбора популяций, целью которых является нахождение наилучшего из испытуемых объектов среди нескольких за минимальное число шагов.

В список актуальных задач по развитию данного подхода входит исследование оптимальных свойств и характеристик процедур, в частности, нижних границ для среднего объёма выборки, требуемых для гарантийного вывода. На основе оригинальных идей были построены нижние границы для основных моделей, представляющих практический интерес, таких как нормальная, биномиальная, мультиномиальная [2]. Схожие проблемы в более общей байесовской постановке решались в работе [3].

Особый интерес вызывает возможность применения нижних границ в качестве критерия недостаточности имеющегося объёма наблюдений для гарантийного отбора наилучшего из испытуемых объектов. Это позволяет оценить принципиальную экономическую целесообразность клинического испытания на самых ранних этапах планирования.

1. Kosorok M.R., Moodie E.E. Adaptive Treatment Strategies in Practice: Planning Trials and Analyzing Data for Personalized Medicine (Vol. 21). SIAM. 2015.
2. Kareev I.A. Lower bounds for average sample size and efficiency of sequential selection procedures. *Theory of Probability and its Applications*. 2013. **57(2)**. 227-242.
3. Salimov R.A Sequential d-Guaranteed Test for Distinguishing Two Interval Hypotheses. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2016, **37(4)**, 500-503.

## ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ ПРОМОТОРОВ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО СТРЕССА БАКТЕРИЙ ПРИ ФАГОЦИТОЗЕ

Каримов И.Ф.

*ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет», Оренбург, Россия*

*ifkarimov@yandex.ru*

Воздействие свободных радикалов на бактериальные клетки ведет к активации защитных механизмов, контролируемых регуляторами *soxRS* и *oxyR* [1]. Такое состояние может сформироваться как в абиотических условиях – при воздействии дыхательных ядов, металлов переменной валентности, так и в биологических системах. В последнем случае наиболее типичным является процесс фагоцитоза, одним из ключевых механизмов реализации которого является генерация активных форм кислорода и азота [2].

Использование рекомбинантных люминесцирующих штаммов *E.coli* MG1655 с плазмидами *pSoxS::lux* и *pKatG::lux* позволило определить характер и интенсивность воздействия свободных радикалов при контакте с нейтрофилами и моноцитами человека. Бактериальные штаммы были культивированы до ранней экспоненциальной фазы и опсонизированы нормальным иммуноглобулином, а фагоциты выделены из цельной крови на двойном градиенте фиколл-верографин. Процедура измерения производилась в среде 199 в течение двух часов на люминометре LM-01T (Immunotech, Чехия).

Установлено, что наибольший уровень активации наблюдается для промотора *katG* при контакте с нейтрофилами, что определяется особенностью роли данной группы клеток в работе иммунной системы. С другой стороны, экспрессия промотора *soxS* была в целом ниже, однако более специфична в ответ на воздействие моноцитов. Сопоставление свечения бактериальных штаммов и хемилюминесценции выявило сонаправленность в системе *katG* – люминол, но не *soxS* – люминол. Полученные данные позволяют понять характер восприятия активных метаболитов кислорода и азота бактериальными клетками при их фагоцитозе.

1. Seo S.W., Kim D., Szubin R., Palsson B.O. *Cell Rep.*, 2015, **12**, 1289-1299
2. Yang P. et al. *Free Radic. Biol. Med.*, 2014, **70**, 54-67

## БИОКАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИНОВЫХ ПРОТЕАЗ, ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Королева В.А., Холявка М.Г., Ольшанникова С.С., Артюхов В.Г.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

*koroleva\_victoria@bk.ru*

Иммобилизованные ферменты широко используются в пищевой промышленности и медицинской сфере. Правильно подобранные условия сорбции энзимов на нерастворимых носителях способствуют сохранению их высокой каталитической активности.

В качестве объектов исследования были выбраны фицин и папаин (Sigma), субстратом для гидролиза служил азоказеин (Sigma), носителями для иммобилизации – кислоторастворимые среднемолекулярный ( $M_r=200$  кДа, степень деацетилирования = 82 %) и высокомолекулярный ( $M_r=350$  кДа, СД=94,85 %) хитозаны (ЗАО «Биопрогресс»). Для сорбции ферментов на матрицах кислоторастворимых хитозанов были использованы следующие буферные системы: глициновый, трис-глициновый, ацетатный, фосфатный, цитратный, боратный буфер с добавлением KCl, боратный буфер без добавления KCl, карбонатный и трис-HCl буферы.

Анализ содержания белка (мг на г носителя), общей (ед на мл раствора) и удельной (ед на мг белка) активности показал, что для иммобилизации фицина на матрицах кислоторастворимых среднемолекулярного и высокомолекулярного хитозанов оптimalен глициновый буфер со значением pH 10.0 и 8.6 соответственно. Для сорбции папаина на матрицах среднемолекулярного и высокомолекулярного хитозанов оптимальным буфером также является глициновый со значением pH 9.0 и диапазоном pH 8.6-10.0 соответственно.

Следующим этапом наших исследований было изучение физико-химических и кинетических характеристик гетерогенных биокатализаторов на основе фицина и папаина, иммобилизованных на матрице кислоторастворимых хитозанов. Оптимальными для функционирования обоих ферментов в свободном и иммобилизованном состоянии являются следующие условия: pH 7,5 и концентрация субстрата 0,4 мМ. Максимум каталитической активности растворимый и гетерогенные препараты фицина проявляли при 37 °C, папаина – при 60 °C.

## Регуляция метаболизма ароматических соединений у Betaproteobacteria

Куанышбаев А.<sup>a</sup>, Суворова И.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Отделение Биологии, Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань, Россия

<sup>b</sup> Research and Training Center on Bioinformatics, Institute for Information Transmission Problems RAS (The Kharkevich Institute), Moscow, Russia.

*amirkuanishbaev@gmail.com, inn1313@yandex.ru*

**Введение.** Исследование метаболизма ароматических соединений играет важную роль, ведь микробная биодеградация – многообещающий вид новых, инновационных технологий эффективного разложения токсичных органических загрязнителей окружающей среды, в том числе соединений, содержащихся в нефти. Целью нашей работы было изучение регуляции метаболизма ароматических соединений у Betaproteobacteria методами сравнительной геномики. В качестве объекта исследования были выбраны транскрипционные факторы: AphS/BphS (метаболизм фенола и бифенола), CatR (метаболизм катехола), ClcR и TfdR(S/T) (метаболизм хлорокатехола), TbuT (метаболизм толуола), BenR (метаболизм бензоата).

**Методы.** Для поиска ортологов и определения геномного контекста использовались BLAST и база данных Microbes Online. Построение выравниваний промоторных областей генов осуществлялось при помощи MUSCLE. Выявление мотивов связывания регуляторов проводилось с помощью метода филогенетического футпринтинга. Построение PWM и реконструкция регулонов осуществлялась при помощи веб-сервера RegPredict.

**Результаты.** Для каждого регулятора были реконструированы соответствующие регулоны, в частности, были идентифицированы их новые члены, например, предполагаемый транспортер бензоата *livKHMFG*, метилмуконолактон изомераза *tmlIJ* и т.п.

Была показана вариабельность регуляции даже у близких видов, а также сложная взаимосвязь между различными регуляторами метаболизма ароматических веществ.

## ВЛИЯНИЕ ДИТИОФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГЛУТАТИОНА НА ОПУХОЛЕВЫЕ КЛЕТКИ ЛИНИИ РС-3

Кузнецова Е.В., Ахмадишина Р.А., Садриева Г.Р., Сабирзянова Л.Р., Ахмедова Г.Р.  
Низамов И.С., Низамов И.Д., Абдуллин Т.И.

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

*tajna92@mail.ru*

Активные формы кислорода (АФК) вовлечены в развитие опухолевых заболеваний. Избыточная продукция внутриклеточных АФК вызывает перекисное окисление липидов, повреждение клеточных мембран и окислительную модификацию белков и нуклеиновых кислот. Для антиоксидантной защиты клеток млекопитающих используются тиолсодержащие молекулы, и прежде всего, трипептид глутатион [1,2]. Мы исследовали биологические свойства *in vitro* новых производных глутатиона, модифицированных дитиофосфорными кислотами с О-алкильными и О-циклическими заместителями. По данным DPPH-теста с использованием хромогенного индикатора 2,2-дифенил-1-пикрилгидразила дитиофосфорилированные производные глутатиона обладают почти в 10 раз большей радикал-связывающей активностью по сравнению с немодифицированным глутатионом. По данным MTT-теста в отличие от исходного глутатиона, усиливающего пролиферацию клеток, его дитиофосфорилированные производные проявляют цитотоксическую активность, более выраженную для клеток рака простаты (линия РС-3), чем для первичных фибробластов кожи человека. Мы установили влияние структуры О-алкильных и О-циклических заместителей дитиофосфорных кислот на антиоксидантную и цитотоксическую активность дитиофосфорилированных производных глутатиона при действии на опухолевые клетки РС-3. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности исследований дитиофосфорилированных производных глутатиона – потенциальных лекарственных средств.

*Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета.*

1. Traverso N. et al. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2013, ID 972913.
2. Klaunig J.E., Kamendulis L.M. *Ann. Rev. Pharmacology Toxic*, 2004, **44**, 239-267.

## ПРИМЕНЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ АДАПТОМЕТРИИ ПРИ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ТИМПАНОМЕТРИИ

Кумова Д.М., Кумов А.М.

*ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия*

*kumova\_dasha@mail.ru*

В настоящее время в медицинской практике стала широко использоваться корреляционная адаптометрия. При этом был отмечен эффект изменения уровня корреляционной связи между физиологическими параметрами организма при воздействии внешних условий на человека [1].

Корреляционная адаптометрия используется при анализе стрессоустойчивости людей в нестандартных ситуациях, при проведении диагностики сердечно сосудистой системы, при проведении диетотерапии.

Тимпанометрия является одним из методов объективной оценки слуха, которая в последнее время имеет широкое распространение в клинической аудиологии. Она представляет собой комплекс клинических тестов, основанных на измерении импеданса среднего уха [2-4].

Применительно к системе тимпанометрии, можно выделить четыре важных параметра: объем наружного слухового прохода, пик комплианса, давление пика и ширина тимпанограммы. Каждый из этих параметров несет информацию о состоянии структуры среднего уха.

Например, пик комплианса представляет собой амплитуду пика тимпанометрической кривой. Непрямым показателем внутрибарабанного давления является давление пика, в норме от 50 до -100 декаПа. Ширина тимпанограммы является показателем наличия экссудата в среднем ухе. А по объему наружного слухового прохода можно говорить о том, есть ли перфорация структур [2].

Поэтому применение корреляционной адаптометрии и построение корреляционных плеяд позволяет без большого количества вычислений определять наличия отита у людей, а также другие заболевания структур среднего уха.

1. Седов К.Р., Горбань А.Н., Петушкива Е.В., Манчук В.Т., Шаламова Е.Н. Корреляционная адаптометрия как метод диспансеризации населения. *Вестник АМН СССР*. 1988, 5, 69-75.
2. Кочкин Р. В. Импедансная аудиометрия. М.: Медицина, 2006, 48 с.
3. Альтман Я.А., Тавартиладзе Г.А. Руководство по аудиологии. М.: ДМК Пресс, 2003, 360 с.
4. Джадек Б.У., Старк Э.К. Секреты оториноларингологии. Пер. с англ. М.: СПб.: БИНОМ – Невский диалект, 2001, 624с.

## ИНВАЗИВНАЯ СПОСОБНОСТЬ БАКТЕРИЙ *PROVIDENCIA STUARTII* И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГРИМЕЛИЗИН-ПОДОБНОЙ МЕТАЛЛОПРОТЕАЗЫ

Курмашева Н.Р., Марданова А.М.

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

*naziya1993@mail.ru*

Актин участвует в важнейших процессах жизнедеятельности клетки, таких как подвижность, цитокинез, транспорт везикул и органелл, клеточная сигнализация, а также создание клеточных связей и поддержание формы клеток. Известно, что при проникновении бактерий в клетку-хозяина происходит активация ее сигнальной системы и реорганизация цитоскелета. Поэтому факторами вирулентности могут быть бактериальные белки, специфичные к актину, в частности, металлопротеазы, подобные гримелизину. Целью работы является исследование способности к инвазии условно-патогенных бактерий *Providencia stuartii* и идентификация в их геноме гена, гомологичного гримелизину.

В работе использовали клинический изолят *P. stuartii* NK. Показали, что бактерии способны инвазировать в эукариотические клетки линий HeLa-M и A549. Также установили, что способность проникать в клетки зависит от инфицирующей дозы и фазы роста бактерий. Исследовали актинолитическую активность бактериального лизата: актин расщепляется ограниченно с образованием фрагментов с молекулярной массой 34 и 30 кДа. С помощью программы BLAST в геноме аннотированного штамма *P. stuartii* MRSN 2154 обнаружили ген гипотетической металлопротеиназы, аминокислотная последовательность которого обладала 42% гомологией с гримелизином *S. grimesii*. Основываясь на последовательности гена, были сконструированы праймеры, которые использовали для идентификации гомолога в геноме штамма *P. stuartii* NK. Секвенирование продукта ПЦР-амплификации показало, что у исследуемого штамма присутствует ген, обладающий 99% гомологией с протеазой аннотированного штамма. Металлопротеаза штамма *P. stuartii* NK состоит из 382 аминокислотных остатков, что соответствует теоретическому размеру белка 43.58 kDa.

Таким образом, показали, что бактерии *P. stuartii* NK способны проникать в эукариотические клетки и в их геноме идентифицирован ген-гомолог актин-специфичной металлопротеазы гримелизина.

## ПЕРСПЕКТИВНОЕ ЛЕКАРСТВЕННОЕ РАСТИТЕЛЬНОЕ СЫРЬЕ – МОРИНДА ЦИТРУСОЛИСТНАЯ

Кутлушкина А.У.

Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия,  
Санкт-Петербург, Россия

*alina.kutlushina@pharminnotech.com*

Моринда цитрусолистная, известная как Нони, обладает антибактериальным, противовирусным, противогрибковым, противоопухолевым, противоглистным, болеутоляющим, гипотензивным, противовоспалительным и иммуномодулирующим действиями [1].

Целью исследования явилось определение числовых показателей качества и условия экстрагирования корней моринды цитрусолистной, после чего разработать технологию получения и стандартизации сухого экстракта. Объектом исследование служили корни моринды цитрусолистной собранные и высушенные на территории страны Ганы весной 2015 года. Был проведен товароведческий анализ корней растения, определены его технологические свойства и изучен макро- и микроэлементный состав методом ИСП-МС. Наибольший выход БАВ из корней моринды цитрусолистной достигается при экстрагировании спиртом этиловым 70 % (30,07 %), общее содержание тяжелых металлов 0,00033 мг/г. Экстрагирование сырья проводилось методом мацерации с перемешиванием 200 об/минуту. Было выявлено, что оптимальный режим экстрагирования достигается при модуле 1:30 и продолжительности настаивания 60 минут. Далее осуществлялось получение сухого экстракта корней моринды цитрусолистной до содержания остаточной влаги не более 5 % и стандартизация сухого экстракта методом ТСХ и СФ. Зафиксировано наличие в сухом экстракте моринды цитрусолистной дубильных веществ, антрахинонов и не менее 12 % флавоноидов в пересчете на рутин. Общее содержание тяжелых металлов в сухом экстракте составляет 0,00417 мг/г, что удовлетворяет нормам содержания тяжелых металлов и мышьяка в лекарственных растительных препаратах по ГФ XIII издания.

Таким образом, изучена возможность использования ЛРС – моринды цитрусолистной, в разработке технологической схемы производства сухого экстракта, а так же определения показателей, позволяющих стандартизовать сырье и сухой экстракт из нее с учетом современных требований, предъявляемые к качеству ЛРС и препаратов на его основе.

1. Singh D.R. Morinda citrifolia L. (Noni): A review of the scientific validation for its nutritional and therapeutic properties. *Journal of Diabetes and Endocrinology*. 2012, **3(6)**, 78-85.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ БИОПЛЕНОК НА МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ БАЦИЛЛ: ПУТИ РЕГУЛЯЦИИ И ВЛИЯНИЕ ФАКТОРОВ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

Динь Л.Т., Рудакова Н.Л., Шарипова М.Р.

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

*natalialrudakova@mail.ru*

Биопленки – сообщества микроорганизмов, объединенных внеклеточным матриксом. Инфекции, вызванные такими бактериями трудно поддаются лечению из-за способности биопленок противостоять широкому спектру внешних факторов [1]. Особый интерес представляет идентификация регуляторных систем, участвующих в процессе создания биопленок. *Bacillus subtilis* – модель для исследования процесса образования биопленок [2]. Для выяснения путей регуляции образования биопленок *B. subtilis* нами была исследована способность к формированию биопленок у природного изолята *B. subtilis* 168, а также у сконструированных на его основе мутантных штаммов с нокаутированными генами регуляторных белков: AbrB, DegU, CcpA и SpoOA. Дикий тип *B. subtilis* 168 на жидкой среде образует биопленки с максимумом на 48 час роста культуры. pH-Оптимум для образования биопленок диким штаммом находится в пределах 7.4-8.0. Температурный оптимум находится в диапазоне от 22 °C до 45 °C. Уровень образования биопленок регуляторными мутантами по генам *abrB*, *degU*, *ccpA*, *spoOA* в среднем на 40% -50% ниже уровня дикого штамма. Это указывает на то, что глобальные системы регуляции играют роль в процессе формирования биопленок штаммом, но ни одна из систем не является критической для образования биопленок. Температурный и pH оптимумы для мутантных штаммов такие же, как и у природного штамма.

*Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности К(П)ФУ за счет средств субсидии, выделенной для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.*

1. J.D. Bryers. *Biotechnol Bioeng*. 2008, **100**, 118.

2. H. Vlamakis, Y. Chai, P. Beauregard, R. Losick, R. Kolter *Nat. Rev. Microbiol*, 2013, **11**(3), 157-168.

## ГАЛОТОЛЕРАНТНОСТЬ РИЗОСФЕРНЫХ РОСТОСТИМУЛИРУЮЩИХ БАКТЕРИЙ *BREVIBACTERIUM IODINUM MG-1* И *PSEUDOMONAS PUTIDA MG-2*

Лутфуллин М.Т., Хадиева Г.Ф., Мочалова Н.К., Марданова А.М.

Институт фундаментальной медицины и биологии К(П)ФУ, Казань, Россия

*lutfullin.marat2012@yandex.ru*

По данным на 2010 год в России площадь засоленных почв составляет около 54 млн га, т.е. 25% всех пахотных земель и эта цифра постоянно увеличивается как прямое следствие орошения [1]. Физиологическими последствиями засоления почв являются подавление роста и развития растений и ингибирование прорастания семян, энергии всхожести, цветения и завязывания. Актуальным является исследование галотолерантности ростостимулирующих бактерий.

Целью данной работы было изучение ростостимулирующей активности и галотолерантности ризосферных бактерий *Brevibacterium iodinum MG-1* и *Pseudomonas putida MG-2*.

**Материалы и методы.** Исследование ростостимулирующей активности бактерий проводили в модельных опытах на растениях томата. Стерильные семена томата перед посадкой в стерильную почву инокулировали трёхсуточной супензией бактерий ( $10^7$  КОЕ/мл) в течение 1 часа. В качестве контроля использовали семена томата сорта «Дубравная» не обработанные бактериальной супензией. Для исследования галотолерантности бактерии культивировали на среде LB, содержащей 5.0, 7.0 и 10% NaCl. Оптическую плотность культуры определяли при 590 нм на микропланшетном спектрофотометре xMarkTM (Bio-RAD).

**Результаты.** В модельных опытах на растениях томата была исследована ростостимулирующая активность штаммов *B. iodinum MG-1* и *P. putida MG-2*, выделенных ранее из ризосфера картофеля. Было показано, что *B. iodinum MG-1* и *P. putida MG-2* стимулируют рост и развитие наземной части на 13 и 5%, корневой системы на 15 и 7%. Показано, что штаммы *B. iodinum MG-1* и *P. putida MG-2* способны расти при повышенных концентрациях соли в среде культивирования, хотя накопление биомассы на среде с 5%, 7% и 10% NaCl на 24 час культивирования снижалось по сравнению с контролем (среда LB). В присутствии 5% NaCl в среде оптическая плотность культуры *B. iodinum MG-1* снижалась на 28%, *P. putida MG-2* всего на 18% в сравнении с контролем. Рост обоих штаммов ингибировался в присутствии 10% соли. Полученные данные свидетельствуют о галотолерантности исследуемых бактерий.

Таким образом, бактерии *B. iodinum MG-1* и *P. putida MG-2* способны стимулировать рост томатов и рости в присутствии 5-7% NaCl, что свидетельствует об их высокой галотолерантности. Это свойство позволяет использовать данные штаммы в ростостимуляции растений в условиях засолённых почв.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной К(П)ФУ для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект 14-83).*

1. F. Mapelli, R. Marasco, E. Rolli, M. Barbato, H. Cherif, A. Guesmi, I. Ouzari, D. Daffonchio, S. Borin Potential for Plant Growth Promotion of Rhizobacteria Associated with Salicornia Growing in Tunisian Hypersaline Soils. *BioMed Research International*, 2013, **13**, 1-13.

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПОЗИЦИОННЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ЖЕЛАТИНА И ЦИНКА

Лыонг Т.З., Ергешов А.А., Садыкова Ф.Р, Абдуллин Т.И.

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

*luongthajduong@gmail.com*

Разработка высокоэффективных биоматериалов для лечения ран и ожогов является актуальной задачей для современной медицины и фармацевтики. Важной структурной основой биоматериалов являются белки внеклеточного матрикса – коллагены и желатины благодаря их биосовместимости. Ранее нами были разработаны макропористые гидрогели на основе желатина с улучшенными биологическими свойствами. Актуальной проблемой является разработка композиционных композиционных гидрогелей, содержащих микроэлементы, которые стимулируют регенерацию тканей и проявляют антимикробный эффект.

Получены экспериментальные образцы криогеля посредством химической сшивки желатина в условиях криополимеризации. Предложен подход по контролируемому и стабильному введению соединений цинка в состав криогеля на основе желатина с получением композиционного криогеля.

Структуру криогелей после лиофильной сушки анализировали методом SEM. Однокомпонентный криогель имеет макропористое строение с тонкими стенками, а композиционный криогель с цинком имеют меньшую пористость и утолщенные стенки. Результаты элементного анализа подтвердили присутствие цинка в криогелях. Методом LSCM исследована структура криогелей в гидратированном состоянии. Установлено, что криогели с цинком имеют однородную ячеистую структуру. С повышением содержания цинка, плотность стенок криогеля повышается, а размеры пор уменьшаются. Степень гидратации криогелей на основе желатина составляет от 8700 до 7600 %, что существенно превосходит степень гидратации обычных гидрогелей. Содержание воды в порах криогеля составляет более 90 % объема биоматериала. Вязкоупругие свойства криогелей исследованы методом ротационной реометрии. Введение ионов цинка повышает модуль упругости криогелей и их устойчивость к деформации. Результаты будут использованы для оптимизации структуры и характеристик содержащих цинк композиционных криогелей в качестве потенциальных биоматериалов.

*Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета с участием ООО «Биомедтех КФУ».*

**ОЦЕНКА СПОСОБНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО  
ПРОТИВОТУБЕРКУЛЕЗНОГО ПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНОГО  
ПИРИДИНА ОКАЗЫВАТЬ ВЛИЯНИЕ НА ВНУТРИКЛЕТОЧНЫЕ ПРОЦЕССЫ  
МОДЕЛЬНЫХ КЛЕТОК (*S.CEREVIAE*)**

Любина А.П., Агафонова М.Н., Штырлин Ю.Г.

*Научно-образовательный центр фармацевтики,  
Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

*aplyubina@gmail.com*

Микобактерия туберкулеза отличается высокой способностью вырабатывать устойчивость к лекарственным препаратам, в результате появляются резистентные формы туберкулеза. Такие формы не поддаются лечению известными лекарственными средствами. В следствии чего в настоящее время продолжаются поиски противотуберкулезных препаратов направленных на лечение лекарственно-устойчивого туберкулеза. В рамках настоящего исследования был разработан подход к созданию соединений, имеющих в своем составе фрагменты витамина В6, позволяющие соединению участвовать во внутриклеточных процессах возбудителя. Кроме того в структуру вещества внедрены фрагменты изониазида и фторхинолонов, обуславливающие противотуберкулезную функцию.

Таким образом, целью данной работы явилось исследование способности новых потенциальных противотуберкулезных препаратов на основе производных пиридина, содержащих фрагменты изониазида и фторхинолонов, оказывать влияние на внутриклеточные процессы модельных клеток (*S.cerevisiae*).

Методом серийных разведений на клинических штаммах *M.tuberculosis* была изучена способность исследуемых препаратов подавлять рост микобактерий. Способность полученных соединений оказывать влияние на ферментативные метаболические процессы была изучена на модельных клетках *S.cerevisiae*.

В ходе работы было показано, что исследуемые соединения действительно могут оказывать влияние на эндогенные циклы микобактерий туберкулеза. Кроме того были определены наиболее перспективные соединения, способные принимать участие в ферментативных реакциях модельных клеток на фоне высокой противотуберкулезной активности.

## ПРЕДСКАЗАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК НЕИЗВЕСТНЫХ БЕЛКОВ ПО ДАННЫМ MALDI-TOF МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Маркелов О.А.<sup>a</sup>, Богачев М.И.<sup>a</sup>, Каюмов А.Р.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> С.-Петербургский государственный электротехнический университет, С.-Петербург,  
Россия

<sup>b</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

OAMarkelov@etu.ru

MALDI-TOF масс-спектрометрия является широко распространенным инструментом для идентификации белков. При отсутствии известной последовательности белка однозначная идентификация невозможна, а предсказание структуры ограничено наличием известных гомологичных белков. Мы представляем статистический подход к прогнозированию ряда структурных и функциональных свойств неизвестных белков путем непосредственного анализа распределений масс остатков их протеолитического расщепления, полученных методом MALDI-TOF [1]. Вторичная структура белков лучше всего предсказывается при использовании специфического расщепления по позициям гидрофобных аминокислот (FILMV). Наилучшим ферментом, позволяющим осуществить данное расщепление, является Термолизин (AFILMV), который позволяет различать белки с доминированием  $\alpha$ -спиралей или  $\beta$ -складчатостей в их вторичной структуре с ~90% точностью. Клеточная локализация белков наилучшим образом предсказывается при использовании специфического расщепления по позициям аминокислот, специфичных по гидрофильности (DEHKNQR), реализуемое с применением GluC(phosphate)+LysC(DEK). Положение белка в клеточной мембране и характеристики его локализации (монотопический/трансмембранный, одно-/много- проходные) может быть предсказано с ~75% точностью с применением только одного расщепления, однако при комбинации 3-4 реагентов точность повышается до ~80%. Предложенный подход непараметрического статистического прогнозирования позволяет охарактеризовать неизвестные белки по данным их MALDI-TOF спектрометрии без реконструкции их первичной последовательности. Потенциальные области применения включают протеомные исследования организмов с недоступными геномными последовательностями.

1. Bogachev MI, Kayumov AR, Markelov OA, Bunde A. Statistical prediction of protein structural, localization and functional properties by the analysis of its fragment mass distributions after proteolytic cleavage. *Scientific Reports*. 2016. doi:10.1038/srep22286.

## ГЕМОЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ КЛИНИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТА *MORGANELLA MORGANII* НА СРЕДАХ РАЗНОГО СОСТАВА

Миннуллина Л.Ф., Марданова А.М

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

*masaco@mail.ru*

Известно, что порообразующие токсины условно-патогенных микроорганизмов способны вызывать гибель клеток эукариот [1]. Ранее нами было показано, что при совместном культивировании гемолитического штамма *M. morganii* 4 и культуры клеток HeLa на среде DMEM, содержащей 10% эмбриональной бычьей сыворотки, наблюдается серьезное нарушение структуры монослоя эукариотических клеток.

Целью данной работы стало определение влияния состава питательной среды на гемолитическую активность в культуральной жидкости клинического изолята *M. morganii* 4. Бактерии растали в течение 24 ч на средах LB, DMEM и DMEM с 10% эмбриональной бычьей сывороткой. Определение гемолитической активности проводили с использованием 2% суспензии эритроцитов человека [2]. Было показано, что наибольшая гемолитическая активность наблюдается на среде DMEM с сывороткой, а наименьшая – на среде DMEM без сыворотки, которая сохраняется на одном уровне ( $\approx 4$  ед/мл) в течение всего времени культивирования. Гемолитическая активность на среде LB достигала наибольшего значения на 3 ч роста ( $\approx 45$  ед/мл), после чего начинала снижаться. В этой же точке активность на средах DMEM и DMEM с сывороткой была в 10 и 1,5 раза ниже. Гемолитическая активность на среде DMEM с сывороткой достигала максимальных значений на 5 ч роста ( $\approx 61$  ед/мл), что в 5 и 14 раз превышало значения, полученные на средах LB и DMEM, соответственно. К 24 ч роста активность на всех средах снижалась до минимума, достигая значения примерно 3 ед/мл.

Таким образом, показано, что присутствие эмбриональной бычьей сыворотки в среде DMEM индуцирует синтез гемолизинов штаммом *M. morganii* 4, что может привести к нарушению структуры монослоя при кокультивировании бактерий и клеток эукариот.

1. F.C. Los, T.M. Randis, R.V. Aroian, A.J. Ratner. *Microbiol. Mol. Biol. Rev.*, 2013, **77**, 173-207.
2. B.W. Senior, C. Hughes. *J. Med. Microbiol.*, 1987, **24**, 17-25.

## БИОМЕХАНИКА ПОЛЗАЮЩЕГО МЕХАНИЗМА

Митрохова Д.В.

*Муниципальное бюджетное образовательное учреждение «Гимназия №5», Королёв  
(микрорайон Юбилейный), Московская область, Россия*

*dianaa2016@mail.ru*

В работах [1-3] изучались рычажные механизмы для передачи движения с возможностью реверса. Эти механизмы многозвенные, но в них обеспечивается одна степень свободы. Изучая большие молекулярные структуры с помощью механизмов-аналогов, был сделан вывод о наличии множества степеней свободы. Такой же вывод был сделан при изучении биомеханики ползающих организмов. Цель работы – создать устройство, способное передвигаться по различным поверхностям без отрыва от них, то есть ползающий механизм. Особенностью такого механизма является наличие нескольких степеней свободы, а не одной, как обычно мы это наблюдаем, например, в автомобилях. Ползающий механизм предложен и изготовлен в виде нескольких звеньев, число которых должно быть не менее трёх и может наращиваться до бесконечности. В результате получился механизм, похожий на гусеницу или змею. В каждом звене установлен электромагнит, но вид передачи энергии может быть другим, например гидравлическим или пневматическим. Механизм работает следующим образом. Первое звено отталкивается от других, преодолевая силу трения покоя, при этом задние звенья покоятся под действием силы трения. Потом отталкивается второе звено от задних звеньев и т.д. Когда середина цепочки переместится, то передняя часть станет тяжелее и будет покоиться под действием силы трения покоя, а задние звенья поочерёдно начнут подтягиваться к передней части. Управляющий блок в этой работе не рассматривается, переключение сигналов звеньев происходит вручную. Алгоритм управления очень простой, может быть реализован на простых логических микросхемах, не говоря о микроконтроллере.

1. Митрохова Д.В. Цепочки шарнирных механизмов П.Л.Чебышева / XXVII Международная инновационно-ориентированная конференция молодых учёных и студентов (МИКМУС-2015): Материалы конф. (Москва, 2-4 декабря 2015 г.). - М.: Изд-во ИМАШ, 2015. С.99.
2. Митрохова Д.В. Передача вращения цепочками механизмов П.Л.Чебышева / IX Всероссийский форум студентов, аспирантов и молодых учёных «Наука и инновации в технических университетах». – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет (НИУ), 27-30 октября 2015. – СпбГУ: Изд. Политехн. у-та. – ББК 30.1 Н34. С.105-107.
3. Митрохова Д.В. Рычажный привод тяжёлого оборудования в нефтедобыче / I Международная школа конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Биомедицина, материалы и технологии XXI века», 25-28 ноября 2015. – Казанский (Приволжский) федеральный университет. – Казань: Изд. К(П)ФУ, 2015, С.267

## ЭФФЕКТЫ НОВЫХ ФУРАНОНОВ В ОТНОШЕНИИ ПЛОТНОСТЬ-ЗАВИСИМЫХ ПРОЦЕССОВ ПРОКАРИОТ

Митько В.Е., Абрамова Д.С., Маргулис А.Б.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*vyacheslav.mitko@mail.ru*

Возможность использования QS регуляции в качестве потенциальной мишени для борьбы с инфекционными заболеваниями, а также способность фуранонов влиять на другие плотностно-зависимые процессы прокариот, является перспективным направлением исследований последних лет. Целью настоящей работы было оценить эффекты разных классов галогенированных фуранонов в отношении плотносто-зависимых процессов у прокариот. В связи с этим в работе решались следующие задачи: 1. Охарактеризовать изменение состояния мембранны и морфологии бактериальных клеток при действии фуранонов. 2. Описать изменение образования пигмента *Streptomyces violaceoruber* в присутствии фуранонов. 3. Определить влияние фуранонов на выделение антибактериальных веществ у *Streptomyces violaceoruber* в отношении *Micrococcus lysodeicticus*. Оценку текучести мембранны проводили с помощью флуоресцентного зондирования на спектрофлуориметре LS55 (PerkinElmer). Исследование состояния мембранны проводили по известной методике Ю.А. Владимира и Г.Е. Добрецова. Показано, что коэффициент эксимеризации пирена клеточной супензии без добавления фуранона  $F=0,438$ , коэффициент эксимеризации пирена клеточной супензии после добавления фуранона №9 в концентрации 0,1 мкг\мл, так как он обладал токсичностью,  $F=0,625$ , коэффициент эксимеризации пирена клеточной супензии после добавления фуранона №10 в концентрации 100 мкг\мл,  $F=0,946$ . Известно, что интенсивность эксимеризации обратно пропорциональна микровязкости мембранны. Иными словами, увеличение коэффициента эксимеризации пирена в присутствии фуранона свидетельствует о том, что они способны воздействовать на мембранны *Micrococcus lysodeicticus*. Мы может предположить, что происходит уменьшение микровязкости мембранны. В присутствии фуранона №3 на плотной агаризованной среде Гаузе насыщенность пигмента и выделение его в среду у *Streptomyces violaceoruber* снижается в сравнении с контролем. При наличии фуранона №2 в блоках плотной агаризованной среды Гаузе с *Streptomyces violaceoruber*, интенсивность выделения антибактериальных веществ у последнего снижается, в зависимости от концентрации фуранона. О чём свидетельствует уменьшение зон лизиса *Micrococcus lysodeicticus* в опытных вариантах по отношению к контролем.

## АНАЛИЗ СТАТИСТИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ ХАРАКТЕРИСТИК ВЗВП ПРИ МНОЖЕСТВЕННОМ ТЕСТИРОВАНИИ

Недава С.А.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань,  
Россия*

*nedava-sergei@yandex.ru*

В работе изучается влияние размера признакового пространства на характеристики критериев независимости. Рассматривается критерий, использующий преобразование Стьюдента для коэффициентов корреляции. Стандартная практика применения состоит в сравнении значений тестовой статистики для каждого изучаемого признака. Такая практика приводит к повышению уровня значимости, в результате чего слишком часто принимается решение о возможной связи между признаками, когда на самом деле такая связь отсутствует. Достижение заданного уровня значимости возможно с помощью процедуры Бонферрони, для которой уровень значимости выбирается обратно пропорционально количеству анализируемых гипотез. В данном случае количество проверяемых гипотез растет как  $p^2$ , где  $p$ —число признаков статистического обследования. Уже при небольших значениях  $p$  процедура Бонферрони приводит к резкому понижению мощности теста. В данной работе проводится анализ истинного уровня значимости множественного теста, основанного на преобразовании Стьюдента выборочного коэффициента корреляции. Методами стохастического моделирования находится вид распределения тестовой статистики (максимума выборочного коэффициента корреляции). Показывается, что это распределение не зависит от объема выборки, и эмпирически находится коэффициент преобразования для номинального уровня значимости, при котором фактический уровень значимости будет совпадать с номинальным. Проводится сравнение разработанной процедуры с процедурой Бонферрони. Предлагаемая процедура применяется к задаче выявления связей между различными характеристиками кривой вспышечного зрительного вызванного потенциала. Данные для этого исследования были собраны в двух группах пациентов различного возраста. По результатам статистического анализа выявлены некоторые группы характеристик с высокой степенью влияния.

1. Hochberg Y.A sharper Bonferroni procedure for multiple tests of significance. *Biometrika*. 1988, **75(4)**, 800-802.

## МОРФО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ М. SOLEUS И М. EDL У КРЫС ПОСЛЕ ИММОБИЛИЗАЦИИ И ХОЛОДОВОГО СТРЕССА

Нигметзянов И.Р.<sup>a,c</sup>, Тяпкина О.В.<sup>a</sup>, Малютина Л.В.<sup>c</sup>, Гусев О.А.<sup>a,c,d</sup>

<sup>a</sup>*Openlab «Экстремальная биология», КФУ, Казань, Россия*

<sup>b</sup>*Казанский институт биохимии и биофизики, КазНЦ РАН, Казань, Россия*

<sup>c</sup>*Институт Фундаментальной Медицины и Биологии, КФУ, Казань, Россия*

<sup>d</sup>*Институт RIKEN, Йокогама, Япония*

*islamka32@gmail.com*

Полеты человека в космос сопровождаются, как минимум, двумя видами стресса: гиподинамией (вследствие устранения функциональных нагрузок на мышцы конечностей) и холодовым стрессом (при несвоевременной встрече членов экипажа после приземления). Функциональная и опорная разгрузка мышц сопровождается атонией и атрофией мышечных волокон [1], в то время как воздействие пониженной температуры на организм млекопитающих, находящихся в условиях невесомости, благоприятно влияет на поддержание тонуса определенных типов мышц [2]. В связи с этим, целью настоящего исследования явился сравнительный анализ морфологии мышечных волокон мышц «медленного» и «быстрого» типов у крыс находящихся 14 суток в условиях иммобилизации задних конечностей и у крыс находящихся 14 суток в условиях холодового стресса.

Нами был проведен анализ площадей поперечного сечения мышечных волокон m. soleus и m. EDL у крыс трех групп: контрольной (n=6), антиортостатическое вывешивание задних конечностей [3] (n=6) и воздействие холодового стресса (n=6).

В ходе проведенных экспериментов было установлено, что в m. soleus иммобилизационный и холодовой стресс приводят к уменьшению средних значений площадей поперечного сечения мышечных волокон на 42% и 16% соответственно ( $p<0.05$ ). При этом в m. EDL достоверные изменения средних значений площадей поперечного сечения мышечных волокон отсутствовали. Полученные данные позволяют нам заключить, что m. soleus является более чувствительной к иммобилизационному и холодовому стрессу, чем m. EDL.

1. Л.И. Какурин, Б. С. Катковский, В. Георгиевский, В. М. Михайлов. Функциональные расстройства при гипокинезии у человека. *Вопросы курортная, физиотерапевтическая и лечебная физическая культура*. 1970, **1(1)**, 19-24.
2. C. Deng, W. Ping, Z. Xiangming, W. Ya Short-term, daily exposure to cold temperature may be an efficient way to prevent muscle atrophy and bone loss in a microgravity environment. *Life Sci Space Res (Amst)*. 2015, **5**, 1-5
3. E.R. Morey-Holton, R.K. Globus Hindlimb unloading rodent model: technical aspects. *J. Appl. Physiol.*, 2002, **92(4)**, 1367-1377.

## ВЭЖХ/МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОРТИКОСТЕРОИДОВ

Петрова Н.В.<sup>a,b</sup>, Данг Т.В.Ч.<sup>a</sup>, Камалов М.И.<sup>a</sup>, Лайков А.В.<sup>a</sup>, Абдуллин Т.И.<sup>a</sup>

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия  
Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН, Казань, Россия

*npetrova@inbox.ru*

Синтетические кортикоидные препараты, сходные по свойствам и действию с природными аналогами, на сегодняшний день широко используются в медицинской практике. Их действие направлено, в частности, на подавление воспалительного процесса, отека тканей и облегчение боли. К синтетическим кортикоидным препаратам относятся дексаметазон, преднизолон, метилпреднизолон и др. Эти препараты обладают более высокой активностью и вызывают меньше побочных явлений, чем природные [1].

Метилпреднизолон (МП) широко используется в качестве противовоспалительного агента. В сравнении с преднизолоном МП обладает меньшей минералокортикоидной активностью и сопутствующими побочными эффектами, что делает его применение предпочтительным [2].

Нами исследована возможность применения для количественного определения проникшего в клетки метилпреднизолона высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) с обращенной фазой сопряженной в одном случае с UV-детектором и в другом – с масс-спектрометром в качестве масс-анализатора и детектора (LS-MS/MS).

Была отработана методика выделения МП из клеток, выращенных *in vitro*, и обработанных препаратом метилпреднизолона. ВЭЖХ система с UV-детектором позволила подобрать условия оптимального выхода МП из хроматографической системы с использованием стандартных растворов МП с известными концентрациями. Однако для анализа количества МП, проникшего в клетки, в ряде случаев UV-детектирование было недостаточно чувствительным. Использование масс-спектрометра позволило уловить низкие концентрации целевого вещества в пробе (в диапазоне 10-600 нг/мл).

Таким образом, была опробована LS-MS/MS система для анализа содержания МП в клетках после экстраклеточного добавления препарата. Результаты будут использованы для определения содержания МП в органах и тканях.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-54-10059 и в рамках Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета.*

1. Liu D., Ahmet A., Ward L. *Allergy, Asthma & Clinic Immunol*, 2013, **9(30)**, 2-25.
2. Deshmukh C.T. *Indian J Dermatol Venereol Leprol*, 2007, **73**, 218-222.

## ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ И ФОТОИНУЦИРОВАННАЯ ТОКСИЧНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ $\text{LaF}_3:\text{Pr}$

Пудовкин М.С.<sup>a</sup>, Зеленихин П.В.<sup>a</sup>, Кораблева С.Л.<sup>a</sup>, Крашенинникова А.О.<sup>a</sup>,  
Низамутдиннов А.С.<sup>a</sup>, Семашко В.В.<sup>a</sup>, Тагиров М.С.<sup>a,b</sup>, Кикитсу Томока<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия  
<sup>b</sup> RIKEN, Wako, Saitama, 3510198 Japan

jaz7778@list.ru

Одним из важнейших областей применения наночастиц (НЧ) является биомедицина, где они используются, например, в фотодинамической терапии [1]. Исследовалась цитотоксичность (ЦТ) и НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) по отношению к клеткам карциномы сигмовидной кишки (*colo 320*), а так же фотоиндуцированная токсичность (ФТ) НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) по отношению к клеткам сальмонеллы (*S. typhimurium* TA 100). НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) были синтезированы методом со-осаждения в растворе. Размер НЧ составил  $21\pm5$  нм. Гидродинамические радиусы в физиологическом растворе (ФР) (0,9% NaCl) и биологической среде RPMI-1640 составили  $20,98\pm4,59$  нм и  $78,5\pm9,65$  нм соответственно. С помощью МТТ теста было выявлено, что НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) не проявляют свойств ЦТ по отношению к *colo 320* при концентрациях меньших, чем 1 мМ. ФТ взвеси НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) в ФР (0,9% NaCl) стимулировалась излучением импульсных лазеров ( $\tau=10$  нс,  $P=1,3$  мВт/см<sup>2</sup>) на длинах волн 473 нм, 532 нм, 605 нм и 750 нм. Исследования осуществлялись при концентрации *S. typhimurium* TA 100  $10^6$  клеток/мл и концентрация НЧ - 0,1 г/л. Выживаемость при излучении с длинами волн 473 нм, 532 нм, 605 нм и 750 нм составила 52%, 29%, 36%, 29% соответственно. В отсутствие НЧ выживаемость составила 62%, 61%, 48%, 46% соответственно. НЧ  $\text{LaF}_3:\text{Pr}$  (50%) проявляют свойство ФТ по отношению к *S. typhimurium* TA 100 и не проявляют свойств ЦТ по отношению к *colo 320* при концентрации меньше 1 мМ.

1. Pudovkin M.S., Korableva S.L., Krasheninnicova A.O., Nizamutdinov A.S., Semashko V.V., Zelenihin P.V., Alakshin E.M., Nevzorova T.A. *Journal of Physics*, 2014, **560**.

## ВЛИЯНИЕ ОКИСЛЕННЫХ СОПОЛИМЕРОВ И ИХ КОМПОЗИЦИЙ С ДОКСОРУБИЦИНОМ И ВИНБЛАСТИНОМ НА ОПУХОЛЕВЫЕ КЛЕТКИ

Радыгина А.А., Камалов М.И., Бондарь О.В., Абдуллин Т.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*anastasia.radygina@gmail.com*

В работе исследованы биологические свойства окисленных с использованием оксида хрома неионогенных амфи菲尔ных сополимеров этиленоксида (ЭО) и пропиленоксида (ПО) в качестве систем доставки лекарственных препаратов в клетки человека. Присутствие карбоксильных групп в окисленных сополимерах подтверждали методами ИК-спектроскопии и кислотно-основного титрования.

Химическое окисление амфи菲尔ных сополимеров избирательно повышает их цитотоксичность для опухолевых клеток линии РС-3 в 6.2 раз для Лапрола 6003 и в 10.7 раз для Лапрола 5003 относительно исходных сополимеров, но не изменяет активность сополимеров для первичных фибробластов кожи человека. По сравнению с Плуроником L61, окисленные сополимеры (Лапролы 6003 и 5003) в концентрации 0.1-10.0 мг/мл не обладают гемолитическим действием.

Методом проточной цитометрии с использованием флуоресцентного мембранных зонда *BODIPY FL C11* показано, что амфи菲尔ные сополимеры обладают различной способностью изменять сигнал зонда вследствие особенностей их взаимодействия с плазматической мембраной клеток.

Окисленные сополимеры значительно увеличивают внутриклеточное накопление модельного красителя родамина-123 в опухолевых клетках РС-3 и проявляют выраженное ингибирующее действие на АТФ-азную активность обратных мембранных транспортеров (Р-гликопротеина) *in vitro*. Окисленные сополимеры в композиции с докорубицином и винбластином обладают более выраженным цитотоксическим действием в отношении резистентной к винбластину линии опухолевых клеток МСF-7.

Полученные результаты свидетельствуют о перспективности применения окисленных амфи菲尔ных сополимеров ЭО и ПО в качестве эффекторов внутриклеточного транспорта противоопухолевых препаратов.

*Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 16-54-10059 и программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 гг.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГЕНОВ ПЛЮРИПОТЕНТНОСТИ НА СВОЙСТВА КЛЕТОК АДЕНОКАРЦИНОМЫ МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

Рахматуллина А.Р., Мильтахова Р.Р., Мингалеева Р.Н., Ризванов А.А.

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

*rahmatullina\_2011@mail.ru*

Опухоль молочной железы является наиболее распространенным онкологическим заболеванием у женщин, и составляет 12,5% от всех диагностированных онкологических заболеваний на территории Российской Федерации.

Стволовые опухолевые клетки (СОК) – это субпопуляция клеток, которая обладает опухоль-инициирующим и метастатическим потенциалом, тем самым способствуя рецидиву заболевания и появлению резистентности к противоопухолевым препаратам. СОК, так же как и эндогенные стволовые клетки, способны к самообновлению и характеризуются повышенной экспрессией генов плюрипотентности, таких как OCT4, SOX2, NANOG, KLF4, c-Myc.

Цель работы – исследование роли генов плюрипотентности в определении свойств стволовых опухолевых клеток на модели клеток карциномы молочной железы человека MCF7.

В ходе исследования получены клетки карциномы молочной железы человека, стабильно экспрессирующие гены *Oct4*, *SOX2*, *KLF4*, *c-Myc* и *NANOG*. Было показано, что скорость пролиферации клеток MCF-7 зависит от уровня экспрессии белков OCT4 и c-Myc. Повышение миграционного потенциала клеток наблюдалось при гиперэкспрессии белков NANOG и KLF4. Увеличение процентного содержания СОК в клетках карциномы молочной железы человека MCF-7 происходит при гиперэкспрессии белков OCT4 (на 62.7%), KLF4 (на 97%), NANOG (на 121.3%). Гиперэкспрессия генов *SOX2*, *NANOG* и *KLF4* приводит к снижению чувствительности к химиотерапевтическому препарату Доцетаксел на 12%, 14% и 7%, соответственно.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИТОСКЕЛЕТА У 3D КУЛЬТУР С ПОМОЩЬЮ КОНФОКАЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Рожина Э.В., Камалиева Р.Ф., Баташева С.Н., Фахруллин Р.Ф.

*Казанский федеральный университет,  
Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия*

*rozhinaelvira@gmail.com*

3D модели эукариотических клеток – сфериоиды, находят все большее применение в современных исследованиях. В такой модели сохраняется контакт клетка-клетка, имеется внеклеточный матрикс, поэтому она может успешно применяться для изучения противораковых лекарств перед клиническими испытаниями.

В нашей работе проводили исследование цитоскелета в эукариотических клетках, организованных в трехмерные кластеры через 72 часа после начала эксперимента. Для получения сфериоидов применялся метод «висячей капли». Визуализацию актина проводили с помощью окрашивания фаллоидином, коньюгированным с флуорофором Alexa fluor 488 (Invitrogen), ядра окрашивали DAPI (5 мг/мл). Перед фиксацией сфериоиды промывали раствором буфера трижды, затем фиксировали 4% парформальдегидом и окрашивали. Сфериоиды фиксировали с применением монтирующей среды и визуализировали конфокальным микроскопом Carl Zeiss LSM 780 (увеличение x10 и x20), для реконструкции трехмерного изображения применяли послойное сканирование по оси Z. Снимки обработаны с помощью программного обеспечения ZEN.

Мы провели изучение структуры цитоскелета в клетках в составе многоклеточного кластера. В клетках 3D-сфериода F-актин представлен структурированными тяжами, аналогичная картина наблюдается у клеток, прикрепленных к субстрату (2D модель). В кортикальном слое нити актина хорошо развиты, многочисленные стрессовые волокна обнаруживаются в цитоплазме, что свидетельствует о нормальной организации цитоскелета. Центральная часть сферида, подверженная гипоксии, не имеет структурированного цитоскелета, ядра сконденсированы.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-34-00196 и № 15-04-99660).*

## СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА И ЕГО ОКСИДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ *STYLONYCHIA MYTILUS*

Кван В.В., Русакова Е.А.

*ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет», Оренбург, Россия*

*kwan111@yandex.ru*

Поступление техногенных наночастиц в экосистемы увеличивается с каждым годом. Уже сейчас общий список наноматериалов превысил 4 тысячи наименований [1]. В гидросферу Земли поступает около 33 тонн техногенных наноматериалов [2]. Вследствие чего, область применения нанотехнологий быстро расширяется, при этом не до конца известны все свойства наноматериалов, их положительные и отрицательные стороны. Так же до конца не изучен вопрос токсичности наноматериалов, но в настоящий момент – это одна из приоритетных областей изучения, так как наноматериалы широко применяются, и напрямую взаимодействуют с организмом человека [3]. В мировой практике для оценки токсичности веществ предлагаются к использованию различные тест-системы, такие как микроорганизмы, клеточные и субклеточные элементы, различные гидробионы, растения, насекомые [4]. Одноклеточные инфузории имеют относительно их размеров большую поверхность соприкосновения с внешней средой, сразу же вступают в контакт с токсикантом, реагируя на химическое действие целым комплексом изменений: хемотаксисом, реверсией ресничной активности, скоростью размножения. Многие гидробионы обладают фильтрационным типом питания, что повышает вероятность накопления ими веществ-токсикантов и повышает эффект воздействия на организм [5]. Поведение наноматериалов в окружающей среде и их влияние на гидробионтов изучено далеко неполно и требует пристального внимания, поскольку их поступление в окружающую среду увеличиваться, особенно вопросы биоаккумуляция техногенных наночастиц в водных беспозвоночных [6]. Цель данного исследования – оценка острой токсичности различных доз наночастиц железа и его оксидов, с использованием в качестве тест-объекта *Styloynchia mytilus*. В качестве тест-объекта использовали культуру клеток пресноводной инфузории *Styloynchia mytilus* (дикий штамм) в фазе экспоненциального роста. В исследованиях использовали наночастицы Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (I), Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (II), Fe (I), наносистема FeCo («Передовые порошковые технологии», Россия). Действие токсических веществ исследовались в широком спектре концентраций (3,2M-6\*10<sup>-6</sup>M). Чувствительность культуры клеток *Styloynchia mytilus* к действию токсиканта определяли по времени их гибели, фиксируемой по прекращению движения простейших, которое сопровождалось нарушением целостности и лизосом клетки. Число клеток в 5 мл среды, содержащей интактную культуру инфузорий (без добавления наночастиц), служило контролем во всех опытах. Клетки, взятые в стационарной фазе роста, инкубировались при температуре 20±2°C в среде с добавлением токсикантов в течение 24 часов. Промежуточный подсчет осуществлялся через 1 ч, 6 ч, 12 ч. и 24 ч. Статистический анализ проводили с использованием стандартных методик ANOVA, с последующим использованием критерия Тьюки (SPSS вер. 17,0). Различия считались статистически достоверными при  $P<0,05$ . Анализ полученных данных выявил различные эффекты воздействия форм железа на культуру клеток простейшего. В ходе проведенных экспериментов было выявлено, что наночастицы железа (Fe (I)), оксиды (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (I), Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (II)) и наносистема (FeCo) имеют сходное влияние на клетку испытуемого организма. Во-первых, отмечалось 100 % гибель культуры клеток *Styloynchia mytilus*, во-вторых, микроскопические исследования показали

многочисленные грубые морфологические изменения, в частности нарушения наружной стенки мембранны. Полученные результаты показывают отсутствие влияния наночастиц в первый час инкубации, и полное разрушение мембранны начиная с 6 часов. Кроме того, локализация наночастиц в клетках зависела от времени инкубации культуры клеток *Styloynchia mytilus* с токсикантом. Так, после 1 и 6 часов наблюдалось периферическое распределение наночастиц в клетках. После 12 часов инкубации отмечалось равномерное распределение наночастиц в клетке. По истечению 24 часов зафиксирован «окислительный взрыв». Смертность 100 % клеток в результате деструктивной мембранный патологии говорят об интенсивном свободно-радикальном окислении ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (I),  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (II)). Также можно констатировать положительный хемотаксис (движение к аттрактанту), поскольку основная часть мертвых клеток располагалась по всему периметру поля от основной концентрации наночастиц. Изменений клеток инфузорий в более ранних промежутках выявлено не было. Снижение численности опытных клеток в результате деструктивной мембранный патологии свидетельствовали об интенсификации процессов свободного окисления. Гибель клеток можно объяснить тем, что сначала наночастицы связываются с клеточной мембраной, а затем путем эндоцитоза проникают внутрь клетки. Далее они связываются с пищеварительной вакуолью, приводят ее к повреждению и высвобождают ферменты внутрь клетки, и клетка начинает «переваривать» сама себя. Оценка временных периодов, за которые наблюдался токсический эффект показала, что действие анализируемых форм железа проявляется на 24-й час инкубации. За более короткие временные рамки (1 час, 6 часов, 12 часов) изменений не наблюдалось, клетки простейших сохранили активность. Анализ концентрационных воздействий показал, что наночастицы Fe (I) вызывают максимальный токсических эффект, который наблюдался при концентрации до  $4 \times 10^{-5}$  на клетки простейших. Во всех остальных разведениях до  $6 \times 10^{-6} \text{ M}$  число выживших клеток постепенно увеличивалось (от 40-95 %). Токсичное действие оксидов железа также сохранялось до  $9 \times 10^{-5} \text{ M}$ . С каждым последующим разведением число живых клеток увеличивалось. Меньшей токсичностью обладала наносистема FeCo, полная гибель клеток наблюдалась через 24 часа до концентрации 0,05M, в остальных концентрациях токсического эффекта выявлено не было.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Областного гранта № 36 от 30.06.2016.*

1. Ю.Д. Третьяков. *Вестник РАН*, 2007, **77**, 3-10.
2. А.В. Колесниченко, М.А. Тимофеев. *Рос. нанотехнологии*, 2008, **3(3-4)**, 54-61.
3. А.А. Keller, S. McFerran. *Journal of Nanoparticle Research*, 2013, **15(6)**, 1686-1692.
4. E.J. Petersen, T.B. Henry. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2011, **31**, 1–13.
5. A. Rehman, A.R. Shakoori. *Folia Microbiol*, 2000, **45(3)**, 275-8.
6. Е.Ю. Крысанов, Д.С. Павлов. *Известия Российской академии наук*, 2010, **4**, 478-485.

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МИШЕНИЙ ФУРАНОНА Ф105 В КЛЕТКАХ БАКТЕРИЙ

Рыжикова М.Н., Тризна Е.Ю., Курбангалиева А.Р., Каюмов А.Р.

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

*mariarimgol@mail.ru*

В настоящее время показано, что большинство бактерий в природе существуют в виде сложно организованных биопленок, в которых клетки адгезированы к субстрату и погружены в сложный органический матрикс. В составе биопленки бактерии становятся высоко устойчивыми к антибиотикам и иммунной системе организма человека. Это вызывает трудность при лечении и определяет необходимость разработки ингибиторов формирования биопленки. Показано, что использования производных фуранонов приводит к ингибированию генов образования биопленок. Нами ранее показано что фуранон Ф105 эффективно подавляет образование биопленок в клетках стафилококков. Целью работы было идентифицировать молекулярные мишени фуранона Ф105 в клетках бактерий.

Для определения клеточных мишней фуранона Ф105 проводили электрофорез грубого экстракта планктональных и адгезированных клеток бацилл, стафилококков, который показал наличие белков, синтез части которых индуцируется, а части подавляются в присутствии фуранона Ф105. Их идентификация с помощью MALDI-TOF масс спектрометрии показала что это в основном ферменты, участвующие в жизненно важных процессах клетки и относящиеся к генам домашнего хозяйства. Учитывая, что содержание ферментов в клетке часто регулируется по принципу обратной связи, можно предположить, что индукция этих белков происходит для восстановления уровня необходимой активности в клетке, ингибированной, по всей видимости, соединением Ф105. Однако не представляется возможным выделить их в четко выраженную группу. Поэтому мы предполагаем, что фуранон Ф105 не обладает высокой специфичностью, к какой-либо группе белков, однако воздействует на белки, обладающие ферментативной активностью. Для более точной идентификации возможных клеточных мишней мы планируем далее проводить их разделение с помощью двумерного электрофореза, а также оценку воздействия фуранона на различные модельные ферменты *in vitro*.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект №15-14-00046)*

## ВЛИЯНИЕ ПРОИЗВОДНОГО ПИРИДИНА НА КЛЕТКИ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ ЧЕЛОВЕКА

Сабиров А.Х., Кошкин С.А., Иксанова А.Г., Пугачёв М.Б., Штырлин Ю.Г.

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

*Arsenicum-ASH@mail.ru*

На сегодняшний день известно множество противоопухолевых препаратов, ингибирующих отдельные процессы в опухолевых клетках: транспорт глюкозы, гликолиз, пентозофосфатный путь, действие лактатдегидрогеназы и другие. Однако в силу гибкости метаболизма опухолевых клеток они способны препятствовать действию этих препаратов, приобретая фенотип множественной лекарственной устойчивости или раковой стволовой клетки. В связи с этим поиск новых препаратов-модуляторов метаболизма опухолевых клеток является актуальной проблемой современной онкологии.

Целью данной работы являлась оценка биологических эффектов модулятора метаболизма Tx-14 на клетки рака молочной железы человека. Клетки MCF-7 культивировали с препаратом Tx-14 в конечной концентрации 12,5 мкмоль/л. Далее проводили метаболомный анализ с оценкой проникновения и образования метаболитов Tx-14 и его влияния на основные метаболические пути глюкозы – гликолиз, пентозофосфатный путь и цикл трикарбоновых кислот. Также были проведены ПЦР-анализ на гены плюрипотентности, тест на инвазивность, иммуноцитохимия на маркёры раковых стволовых клеток (CD44, CD24, ALDH1A1) и исследовались эффекты Tx-14 в моделях ксеногraftов *in vivo*.

По результатам исследований можно заключить, что Tx-14 изменяет метаболизм опухолевых клеток MCF-7 в сторону активации цикла трикарбоновых кислот, что свидетельствует об уменьшении эффекта Варбурга, характерного для опухолевых клеток. При этом клетки, инкубированные с Tx-14, приобретали свойства стволовых, но не раковых стволовых клеток. Результаты исследований *in vivo* показывают формирование упорядоченных соединительнотканых структур в подсаженных опухолях, что свидетельствует о доброкачественности образований.

Таким образом, можно сделать вывод, что Tx-14 изменяет метаболизм опухолевых клеток и направляет его в сторону метаболизма нормальных клеток. Это делает соединение Tx-14 перспективным кандидатом в противоопухолевые препараты.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ УФ-МОДИФИКАЦИИ СВОБОДНЫХ И ИММОБИЛИЗОВАННЫХ ПРОТЕАЗ

Сазыкина С.М., Холявка М.Г., Шеломенцева Т.Н., Артюхов В.Г.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

*sazykina.93@mail.ru*

Истории изучения и применения УФ-излучения уже более 100 лет, однако, научно-техническое осознание того факта, что УФ-свет является уникальным инструментом для инициирования многих физико-химических процессов на поверхности и в объеме различных сред появилось относительно недавно. Целью работы было исследовать воздействие УФ-излучения на процессы фотомодификации свободных и иммобилизованных протеолитических ферментов. Объектами исследования были выбраны трипсин, папаин и коллагеназа, носителями для иммобилизации – хитозаны средне-(200кДа) и высокомолекулярный (350кДа).

Установлено, что при действии УФ-света в дозе 1510 Дж/м<sup>2</sup> на свободный трипсин зарегистрировано уменьшение размеров молекулы. Снижение каталитической способности растворимого и иммобилизованных на матрице средне- и высокомолекулярного хитозанов препаратов происходило при использовании доз 3020 Дж/м<sup>2</sup>, 4530 Дж/м<sup>2</sup>, 6040 Дж/м<sup>2</sup> соответственно.

При УФ-облучении свободной коллагеназы снижение ее каталитической способности происходило при использовании дозы 3020 Дж/м<sup>2</sup>. После иммобилизации фермента его активность не изменилась во всем диапазоне исследуемых нами доз. Изменение размера молекулы коллагеназы также не регистрировалось во всем диапазоне используемых доз.

При действии УФ-света на свободный папаин в дозе 453 Дж/м<sup>2</sup> наблюдалось снижение его каталитической способности, при дальнейшем повышении дозы облучения энзим сохранял свою активность на относительно постоянном уровне. При использовании дозы 755 Дж/м<sup>2</sup> выявлена тенденция к увеличению диаметра молекулы. После иммобилизации папаина на матрице обоих хитозанов при УФ-облучении в диапазоне доз 151-6040 Дж/м<sup>2</sup> фермент сохранял свою активность на постоянном (первоначальном) уровне.

Таким образом, иммобилизация приводит к повышению стабильности к УФ-облучению всех исследованных нами протеаз по сравнению со свободными энзимами.

## ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ НЕРВНО-МЫШЕЧНОГО СИНАПСА

Сафиуллина А.Н.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань,  
Россия*

*isina\_saf@mail.ru*

Многие процессы, лежащие в основе функционирования центральных и периферических синапсов, недоступны прямому наблюдению, поэтому применение математических методов, в том числе статистического анализа, может обеспечить исследователя дополнительной информацией о тонких механизмах регуляции синаптических функций. В частности, применение биномиальной статистики позволяет ответить на вопрос, является ли изменение интенсивности квантового выброса следствием изменения количества доступных квантов или вероятности их освобождения. Если в результате какого-то экспериментального воздействия изменился квантовый состав (интенсивность секреции), это может быть обусловлено двумя факторами – изменилось количество синаптических везикул, готовых к освобождению, либо вероятность их освобождения. Без специального статистического анализа не представляется возможным определить, что именно изменилось. Если же получить эту информацию, то можно строить предположения о том, какие молекулярные механизмы лежат за этими изменениями. Если изменилось количество  $m$  готовых к секреции везикул, то возможно что-то произошло с механизмами их транспортировки к местам секреции, их заполнением медиатором, процессами эндоцитоза и т.п. Если же изменилась вероятность  $p$ , то изменения могут быть связаны, например, с модификацией работы кальциевых каналов, с белками секреторного аппарата и т.п.

Исследование работы нервно-мышечного синапса проводилось на изолированном препарате портняжной мышцы лягушки. Нерв раздражался прямоугольными импульсами. Измерялся ответ концевой пластинки мышечного волокна - потенциалов концевой пластиинки в ответ на раздражение нерва. Для каждого мышечного ответа оценивалось количество освободившихся везикул (квантов) ацетилхолина. Согласие с биномиальным распределением полученных выборочных данных проверялось с помощью критерия хи-квадрат. Параметры  $m$  и  $p$  также оценивались тремя различными методами (см. [1]) и все методы давали схожие результаты.

1. DasGupta A., Rubin H. Estimation of binomial parameters when both  $n,p$  are unknown. *J. Statist. Plan. and Infer.*, 2005, **130**, 391-404.

## ПОЛИМОРФИЗМ ГЕНОВ СИСТЕМЫ ГЕМОСТАЗА ПРИ НЕВЫНАШИВАНИИ БЕРЕМЕННОСТИ

Саярова Р.М., Кравцова О.А.

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

*bluebiruza@gmail.com*

Невынашивание беременности (НБ) – ее прерывание от момента зачатия до 37 полных недель беременности. НБ рассматривается как мультифакториальное заболевание, в этиопатогенезе которого принимают участие как внешние, так и внутренние факторы. Одной из ведущих причин НБ является генетический фактор. В последние годы изучен аллельный полиморфизм более 40 генов, относящихся к генной сети НБ. Проведенные ранее исследования свидетельствуют об ассоциативности акушерских и перинатальных осложнений с нарушениями в системе гемостаза [1,2]. По данным литературы [3], полиморфизмы генов T1531C гликопротеина IIIa (rs5918), 4G/5G ингибитора активатора плазминогена 1-го типа (rs1799889), G20210A фактора свертываемости II (rs1799963), G1691A фактора свертываемости V (rs6025), C22771T фактора свертываемости XI (rs2289252) способны повышать риск развития НБ.

В связи с этим целью данного исследования явилась оценка влияния полиморфизма этих генов на риск развития НБ.

Генотипирование полиморфных локусов исследуемых генов было проведено методом ПЦР в РВ в группе женщин с НБ (91 человек) и группе женщин с физиологическим протеканием беременности, представляющих контрольную группу (150 человек). Различия частоты встречаемости аллелей и генотипов исследуемых полиморфных локусов оценивалось по отношению шансов и 95% доверительному интервалу, обработка данных проводилась в программе RStudio.

В результате сравнительной оценки частоты встречаемости генотипов и аллелей исследуемых генов по генам F2, F5, GrIIIa и PAI-1 значимых различий обнаружено не было, в то время как по полиморфизму гена F11 эти различия носят статистически достоверный характер. Было выявлено, что риском развития НБ является генотип СТ.

1. Айламазян с соавт., 2007, с. 39;
2. Pabinger, Vormittag, 2005, с. 1608;
3. Тромбофилические состояния в акушерской практике, 2001, С.213-225.

## НОВЫЙ ШАГАЮЩИЙ ТРЕНАЖЁР

Скворцова А.А.

*Московский авиационный институт (НИУ), Москва, Россия*

*Saa2509@mail.ru*

Работа относится к области биомеханики и реабилитационной медицины. В работе [1] была предложена механическая схема тренажёра нового типа. Тренажёр предназначен для лечения и реабилитации людей с нарушениями движений ног. Новизна тренажёра заключается в реализации природной траектории движения стопы человека, заложенной в головной мозг исторической эволюцией. Следующим этапом работы стало создание действующего шагающего макета тренажёра. Для реализации природной траектории движения стопы человека потребовалось разработать шагающие механизмы. Оказалось, что шагающие механизмы могут применяться не только в тяжёлом машиностроении, но и в медицине [2]. Механическая схема тренажёра была проверена сначала автономно, а затем начато изготовление макета тренажёра. Фактически макет – это готовый тренажёр для маленького ребёнка с длиной шага 30 см. Тренажёр изготовлен на основе двух лямбдаобразных механизмов П.Л.Чебышева, для правой и левой ноги. Предусмотрены электроусилители движения ног. Очень низкая стоимость тренажёра отличает конструкцию от дорогостоящих экзоскелетов стоимостью десятки тысяч долларов и эллиптических тренажёров. Надёжность устройства обеспечивается простой механической конструкцией [3,4]. Макет тренажёра был испытан при различных погодных условиях. При поломке проще купить новый механизм, чем ремонтировать старый. Такой подход позволяет обеспечить быструю широкомасштабную инновацию не в ущерб материальному состоянию пациентов, извлекая прибыль из большого объёма продаж. Очередная задача – создание опытного образца полномасштабного тренажёра на факультете робототехники Московского авиационного института и проведение энцефалографических испытаний в Институте авиационной и космической медицины.

1. Скворцова А.А., Папиашвили Э.Д. Рефлекторный реабилитационный шагающий тренажёр // Сборник Тезисов I Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Биомедицина, материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. – Казань.: Изд-во КФУ, 2015. С.187.
2. Папиашвили Э.Д., Скворцова А.А. Универсальная шагающая платформа для геологоразведки инефтедобычи // Сборник тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых учёных "Материалы и технологии XXI века" 11-12.12.2014 / Отв. ред. А.В. Герасимов. Казань.: Изд. КФУ, 2014. С.132.
3. Скворцова А.А. Новый шагающий тренажёр. – Электронный ресурс: <https://youtu.be/Umfpg9ykYGQ>.
4. Скворцова А.А. Рефлекторный шагающий тренажёр. – Электронный ресурс: <https://youtu.be/ehMjOSe83tg>

## ПОЛУЧЕНИЕ ГЕТЕРОЛОГИЧНЫХ БЕЛКОВ НА ОСНОВЕ LIKE СИСТЕМЫ ЭКСПРЕССИИ

Тихонова А.О., Тойменцева А.А., Шарипова М.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

*tihonovaao93@gmail.com*

Задача получения биологически активных белков по результатам секвенирования многих геномов становится актуальна для многих отраслей – медицины, промышленности и сельского хозяйства. Поэтому, индустрия новых биоинженерных методов для получения большого количества активных белковых продуктов постоянно развивается. Основными задачами являются: снижение затрат на исходное сырье, сокращение времени производства и увеличение выхода конечного целевого продукта. Рекомбинантные ДНК-технологии позволяют использовать в качестве доступных экспрессионных систем-продуцентов с относительно небольшими затратами бактерии и дрожжи. Особый интерес в этом отношении представляют клетки бацилл – они не патогенны, имеют статус безопасных микроорганизмов GRAS-организмов (*generally recognised as safe*), что позволяет использовать их даже в пищевой промышленности.

Геноинформационный анализ секвенирования генома *Bacillus subtilis* позволил идентифицировать промотор сильный индуцибелльный промотор *P<sub>lia</sub>*, который активируется при наличии в среде стрессового фактора (антибиотик, щелочь, спирт). На основе нового промотора сконструирована новая, названная LIKE-системой (Lia-Kontrollierte Expression). Показано, что добавление в питательную среду индуктора (антибиотика) позволяет повышать экспрессию целевых генов до 1000 раз в течение 15 минут. В настоящей работе LIKE система экспрессии была оптимизирована для получения внеклеточных белков – сериновых протеиназ *Bacillus pumilus* 3-19 (субтилизиноподобной протеиназы и глутамилэндепептидазы). Для этого подобраны и клонированы эффективные сигнальные пептиды *Bacillus megaterium* – SP<sub>Pac</sub> и SP<sub>Yngk</sub>. Для естественного накопления рекомбинантного целевого белка в питательной среде подобран штамм-реципиент, с удаленными генами протеиназ – *Bacillus subtilis* BG2036. Все рекомбинантные конструкции были протестированы на молочном агаре и оценена их протеолитическая активность на специфических субстратах. Ферментативная активность была впервые обнаружена в культуральной жидкости в фазе замедления роста, а затем во время стационарной фазы. Субтилизиноподобная протеиназа (AprBp) со своим собственным сигнальным пептидом SP<sub>AprBp</sub> показала высокую активность (90 U) на 30 ч роста без индуктора и 72U удельной активности на 20 час роста с бацитракцином. Активность глутамилэндепептидазы была выше под контролем рекомбинантного SP<sub>Yngk</sub> - 16U удельной активности на 18 час роста после добавления индуктора. Таким образом, выбранная стратегия позволяет получать фермент в среде в более ранние часы со столь же высокой активностью.

Такое сочетание сильного промотора, эффективного сигнального пептида и оптимального штамма-реципиента позволило разработать перспективную технологию для производства гетерологичных биологически активных белков.

## КВОРУМИНГИБИРУЮЩИЕ И АНТИОКСИДАНТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОНЕНТОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Толмачева А.А.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия

<sup>b</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт мясного скотоводства, Оренбург,  
Россия

*annatolmacheva56@gmail.com*

Живые организмы постоянно подвергаются неблагоприятному воздействию как со стороны окружающей среды, в результате чего формируются свободные радикалы, так и со стороны других организмов, что приводит к возникновению различных инфекционных заболеваний. Задачи предотвращения окисления кислородом и противодействия бактериальным патогенам перед растительным сообществом были поставлены природой примерно в одни и те же временные периоды, в результате растениям пришлось создавать бифункциональные малые молекулы для рационального и «экономного» ответа на возникшие вызовы. Поэтому поиск и исследование перспективных растительных веществ, обладающих кворум-ингибирующей – подавляющей коллективное поведение микроорганизмов (англ. – quorum sensing, QS) и антиоксидантной (АОА) активностью, является весьма актуальной задачей.

В наших исследованиях мы подробно изучили 7 соединений коры дуба, обладающих АОА и анти-QS активностями. Среди наиболее известных антиоксидантов растительного происхождения: кумарина, скополетина, пропилрезорцина (ПР), наибольший анти-QS эффект наблюдался у последнего, в связи с чем была составлена библиотека 4-х его гомологов для углубленного исследования их биоактивности. Экспериментальный анализ на QS-зависимом пигментпродуцирующем штамме *Chromobacterium violaceum* CV026 подтвердил умеренно выраженную антибактериальную активность производных ПР, возрастающую с увеличением длины их углеводородного радикала. Была доказана идентичность явления подавления роста и формирования биопленки – эти процессы взаимосвязаны, а ингибирование QS происходит независимо от выраженности антибактериального эффекта.

Полученный результат создает основу для создания поликомпонентных препаратов, использующих природные (растительные) механизмы ингибирования QS и противостояния окислительному стрессу.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке ГЗ Минобрнауки России (Проект № 342) и гранта РНФ (№ 16-16-10048).*

## ОСОБЕННОСТИ КЛЕТОЧНОЙ ГИБЕЛИ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК (A549 И NCI-H322M) В УСЛОВИЯХ МЕТАБОЛИЧЕСКОГО СТРЕССА

Топчу Ю.А., Абрамова З.И.

*Институт фундаментальной медицины и биологии, К(П)ФУ, Казань, Россия*

*topchu\_1993@mail.ru*

Автофагия может выступать в качестве супрессора опухоли, т.к. в результате данного процесса происходит удаление поврежденных органелл и белковых агрегатов для подавления окислительного стресса, повреждения тканей и геномной нестабильности, которые могут способствовать инициации опухоли. В противоположность этому автофагия усиливается в гипоксических регионах для выживания опухолевых клеток за счет переваривания клеточного содержимого с целью генерации необходимых субстратов. Активация апоптоза может сопровождаться усилением автофагии, что может, как ограничивать, так и способствовать гибели раковых клеток.

Цель настоящей работы – охарактеризовать особенности программируемой клеточной гибели опухолевых клеток (A549 и NCI-H322M) в условиях метаболического стресса. Клеточные линии различаются по статусу гена TP53 (A549 -  $TP53^{wt}$ , NCI-H322M -  $TP53^{mt}$ ). Для оценки программируемой клеточной гибели были использованы методы проточной цитометрии, электронной трансмиссионной микроскопии и иммуноблоттинга.

В ходе исследования было показано, что в клоне клеток A549 живые клетки к 12 суткам культивирования составили 62.89% против 37.28% клеток линии NCI-H322M. Для клеток линии NCI-H322M характерен более высокий процент клеток на стадии позднего апоптоза – 55.3% против 36.5% клеток линии A549. Для линии A549 были выявлены как морфологические признаки раннего апоптоза, так и признаки автофагии. Аутофагия проявляет максимальную активность в 1-3 сутки культивирования (усиление экспрессии киназы mTOR). Для клеток NCI-H322M морфологические признаки запуска автофагии практически отмечены не были. Таким образом, выживание клеточной линии A549 ( $TP53^{wt}$ ) в условиях метаболического стресса, возможно, обусловлено запуском автофагии. Отсутствие индукции автофагии в клетках линии NCI-H322M ( $TP53^{mt}$ ), можно объяснить нарушением транскрипционной функции p53 по отношению к гену Ras, который играет роль в регуляции автофагии.

## ВЛИЯНИЕ РАЗНЫХ ФАКТОРОВ НА РОЕНИЕ КЛИНИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОВ *MORGANELLA MORGANII*

Тошева З.С., Марданова А.М.

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

*tosheva\_zarina@mail.ru*

*Morganella morganii* является возбудителем ряда оппортунистических заболеваний, в том числе инфекций мочевыводящих путей (ИМП) [1]. Важным фактором для колонизации различных поверхностей является подвижность бактерий [2]. В литературе мало данных о способности *M. morganii* к роению и влиянию на подвижность бактерий различных факторов.

Целью работы является характеристика подвижности клинических изолятов *M. morganii* с разной гемолитической активностью, а также влияние температуры и различных веществ на роение бактерий. Объектом исследования были три штамма: негемолитический штамм *M. morganii* 1, гемолитические штаммы *M. morganii* 4 и 190. Роение исследовали на среде LBA, содержащей 0.6% агара, при температуре 30 и 37 °C. Исследовали влияние на роение глюкозы (0.5%) и казаминовых кислот (0.6%).

Было показано, что все исследуемые штаммы слабо роятся на среде LBA при обеих температурах культивирования, но при этом штаммы различаются между собой, а температура не влияет на подвижность. Наиболее выраженную подвижность имеет штамм *M. morganii* 1. На 72 час культивирования при 30°C диаметр колонии этого штамма достигал 22 мм. У штаммов *M. morganii* 4 и 190 при тех же условиях диаметр колоний составлял 16 и 12 мм соответственно. При температуре 37 °C диаметр колоний не превышал 9 мм (штаммы 1 и 4) и 6 мм (штамм 190). Внесение в среду казаминовых кислот и глюкозы стимулирует роение. В присутствии казаминовых кислот уже на 10 час культивирования при 30°C диаметр колоний штаммов 1, 4 и 190 достигал 22 мм, 8 мм и 10 мм соответственно. При 37°C диаметр колонии шт 1 достигал 28 мм. Глюкоза стимулирует роение штаммов *M. morganii*, однако не так эффективно, как казаминовые кислоты.

Таким образом, роение клинических изолятов *M. morganii* с разной гемолитической активностью мало зависит от температуры, но значительно индуцируется в присутствии в среде казаминовых кислот и глюкозы. Негемолитический штамм 1 обладал способностью к роению выше, чем гемолитические штаммы. Скорость роения штамма 1 во всех случаях была в 1.5-2 раза выше, чем у гемолитических штаммов.

1. Liu H., Zhu J., Hu Q., Rao X. *Int J Infect Dis.*, 2016, **50**, 10-17.
2. Verstraeten N., Braeken K., Debkumari B., Fauvert M., Fransaer J., Verman J., Michiels J. *Trends Microbiol.* 2008, **16(10)**, 496-506.

## ЧИСЛЕННОСТЬ БАКТЕРИЙ В ПОЧВАХ, КОТОРЫЕ ЗАГРЯЗНЕННЫ СВИНЦОМ $Pb(NO_3)_2$ , ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЦИФРОВОЙ МИКРОСКОПИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРОГРАММЫ ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ IMAGEJ

Уразгалиева И.А.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт Экологии и Природопользования, Казань, Россия

*ilmiraurazgalieva@mail.ru*

Современные цифровые технологии, в последнее время, широко применяются для количественного учета микроорганизмов в различных средах. Использование люминесцентной микроскопии в тандеме с устройствами для получения и обработки изображений позволяет автоматизировать подсчет бактерий, что значительно облегчает задачу исследователю, особенно при работе с такой сложной многокомпонентной средой как почва.

В данной работе исследовались возможности автоматического подсчета микробов в почвах, инкубированных с различными дозами  $Pb(NO_3)_2$ , широко используемой в медицинских и биологических исследованиях программой обработки изображений ImageJ. Почвенные суспензии обрабатывались акридином оранжевым и микроскопировались [1]. Изображения получали цифровой камерой DCM-35.

Было опробовано два способа счета микроорганизмов с помощью программы ImageJ, среди которых наиболее удобными являются следующие:

Способ №1. В меню Image верхней панели программы, выбрав пункт Color и далее Split Channels проводим разделение цветного изображения на три канала – зеленый, красный и синий, каждый из которых будет изображен в оттенках серого. Так как в люминесцентной микроскопии, окрашенные бактерии испускают свечение зеленых тонов, далее работаем только с зеленым (Green) каналом. С помощью специального модуля для учета количества вирусов и бактерий ITCN (в меню Plugins) проводим автоматический подсчет белых пятен на изображении

Способ №2. Использование модуля Find Maxima (меню Process). В поле Noise Tolerance указывают минимальное значение локального максимума – все объекты на изображении меньше указанного не будут учитываться. Пункт Preview point selection позволяет подсчитать количество локальных максимумов (в нашем случае это и есть микробы) и выводит их число внизу окна.

Количество микроорганизмов определенные двумя данными способами варьировали в диапазоне 3,5-5,9 млрд клеток/г почвы в зависимости от дозы Pb (рисунок 1). Способ №1 показал наилучшие результаты. Численность бактерий для него был выше на 10-24%, чем при подсчете Способом №2.

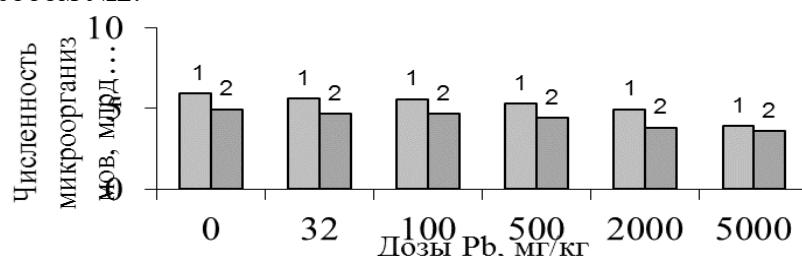


Рисунок 1. – Влияние различных доз свинца на численность микроорганизмов в серой лесной почве. 1, 2 – способ учета микроорганизмов.

1. Методы почвенной микробиологии и биохимии: Учеб. Пособие. Под ред. Д.Г. Звягинцева. М.: Изд-во МГУ, 1991. 304 с: ил.

## УСТРОЙСТВО, КОМПЛЕКСНОГО АНАЛИЗА КАЧЕСТВА ЖИДКОСТИ

Фадеева Н.С., Смирнова С.В.

*Институт автоматики и электронного приборостроения,  
КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, Казань, Россия*

*Nadya\_15\_avgouct@mail.ru*

Все люди пьют воду и готовят на ней пищу. И если эта вода не такая, как она должна быть, то возможно развитие разнообразных болезней – в зависимости от того, что в этой воде не так. Например, если в воде много нитратов, то будут страдать почки. Если много тяжёлых металлов, то печень. А ведь поломка одного-единственного органа приводит к изменениям во всех остальных!

Анализ воды позволяет узнать качество воды. Позволяет удостовериться в ее чистоте и пригодности для питья, умывания, ежедневного применения, эксплуатации бытовой техники и сантехники или же разочароваться и начать изменять положение.

В связи с вышесказанным в докладе предложена и обоснована разработка многофункционального анализатора для количественной оценки качества воды с помощью одновременного использования трех электрохимических методов анализа, оптического канала и оригинального программного обеспечения. Данное устройство способно определить: мутность, цветность, водородный показатель, окислительно-восстановительный потенциал, растворенные твердые частицы, солесодержание, электропроводность, растворенный кислород, температуру.

Разрабатываемый прибор может быть использован для:

- Оценки качества питьевой воды городского водопровода;
- Оценки качества питьевой воды из скважин, колодцев и пр.;
- Определения эффективности очистки воды;
- Подбора фильтра для воды;
- Контроля ресурса сменных элементов фильтра для воды;
- Подтверждения качества очистки бутилированной воды;
- Отслеживания состояния воды в бассейне;
- Оценки качества воды для полива;
- Контроля среды в аквариуме

## «ДУМАЮЩАЯ» ПЛЕСЕНЬ

Файзуллина А.Р.<sup>a</sup>, Ерохин В.В.<sup>b</sup>

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

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

*ade.faizellina@yandex.ru*

Physarum polycephalum, буквально "многоголовая слизь", это слизевик, который обитает в тенистых, прохладных, влажных местах, чаще в гниющих листьях и бревнах. Как представитель класса слизистых грибов он чувствителен к свету. Поведение Physarum polycephalum (далее – Physarum) является объектом исследований, принадлежащих к различным научным областям. Одной из особенностей поведения Physarum polycephalum является его особенность в поиске «еды» (продуктов, поддерживающие жизнедеятельность), а именно вычисление Physaruma отталкивающего/притягивающего источника пищи, который могут влиять на его движение. Physarum также можно рассматривать как массивный «параллельный аморфный компьютер», который получает данные от источников пищи, расположенных вокруг и создает протоплазматическую сеть своим телом. Как результат, Physarum проявил способность решения проблем собственного развития кратчайшим и эффективным путем, например, способностью найти выход из искусственного лабиринта, изучать условия окружающей среды и изменять поведение (направление роста и/или развития) в зависимости от внешних факторов в период своей активной деятельности.

Были проведены эксперименты для изучения поведения данного организма (Physarum polycephalum) при различных условиях среды и искусственных факторов воздействия. В частности, исследовали влияние уникальных антигрибковых соединений, которые использовались как репелленты. А также, анализировали поведение Physarum polycephalum при различных источниках пищи.

1. A. Dimonte, T. Berzina, V. Erokhin Basic Transitions of Physarum Polycephalum 2015 Federated Conference on Computer Science and Information Systems. 2015. 5. 599-606.

## ГЕТЕРОЛОГИЧНАЯ БАКТЕРИАЛЬНАЯ ФИТАЗА *PANTOEAE AGGLOMERANS*, ОПТИМИЗИРОВАННАЯ ДЛЯ ЭКСПРЕССИИ В РАСТИТЕЛЬНЫХ КЛЕТКАХ

Хабипова Н.<sup>a</sup>, Валеева Л.Р.<sup>a</sup>, Частухина И.Б.<sup>a</sup>, Шакиров Е.В.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ИФМиБ КФУ, Казань, Россия

<sup>b</sup> University of Texas at Austin, Austin, TX, 78712 USA

*khabipova@list.ru*

Фосфор – один из важнейших элементов минерального питания. Однако содержание доступных форм неорганического фосфора в природных источниках снижается, что обуславливает растущую проблему дефицита фосфорного питания растений и животных. В связи с этим одним из перспективных направлений в решении данной проблемы является использование бактериальных ферментов – фитаз, способных гидролизовать труднодоступные формы органического фосфора, высвобождая фосфаты.

Фитаза бактерии *Pantoea agglomerans* (*paPhyc*) обладает высокой ферментативной активностью. Кодон-оптимизация и химический синтез бактериального гена фитазы для последующего клонирования в растительный геном обуславливает необходимость исследования ферментативных и биохимических свойств рекомбинантного белка и его сравнения с нативной фитазой.

Цель работы - получение модифицированной бактериальной фитазы *Pantoea agglomerans* и изучение свойств рекомбинантного белка.

Оптимизированный ген фитазы *Pantoea agglomerans paPhyC* клонировали в молекулярный вектор pET 28 b. Полученную конструкцию pET 28 b *paPhyC* трансформировали в штамм *E.coli* DH 5 $\alpha$ . Полученный рекомбинантный вектор с геном оптимизированной фитазы субклонировали в экспрессионный штамм *E.coli* BL 21 pLysS для дальнейшего получения высокого выхода белка. Трансформацию подтвердили ПЦР-анализом и секвенированием. Была проведена индукция экспрессии фитазы *paPhyC* с использованием IPTG. Методом Western-blot анализа показано, что молекулярная масса оптимизированной рекомбинантной фитазы составляет около 40 кДа, что соответствует массе нативного фермента. Изучили активность рекомбинантной фитазы: наибольшая фитазная активность составила 1.1 Ед/мг при pH 5.5.

Таким образом, нами получен рекомбинантный штамм *E.coli* BL21 pLysS, экспрессирующий синтетический ген фитазы *Pantoea agglomerans*. Изучение экспрессии данного фермента и его ферментативных свойств станет одним из этапов в решении фундаментальных проблем, связанных с регулированием фосфорного обмена на клеточном уровне.

*Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 16-08-00583A.*

## ФУНГИСТАТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ БАКТЕРИЙ РОДА *BACILLUS* В ОТНОШЕНИИ ФИТОПАТОГЕННОГО МИКРОМИЦЕТА *FUSARIUM OXYSPORUM*

Хадиева Г.Ф., Лутфуллин М.Т., Мочалова Н.К., Марданова А.М.

Институт фундаментальной медицины и биологии К(П)ФУ, Казань, Россия  
g.h95@mail.ru

Биологический контроль представляет собой экологически безопасную альтернативу химическим пестицидам и является эффективным методом защиты растений от фитопатогенов. Представители рода *Bacillus* имеют большой потенциал использования в качестве агентов для биологического контроля различных болезней растений [1]. Выделены штаммы *B. subtilis*, проявляющие высокую антагонистическую активность в отношении таких серьезных патогенов многих сельскохозяйственных растений как микромицеты рода *Fusarium* [2]. Было доказано, что биопрепараты на основе бактерий рода *Bacillus* по эффективности сопоставимы с агрохимикатами.

Целью данной работы было изучение фунгистатической активности бактерий *B. subtilis* GM2 и GM5 в отношении фитопатогенного микромицета *F. oxysporum*.

**Материалы и методы.** Для исследования фунгистатической активности бактерий использовали метод двойной культуры. В жидкую среду Чапека вносили культуральную жидкость бактерий в соотношении 1:4 (40 мл среды Чапека и 10 мл культуральной жидкости). Для этого бактериальные культуры выращивали на среде LB в течение 3 сут при 37°C. Клетки удаляли с помощью центрифугирования при 13000 об/мин в течение 30 мин и затем культуральную жидкость фильтровали через стерильный мембранный фильтр с диаметром пор 0.22 мкн (СAMEO®, GVS, Италия). Микромицеты вносили в количестве 1 мл суспензии спор с концентрацией  $2 \times 10^5$  кл/мл и культивировали при 28 °C в течение 6 сут при аэрации на вибростенде (ПКА®KS 4000, Германия). Затем культуры микромицетов фильтровали через бумажный фильтр (Whatman №1), высушивали и взвешивали. Об ингибировании роста микромицета судили по величине сухой биомассы микромицетов в сравнении с контролем. Для изучения влияния термостабильности метаболитов с ингибирующей активностью использовали культуральную жидкость после автоклавирования. Уменьшение веса испытуемого микромицета рассчитывали по следующей формуле: Ингибирование (%) =  $(W_1 - W_2) / W_1 \times 100$ , где  $W_1$  – масса испытуемого микромицета в контрольных колбах (без бактериальной КЖ);  $W_2$  – масса микромицета в колбах с бесклеточной бактериальной культурой.

**Результаты.** Культуральная жидкость обоих штаммов эффективно ингибировала рост микромицетов в среде культивирования (GM2 на 82%, GM5 на 88%). Автоклавирование культуральной жидкости не приводило к потере ингибиторной активности, которая составляла в случае штамма GM5 89% и в случае GM2 80% ингибирования. Это свидетельствовало о том, что основная antimикробная активность связана с действием низкомолекулярных стабильных метаболитов. Таким образом, оба штамма обладают выраженной фунгистатической активностью в отношении *F. oxysporum*, связанной с действием экзометаболитов, продуцируемых бациллами в среду культивирования.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной К(П)ФУ для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект 14-83).*

1. P. Kumar, R.C. Dugey, D.K. Maheshwari *Bacillus* strains isolated from rhizosphere showed plant growth promoting and antagonistic activity against phytopathogens. *Microbiol Research.*, 2012, **167**, 493-499.
2. O. Baysal, D. Lai, H. Xu, M. Siragusa, M. Casiskan, F. Carimi, J.A. Silva, M.A. Tor A proteomic approach provides new insights into the control of soil-borne plant pathogens by *Bacillus* species. *PloS ONE*. 2013. **8(1)**, 1-12.

**ИЗУЧЕНИЕ ПРОТЕОЛИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ЗАКВАСОК  
МОЛОЧНОКИСЛЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА  
ФЕРМЕНТИРОВАННЫХ МЯСНЫХ ПРОДУКТОВ**

Хасанова А.Ф., Пономарев В.Я., Китаевская С.В. Юнусов Э.Ш.

КНИТУ, Казань, Россия

*aida.zf@mail.ru*

Использование стартовых культур заквасок молочнокислых микроорганизмов имеет решающее значение при производстве сыроподобной и сыровяленой продукции. Известно, что бактериальные препараты входящие в состав стартовых культур обладают протеиназной и пептидазной активностью. Молочнокислые микроорганизмы способны интенсивно расщеплять белки мышечной ткани (саркоплазматические и миофибриллярные), а также подвергать распаду трудноусвояемые белковые компоненты соединительной ткани. Чем интенсивнее развивается ферментативный гидролиз белков в мясопродукте, тем более нежную консистенцию он приобретает. При инокуляции микробных заквасок в колбасные изделия на стадии приготовления фарша продукты их метаболизма играют определяющую роль в образовании специфического аромата изделия.

Молочнокислые микроорганизмы, внесенные в мясное сырье, способствуют его размягчению, образуя растворимые в воде азотистые и безазотистые соединения, в результате чего готовый продукт приобретает требуемую консистенцию, а также характерный вкус и запах.

Целью данной работы являлось расширение информационных сведений о воздействии различных видов заквасок на модельные белковые субстраты с целью установления роли протеолиза в формировании качества ферментированных мясопродуктов. Объектами исследования служили следующие микробные закваски: *Lactobacterium casei*, *Lactobacterium fermentum*, *Lactobacterium plantarum* и *Bifidobacterium bifidum*. Работу вели на модельных субстратах, в качестве которых использовали 1%-й раствор сывороточного альбумина, а также водо- и солерастворимые белковые фракции мяса. Изучение протеолитической активности заквасок молочнокислых бактерий велось путем регистрации спектров поглощения согласно методу Варбурга и Христиана на спектрофотометре.

На основании проведенных исследований можно сделать вывод, что использование микробной закваски, содержащей штаммы *Lactobacterium casei*, является наиболее перспективным и целесообразным. Внесение закваски *Lactobacterium casei* привело к снижению интенсивности спектров поглощения всех рассматриваемых белковых фракций, накоплению в системе свободных аминокислот, регистрируемых в диапазоне длин волн 210-280 нм.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ В ТЕРАПИИ ИШЕМИЧЕСКОГО ИНСУЛЬТА

Хасанова Д.Г.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань,  
Россия*

*khasa.dina@yandex.ru*

В работе исследуется степень влияния медицинских показателей пациентов, у которых случился ишемический инсульт, на дальнейшее состояние больного. Это состояние связано с возможностью дополнительного кровоизлияния уже после того, как случился инсульт. Появление таких неблагоприятных последствий называется геморрагической трансформацией. Рассматриваются различия между отдельными группами пациентов: с геморрагической трансформацией и без нее.

Анализ, проведенный в работе, имеет большое практическое значение. В зависимости от полученных результатов, можно корректировать методики лечения и восстановления пациентов, у которых случился инсульт.

Проведенный статистический анализ медицинских показателей для пациентов с инсультом мозга с и без геморрагического исходов, позволил сделать следующие, практически важные, выводы.

1. Выявлено значимое различие между средними значениями медицинских показателей у пациентов с геморрагическим исходом и без него. Доказано, что основной вклад в разность средних определяется различием показателей «Объем инфаркта» и «Фракция выброса».

2. Полный корреляционный анализ медицинских показателей подтвердил значимость каждого медицинского теста с точки зрения невозможности прогнозирования каких-либо показателей по значениям других. Это особенно относится к пациентам без геморрагической трансформации. У пациентов с геморрагическим исходом выявлены слабые, не имеющие практического значения, но статистически значимые связи между рядом показателей. Дано объяснение наличия ложных корреляций.

Выявление ложных корреляций и их объяснение через влияние сопутствующих показателей позволяет правильно корректировать лекарственную терапию, направленную на приведение показателей в норму.

## ISOLATION AND IDENTIFICATION OF BACTERIA ASSOCIATED WITH RESPIRATORY TRACT INFECTIONS

Hassan Gamal Osman Osman, Karamova N.S.

*Institute of Fundamental Medicine and Biology, KFU, Kazan, Russia*

*gamal\_micro84@yahoo.com*

Respiratory tract infections (RTI) represent the most common acute illness evaluated in the outpatient setting. Moreover, acute RTI, in particular pneumonia, remain one of the most important causes of death in both adults and children. With approximately 1.4–1.8 million fatal cases per year in children under the age of five, pneumonia causes more fatalities than AIDS, malaria, and measles combined [1]. Though most infections are viral, bacterial infection is responsible for considerable morbidity and has potential for life-threatening sequential [2]. Correct identification of the pathogen involved is necessary for proper treatment, in particular appropriate prescription of antibiotics.

In this study we collected 100 bacteria samples from upper and lower respiratory tract of patients from different age groups with RTI symptoms in New Kasr Elaini University Hospital and Elrahma hospital, Egypt. For isolation, purification and identification of bacteria samples we used conventional biochemical methods, the API-10E, API-20E test systems and MALDI-TOF Mass Spectrometry method. The major pathogens were Gram-negative: *Candida tropicalis* - 20 samples, *Klebsiella pneumoniae* - 20 samples, *Escherichia coli* 8 - samples, *Pseudomonas aeruginosa* - 7 samples, *Acinetobacter baumannii* - 7 samples, *Enterobacter cloacae* - 1 sample, *Enterobacter aerogenes* - 1 sample. Gram-positive bacteria were represented by: *Staphylococcus epidermidis* - 16 samples, *Staphylococcus aureus* - 8 samples, *Enterococcus faecalis* - 1 sample, *Corynebacterium striatum* - 1 sample.

1. Bosch A., Biesbroek G., Trzcinski K., Sanders E., Bogaert D. Viral and Bacterial Interactions in the Upper Respiratory Tract. *PLoS Pathog.*, 2013, **9(1)**, e1003057.
2. Morris D.P. Bacterial biofilm in upper respiratory tract infections. *Current Infectious Disease Reports*. 2007, **9(3)**, 186-192.

## МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ АДСОРБЦИОННОЙ ИММОБИЛИЗАЦИИ ИНУЛИНАЗЫ НА ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦАХ

Холявка М.Г.<sup>a</sup>, Кондратьев М.С.<sup>b</sup>, Артюхов В.Г.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Институт биофизики клетки РАН, Московская область, Пущино, Россия

*holayavka@rambler.ru*

Выявление молекулярных механизмов получения и применения гетерогенных биокатализаторов и биосенсоров на основе инулиназы (КФ 3.2.1.7) расширяет наши представления о процессе ферментативного гидролиза полисахаридов, что позволит усовершенствовать существующие технологические пути получения фруктозы. Целью работы было выявление механизма адсорбции инулиназы и сайтов связывания полимерных матриц для иммобилизации с молекулой энзима: расчет значений аффинности фермента по отношению к носителям для иммобилизации, определение числа, типов и длин связей и взаимодействий между молекулой инулиназы и носителем на каждой стадии сорбции белковой глобулы.

В качестве модели фермента, ставшей мишенью для докинга, нами была выбрана структура инулиназы из *Aspergillus ficiuum* (PDB-ID: 3SC7). Выявлены наиболее вероятные сайты связывания полимерных матриц для иммобилизации с молекулой инулиназы, что позволяет в дальнейшем осознанно выбирать матрицу с центрами адсорбции фермента вдали от активного центра или вблизи его, но при этом существенно не изменяя пространственную ориентацию отвечающих за катализ аминокислотных остатков. Наиболее крупные из них следующие: 1) Arg 29, Pro 30, Ser 31, His 33, Thr 35; 2) His 82, Trp 83, His 85; 3) Glu 233, Phe 238, Glu 239, Pro 241; 4) Asn 305, Val 306, Ala 308, Gly 311, Arg 312, Arg 313. Остальные включают по 1-2 аминокислотных остатка: Asn 42 и Glu 43, Gln 59, Val 66 и Trp 67, Glu 97 и Phe 99, Tyr 104, Tyr 128, Arg 175, Phe 180, Arg 183, Asn 265, Asp 298, Asn 320, Gly 323, Leu 515.

Установлено, что ряд аминокислотных остатков входит в состав сразу нескольких контактных точек фермента с носителем, причем чаще это первый-второй и четвертый-пятый пары контактов. В расчетных данных при формировании практических всех комплексов инулиназы с носителями значительную роль играют ван-дер-ваальсовы взаимодействия и водородные связи. Кроме того, звенья полимерных носителей образуют связи и взаимодействия с другими звеньями своей матрицы.

## ВЛИЯНИЕ БЕЛКА HtrA BACILLUS SUBTILIS В АДАПТАЦИИ КЛЕТОК БАЦИЛЛ К СТРЕССОВЫМ УСЛОВИЯМ

Чернова Л.С., Каюмов А.Р.

*ФГАОУ ВО Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

*lsch-888@live.com*

HtrA – это мембрано-ассоциированные сериновые протеазы, индуцируемые тепловым шоком. У многих патогенных микроорганизмов HtrA является фактором патогенности. Например, у *Streptococcus mutans* протеиназа HtrA необходима для биогенеза внеклеточных белков, развития генетической компетентности и образования биопленки для выживания в стрессовых условиях.

Целью работы было установить значение белка HtrA *Bacillus subtilis* в адаптации клеток бацилл к стрессовым условиям.

Дифференциальное флюoresцентное окрашивание мертвых и живых клеток и Drop Plate анализ показали, что при температуре свыше 60 °C жизнеспособность клеток с гиперпродукцией HtrA в 6 раз выше по сравнению с контрольным штаммом.

В ходе исследования обнаружено образование роящихся колоний клетками *B.subtilis* с повышенным содержанием HtrA. Предполагается, что роение связано с кворум-зависимыми процессами, включая образование биопленок и синтез внеклеточного матрикса. Проверка на способность штаммов образовывать биопленки показала высокий уровень образования биопленок у клеток с гиперпродукцией протеазы. Чтобы оценить синтез внеклеточного матрикса, клетки выращивали на твердой питательной среде с красителем Congo Red. Колонии клеток гиперпродуцента характеризовались красным окрашиванием, что свидетельствовало о синтезе в матриксе амилоидов, а толщина окрашенной красителем колонии была в 1,5 раза больше, чем у исходного штамма.

Чтобы установить влияние HtrA на уровень экспрессии оперонов, участвующих в синтезе внеклеточного матрикса биопленки, были получены рекомбинантные штаммы с репортерными конструкциями *eps-LacZ* и *uqxM-LacZ*. Уровень активности β-галактозидазы в прикрепленных клетках показал, что гиперпродукция протеиназы HtrA приводит к повышенной экспрессии *eps* оперона и гена *uqxM* и образованию более плотной биопленки.

Таким образом, повышенный синтез протеиназы HtrA значительно повышает жизнеспособность клеток бацилл в условиях теплового стресса, стимулирует образование биопленки клетками *B.subtilis* и синтез ее внеклеточного матрикса.

## ИНАКТИВАЦИЯ ГОМОСЕРИНЛАКТОНА ВНЕКЛЕТОЧНЫМИ ПРОДУКТАМИ МИКРООРГАНИЗМОВ РОДА *BACILLUS*

Чугунова М.С., Каримов И.Ф.

ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет», Оренбург, Россия

*maria19-93@mail.ru*

Одной из наиболее перспективных мишеней для поиска нового поколения средств, реализующих ранее неизвестные механизмы биологической активности являются системы «чувства кворума» [1], опосредованные автоиндуktörами и воспринимающими их рецепторными белками, при достижении критической плотности бактериальной популяции активирующие выработку факторов вирулентности. Инактивация автоиндуktörатора является одной из перспективных стратегий подавления «чувств кворума», обеспечиваемая ферментами, образуемые, к примеру, микроорганизмами рода *Bacillus* [2].

В работе были использованы штаммы рода *Bacillus*, культивирование которых проводили в LB-бульоне, с последующим отделением и фильтрацией супернатанта через мембранный фильтр с диаметром пор 0,45 мкм. Затем полученный раствор в равных пропорциях смешивали с N-гексаноил-L-гомосеринлактоном (C<sub>6</sub>-АГЛ) и после инкубации добавляли к тест-культуре *C. violaceum* NCTC 13274, продуцирующей пигмент в присутствии автоиндуktörатора.

Была обнаружена различная активность внеклеточных продуктов использованных штаммов рода *Bacillus* к 72 часу культивирования, описываемая концентрацией инактивированного C<sub>6</sub>-АГЛ. В соответствии с данным критерием сравниваемые культуры были разделены на три группы: мало активные штаммы, обеспечивающие инактивацию не более 0,2 нг/мл и представленные *Bacillus licheniformis*, *Bacillus subtilis* 5020; штаммы со средним уровнем активности, инактивирующие от 0,3 до 0,7 нг/мл - *Bacillus cereus*, *Bacillus subtilis* 7092, *Bacillus subtilis* 12B и *Bacillus clausii*; высокоактивные штаммы *Bacillus subtilis* 534 и *Bacillus subtilis* 7048, внеклеточные продукты которых инактивировали не менее 0,98 нг/мл C<sub>6</sub>-АГЛ.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РНФ (№ 16-16-10048).*

1. Гинцбург А.Л., Ильина Т.С., Романова Ю.М.. Ж. Микробиология, 2003, **5**, 86-93.
2. Vinoj G. et al. Mar. Biotechnol., 2014, **16**, 707-715.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕКОМБИНАНТНОГО ГИСТОНА Н1.3 НА ХАНТАВИРУСНУЮ ИНФЕКЦИЮ В КУЛЬТУРЕ КЛЕТОК IN VITRO

Чулпанова Д.С., Соловьева В.В., Хайбуллина С.Ф., Ризванов А.А.

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

*daryachulpanova@gmail.com*

Хантавирусы являются возбудителями двух групп заболеваний у людей: геморрагической лихорадки с почечным синдромом (ГЛПС) и хантавирусного легочного синдрома (ХЛС) [1]. Однако, в настоящее время отсутствуют эффективные методы терапии для данных заболеваний. Лечение геморрагических лихорадок, вызываемых хантавирусами, сводится лишь к поддерживающей терапии. В настоящее время ряд клинических исследований показывает эффективность использования рекомбинантного гистона Н1.3 в терапии некоторых форм рака и вирусных инфекций [2].

В данной работе мы исследовали противовирусную активность рекомбинантного гистона Н1.3 на инфицирование клеток человека хантавирусной инфекцией *in vitro*. Уровень инфицирования клеток определили методом полимеразной цепной реакции в режиме реального времени (ПЦР-РВ) по экспрессии матричной РНК гена, кодирующего S сегмент хантавируса.

Экспрессия мРНК вирусного гена, кодирующего S сегмент вируса PHV, значительно снизилась в инфицированных клетках при добавлении рекомбинантного гистонного белка по сравнению с инфицированными клетками, в которые гистон не добавлялся. Таким образом, нами показано, что рекомбинантный гистон Н1.3 ингибирует хантавирусную инфекцию *in vitro*, что потенциально дает возможность применения рекомбинантного гистонного белка Н1.3 в качестве лекарственного препарата для терапии хантавирусных инфекций.

1. Vapalahti O., Mustonen J., Lundkvist A., Henttonen H., Plyusnin A., Vaheri A. *The Lancet. Infect. Dis.*, 2003, **3(10)**, 653-752.
2. Gross P., Joernvall H., Thiry M., Formicka-Zeppezauer C., Zeppezauer M., Патент US 20110034370 A1. Bis-met histones, Заявлено 07.04.2008, Опубл. 10.02.2011.

## ФЕНОТИПИЧЕСКАЯ И ГЕНОТИПИЧЕСКАЯ ИНДЕНТИФИКАЦИЯ ДЕТЕРМИНАНТ УСТОЙЧИВОСТИ К БЕТА-ЛАКТАМНЫМ АНТИБИОТИКАМ

Шайдуллина Э.Р., Марданова А.М

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

*aoisora86@gmail.com*

На сегодняшний день серьезной угрозой, связанной с распространением антибиотикорезистентности среди возбудителей нозокомиальных и внебольничных инфекций, является широкое распространение бета-лактамаз среди клинически значимых бактерий. Особое место в данной проблеме отводится распространению плазмидо-опосредованных бета-лактамаз расширенного спектра (БЛРС), а также карбапенемаз.

Настоящая работа посвящена фенотипической и молекулярно-биологической идентификации детерминант устойчивости к бета-лактамам у клинических изолятов *M. morganii* и *K. pneumoniae*. Фенотипическую идентификацию продуцентов БЛРС определяли методом «двойных» дисков, с использованием стандартных дисков с антибиотиками – амоксициллин/claveуланатом, цефтазидимом и цефатааксимом. Продукцию БЛРС определяли у клинических изолятов *M. morganii* 4 и 154 и *K. pneumoniae* 102, 103, 157, 194, 213, 216, 230 и 235, которые показали резистентность к цефалоспоринам III поколения при определении чувствительности к антибиотикам стандартным диско-диффузионным методом. Из десяти протестированных штаммов только штамм *M. morganii* 4 определен как БЛРС-отрицательный. Остальные 9 штаммов: *M. morganii* 154 и все штаммы *K. pneumoniae*, показали продукцию БЛРС, которая на чашке Петри проявляется появлением дополнительных зон лизиса рядом с дисками, содержащими ингибитор БЛРС - claveуланат.

Для генотипической характеристики генов бета-лактамаз нами был проведен биоинформационный анализ часто встречающихся генов бета-лактамаз широкого и расширенного спектра и карбапенемаз с использованием баз данных Gene (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/gene>) и ARDB (<http://www.ardb.cbcu.umd.edu>), на основании которых были сконструированы праймеры для идентификации БЛРС. Всего в работе использовали 13 пар праймеров, которые можно разделить на три группы. Праймеры 1 и 2 групп – к бета-лактамазам широкого спектра и к карбапенемазам – были взяты из статей; третья группа праймеров – к БЛРС – была сконструирована самостоятельно. Проводили ПЦР-амплификацию с геномной ДНК и ПЦР-продукты анализировали с помощью ДНК-электрофореза в агарозном геле. Нами показано наличие генов БЛРС типа *blaSHVc* и *blaCTX-m116* в штамме *M. morganii* 154; в штаммах *K. pneumoniae* 194, 216, 230 и 235 – генов бета-лактамаз широкого спектра типов *blaTEM*, *blaSHV* и *blaCTX-M*.

## ВЛИЯНИЕ УФ-СВЕТА НА ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ НЕЙТРОФИЛЬНЫХ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ЛОВУШЕК

Колтаков И.А., Шилов С.В., Артюхов В.Г

ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия

*sergie\_@list.ru*

АУФОК-терапия является одним из высокоэффективных методов иммунокоррекции, однако, до конца не изучено влияние УФ-облучения на механизмы реализации иммунного ответа. В связи с этим, на кафедре биофизики и биотехнологии ВГУ проводятся исследования по воздействию УФ-света на нейтрофильные внеклеточные ловушки (НВЛ) – образования, играющие ключевую роль в иммунном ответе нейтрофилов.

Образование ловушек происходит в присутствии латекса у 25 % нейтрофилов в течение 30 минут, что соответствует литературным данным.

Анализ микроскопических препаратов показал, что УФ-облучение в дозах 151 и 453 Дж/м<sup>2</sup> подавляет способность нейтрофилов образовывать НВЛ. При дозе 906 Дж/м<sup>2</sup> количество клеток, образовавших ловушки, достигло исходного уровня. При увеличении дозы облучения до 1359 Дж/м<sup>2</sup> 85% клеток образовали ловушки.

При секреции нейтрофильных внеклеточных ловушек происходит деиминизация гистонов под действием фермента пептидиларгининдеиминазы-4, что является причиной деконденсации молекул ДНК, разрыва клеточной мембраны и выхода ДНК в межклеточное пространство [1,2]. Одной из причин снижения образования НВЛ может являться образование сшивок между ДНК и гистонами. Поэтому решено было проверить, будет ли снижаться степень выхода гистонов из ядер нейтрофилов.

Нами показано, что при УФ-облучении в дозах 453, 956 и 1359 Дж/м<sup>2</sup> степень выхода гистонов из ядер снижается на 7,53, 9,30 и 15,78% соответственно. При дозе облучения 151 Дж/м<sup>2</sup> достоверного отличия от контроля не наблюдается. Аналогичные результаты были получены при исследовании влияния УФ-облучения предварительно выделенных ядер на выход гистонов. При этом часть ядер подвергалась инкубации в течение 30 мин при температуре 65 °C. Следовательно, прекращение секреции НВЛ под действием УФ-света имеет преимущественно ядерную природу и не связано, по-видимому, с цитоплазматическими процессами. Выявление данной закономерности при облучении нагретых ядер позволяет сделать вывод, что ключевую роль в этом процессе играет молекула ДНК.

1. Y. Wang, M. Li, S. Stadler, S. Correll, P. Li, D. Wang Histone hypercitrullination mediates chromatin decondensation and neutrophil extracellular trap formation. *J. Cell Biol.*, 2009, **184**, 205-213.

2. P. Li, M. Li, M. R. Lindberg, M. J. Kennett, N. Xiong, Y. Wang PAD4 is essential for antibacterial innate immunity mediated by neutrophil extracellular traps. *J. Exp. Med.*, 2010, **207**, 1853-1862.

## ОЦЕНКА ЦИТОТОКСИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ РАСТИТЕЛЬНЫХ ЭКСТРАКТОВ НА КЛЕТКИ АДЕНОКАРЦИНОМЫ ЛЕГКИХ ЧЕЛОВЕКА

Штырёва В.В., Камалова Я.Н., Зеленихин П.В.

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

*vika1411akva0903@rambler.ru*

В настоящее время ряд лекарственных растений привлекает внимание исследователей в качестве потенциальных источников лекарственных препаратов благодаря высокой биологической активности их компонентов по отношению опухолевым клеткам [1]. Целью нашего исследования явилась оценка цитотоксического действия экстрактов растений семейства Asparagaceae из подсемейств Nolinoideae (листья и корневища *Sansevieria cylindrica* и *S. trifasciata*) и Agavoideae (листья и клубни *Polianthes tuberosa*, листья *Yucca filamentosa* и *Furcraea foetida*) на клетки аденокарциномы легких человека A549.

Клетки A549 культивировали на среде RPMI-1640 с добавлением 10% сыворотки, глутамина, по 100 ед/мл пенициллина и стрептомицина в атмосфере 5% CO<sub>2</sub> при 37 °C. По достижении монослоем клеток 60% конфлюэнтности заменяли среду в лунках на свежую с добавлением водных растворов растительных компонентов, полученных из биомассы растений экстракцией метанолом с последующим упариванием при пониженном давлении в концентрации 100 мкг/мл и культивировали в течение 2 и 4 часов. Оценку цитотоксического действия проводили на проточном цитофлуориметре BD FACSCanto II при окрашивании клеток флуоресцентным красителем йодидом пропидия.

Экстракты листьев *Polianthes tuberosa* и *Furcraea foetida* оказывали выраженное цитотоксическое действие на клетки A549, проявляющееся в снижении количества живых клеток через 2 часа инкубирования до 53,97% и 88,97%, а через 4 часа до 40,77% и 70,6%, соответственно (в вариантах без добавления экстрактов количество живых клеток составило 98,6% и 97,9% для времени инкубации 2 ч и 4 ч). Остальные исследованные экстракты не проявляли цитотоксичности в отношении клеток линии A549.

Таким образом, установлено, что экстракты листьев *Polianthes tuberosa* и *Furcraea foetida* содержат компоненты, индуцирующие гибель клеток аденокарциномы легких человека A549 и могут являться источником перспективных агентов для терапии злокачественных новообразований лёгких.

1. Khazir J., Mir B.A., Pilcher L., Riley D.L. Role of plants in anticancer drug discovery. *Phytochem. Lett.*, 2014, 7(3), 173-181.

## СИСТЕМА КОНТРОЛЯ И УПРАВЛЕНИЯ МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ ВОЗДУХА В СТОМАТОЛОГИЧЕСКОЙ УСТАНОВКЕ

Юсупова Д.Р.<sup>a</sup>, Порунов А.А.<sup>b</sup>, Тюрина М.М.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ООО «Стоматологическая поликлиника №5» г. Казань, Россия

<sup>b</sup> Институт автоматики и электронного приборостроения,  
КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, Казань, Россия

*yusupova\_diana@mail.ru*

Воздушная среда стоматологических кабинетов является одним из основных путей передачи значительной части болезнетворных микроорганизмов, вызывающих большинство инфекционных заболеваний, т.к. проникают в организм человека воздушно- капельным путем. Пыль, содержащаяся в воздухе в результате применения абразивных материалов действует раздражающе на глаза, кожу и желудочно-кишечный тракт, но особенно страдают легкие. Поэтому создание систем контроля и управления медико-биологическими параметрами воздуха (СКиУ МБПВ) является чрезвычайно актуальным для практической стоматологии.

В докладе предложена и обоснована концепция структурного построения многоканальной СКиУ МБПВ в стоматологической установке, отличающей трехступенчатой технологией очистки воздуха, подаваемого от стоматологического пистолета в полость рта пациента и, как следствие, обладающей повышенной эффективностью процесса обеззараживания и пылефильтрации воздуха с учетом измеряемых текущих значений объема и степени загрязненности воздуха, как механическими частицами, так и микро-организмами. Представленные в докладе материалы достаточны для последующей схемно-конструкторской разработки опытного образца СКиУ МБПВ.

1. Юсупова Д.Р., Порунов А.А. Информационные аспекты построения СКиУ МБПВ. *Известия ЮФУ. Технические науки. Раздел III. Биотехнология, биомедицинские нано-технологии*, 2012, **11(136)**, 141-145.
2. Решение о выдаче патента РФ на изобретение по заявке №2015133661/03(051780). Устройство контроля и управления медико-биологическими параметрами воздуха в стоматологической установке. Авт. Порунов А.А., Тюрина М.М., Юсупова Д.Р..

## АНАЛИЗ И ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЫШЕНИЯ ДОСТОВЕРНОСТИ ОБНАРУЖЕНИЯ ЭПИЛЕПТИФОРМНОЙ АКТИВНОСТИ В АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ НЕВРОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ЗА СЧЕТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ПРЕДИКТОРОВ

Ягудина Р.О.<sup>a</sup>, Порунов А.А.<sup>b</sup>, Тюрина М.М.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ГАУЗ «Республиканский центр крови МЗ РТ» г. Казани, Казань, Россия

<sup>b</sup> Институт автоматики и электронного приборостроения,  
КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, Казань, Россия

777willbe@mail.ru

В последние 10-15 лет в России и в зарубежных странах (США, Канаде, Белоруссии) интенсивно проводится разработка и исследования автоматизированных систем неврологического мониторинга (АСНМ) для обнаружения эпилептиформной активности (ЭФА). Проблемой создания этих систем на современном этапе является недостаточная достоверность оценки обнаружения и прогнозирования приближения ЭФА.

В докладе на основе анализа и оценки современных тенденций и практических разработок предлагается использовать методы, позволяющие комплементарно оценивать состояние центральной нервной системы на основе дополнительных предикторов, характеризующих мозговое кровообращение и параметры функционирования сердечно-сосудистой системы человека.

При построении новых АСНМ, базирующихся на расширенном составе предикторов от различных физиологических систем, возникает задача синтеза алгоритмов, позволяющих автоматизировать процесс прогнозирования и обнаружения ЭФА в потоке сигналов, характеризующих состояние нервной системы человека. Для преодоления трудностей, связанных с отсутствием статистических характеристик входных сигналов, в работе предлагается использовать алгоритмы, реализующие принцип кворирования сигналов от различных физиологических систем человека.

Результаты исследований представлялись на конкурсе «50 лучших инновационных идей для РТ-2014» в виде проекта докладчика «Разработка и исследование нейростимулирующей системы обнаружения и предупреждения ЭФА с расширенным составом предикторов», который был отмечен дипломом в номинации «Социально-экономическое развитие РТ».

## ИММОРТАЛИЗАЦИЯ МЕЗЕНХИМНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК ЖИРОВОЙ ТКАНИ ЧЕЛОВЕКА И ИСЛЕДОВАНИЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВОЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА В РАЗЛИЧНЫХ НАПРАВЛЕНИЯХ

Яппарова О.Н.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, ИФМиБ, Казань, Россия

*Lesenok1803@mail.ru*

Мезенхимные стволовые клетки (МСК) являются перспективным материалом для регенеративной медицины и тканевой инженерии. Однако ограниченная пролиферация и снижение дифференцировочного потенциала первичных МСК *in vitro* препятствуют проведению длительных лабораторных исследований.

Целью работы является иммортализация и исследование свойств иммортализированной линии мезенхимальных стволовых клеток человека.

В ходе работы была иммортализирована линия мезенхимных стволовых клеток (иМСК) полученных из жировой ткани человека посредством подавления экспрессии гена *p53* и гиперэкспрессии каталитического компонента человеческой теломеразы (hTERT). Изменений в морфологии и кариотипе клеток обнаружено не было. Методом проточной цитофлуориметрии было показано, что экспрессия типовых маркеров МСК, включая CD90, CD105 и CD73, и отсутствие экспрессии маркеров гемопоэтических клеток CD45, CD34, CD11b, CD19 и HLA-DR. Тест на пролиферацию клеток показал, что время удвоения популяции иМСК *in vitro* было значительно ниже, чем у родительской линии клеток. Дифференцировка клеток была оценена на 10-33 пассажах. Клетки сохраняли потенциал к дифференцировке в хондрогенном, адипогенном и остеогенном направлениях, результаты не зависели от пассажа исследуемых клеток.

В результате выполненной работы была получена линия иМСК, обладающая высокой пролиферативной активностью и сохранившая потенциал к дифференцировке на поздних пассажах. Наши результаты свидетельствуют, что полученная клеточная линия может являться модельной для проведения фундаментальных исследований по изучению потенциала применения МСК в регенеративной медицине.

## **СЕКЦИЯ 2 НЕФТЕРАЗРАБОТКА, НЕФТЕПЕРЕРАБОТКА, НЕФТЕХИМИЯ**

## УЧЕТ НЕОДНОРОДНОСТИ ЗАВОДНЕНИЯ ПРИ СКВАЖИННОЙ ЗОНЫ В БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИХ КРУПНОБЛОЧНЫХ МОДЕЛЯХ

Абдрашитова Л.Р., Поташев К.А.

*Институт математики и механики им. Н.И.Лобачевского К(П)ФУ, Казань, Россия*

*lina.abdrashitova@yandex.ru*

При крупноблочном моделировании разработки нефтяных пластов, наиболее ярким примером которого является суперэлементное моделирование (СЭМ) [1], латеральные размеры блоков расчетной сетки могут достигать сотен метров. Такие грубые сетки позволяют значительно сокращать время расчета, однако задача двухфазной фильтрации формулируется относительно средних в каждом суперэлементе величин давления и насыщенности. Поэтому и функции, определяющие процесс вытеснения нефти водой, должны выражаться через средние насыщенности. Этими функциями являются функции относительных фазовых проницаемостей (ОФП), которые должны быть ремасштабированы с масштаба керна, на котором они измеряются, на масштаб грубой сетки [2]. Такая процедура называется апскейлингом и обычно основывается на условии наилучшего совпадения вычисленных на грубой и на детальной расчетных сетках фазовых потоков через грани блоков грубой сетки [3, 4].

Поскольку апскейлинг ОФП предполагает решение нестационарной задачи двухфазной фильтрации, то для снижения вычислительных затрат при решении эталонных задач на мелкой сетке вводятся допущения о существовании симметрии потока, позволяющей понизить размерность решаемой задачи.

В данной работе предлагается способ учета неравномерности завоdнения блока грубой расчетной сетки с добывающей скважиной при использовании ремасштабированных функций ОФП, полученных для данного блока в предположении об однородности граничных условий. Алгоритм сформулирован применительно к конечно-объемной схеме моделирования на грубой сетке. В основе способа лежит мнимое разделение области данного конечного объема (КО) на подсекторы и оценка локального распределения в них насыщенности через входящие в общую расчетную схему СЭМ средние величины насыщенности в данном и в инцидентных к нему КО.

Эффективность предложенного способа оценена путем сопоставления решений на мелкой и грубой сетках при различных вариантах распределения насыщенности вдоль границы расчетной области и фиксированных граничных значениях давления. Тестирование проведено для различных значений отношений вязкости воды и нефти. Показано, что предложенный способ в разы снижает величины невязок одновременно по суммарному дебиту, обводненности скважины и средней насыщенности в содержащем ее КО.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ и Правительства РТ (№№ 15-41-02698, 15-41-02699).*

1. Мазо А.Б., Поташев К.А., Калинин Е.И., Булыгин Д.В.. Моделирование разработки нефтяных месторождений методом суперэлементов. *Математическое моделирование*, 2013, **25**(8), 51-64.
2. Durlofsky L.J. Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.*, 1991, **27**(5), 699-708.
3. Wu X.H., Efendiev Y., Hou T.Y. Analysis of upscaling absolute permeability. *Discrete and Continuous Dynamical Systems. Series B*, 2002, **2**(2), 185-204.
4. Мазо А.Б., Поташев К.А. Апскейлинг относительных фазовых проницаемостей для суперэлементного моделирования разработки нефтяных пластов. *Математическое моделирование*, 2016, (принято к печати).

## ДЕТАЛЬНАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ ПЛАСТОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ, ОСЛОЖНЕННЫМИ ЭРОЗИОННЫМИ ВРЕЗАМИ

Ахметов А.Н.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия*

[azatakhmetovn@gmail.com](mailto:azatakhmetovn@gmail.com)

В пределах Мелекесской впадины открыто около полусотни многоэтажных и многообъектных месторождений высоковязкой нефти. Базисный объект разведки и разработки месторождений Татарстана – пласти терригенной толщи нижнего карбона (ТТНК) – представлен породами-коллекторами, сформировавшимися в прибрежно-морских условиях (нормальный тип разреза) и в долинах палеорек (эрэзионный тип).

Каждое скопление нефти в ловушках, осложненных эрозионными врезами, представляет собой систему простых (элементарных) залежей: верхняя, в зоне развития пластов ВВ<sub>1</sub> является обычно пластовой сводовой, литологически осложненной, а нижние (в зоне пластов ВВ<sub>0</sub>) – рукавообразными, с выклинивающимися к берегам палеореки пластами [1,2].

Детализация геологического строения одного из месторождений Татарстана дает основание для следующих рекомендаций при построении месторождений, которые осложнены эрозионными врезами:

- 1) Необходимо построить серию схем корреляций и геологических профилей, которые будут проходить в крест и вдоль палеорусла;
- 2) Перед созданием структурного каркаса модели необходимо построить серию структурных карт и карт изопахит пластов группы ВВ<sub>0</sub>;
- 3) Выделенные группы пластов ВВ<sub>0</sub> и ВВ<sub>1</sub> моделировать отдельно друг от друга;
- 4) Рекомендуемый способ разбиения на слои при построении структурного каркаса модели для пластов ВВ<sub>1</sub> – пропорциональный, а для пластов группы ВВ<sub>0</sub> – относительно кровли пласта ВВ<sub>01</sub>.

1. Мухаметшин Р.З. Условия образования нижнекаменноугольных эрозионных врезов Татарии и влияние их на нефтеносность. *Нефтегазовая геология и геофизика*, 1981, 3, 9-13.
2. Мухаметшин Р.З. Палеоврезы и их роль в освоении трудноизвлекаемых запасов нефти. М.: Геоинформмарк, 2006. 80 с.

## **НАРАЩИВАНИЕ РЕСУРСНОЙ БАЗЫ СВЕРХВЯЗКОЙ НЕФТИ И ПРИРОДНЫХ БИТУМОВ ПЕРМСКОГО КОМПЛЕКСА В ПРЕДЕЛАХ МЕЛЕКЕССКОЙ ВПАДИНЫ**

Ахметшин А.З.

*Татарское геологоразведочное управление ПАО «Татнефть», Казань, Россия*

*akhmetchine87@mail.ru*

Признание сверхвязкой нефти и природных битумов в качестве ближайшего резерва энергетического сырья в Российской Федерации предусматривает планомерное наращивание сырьевой базы данных видов УВ, подготовленной к промышленному освоению и ввод их в разработку.

На данный момент западная часть Республики Татарстан наименее изучена в отношении нефтебитумоносности пермского комплекса, в связи с чем, вопросы, связанные с локализацией зон распространения ресурсов тяжелого углеводородного на данной территории довольно актуальны.

В процессе работы над данной проблемой проанализированы сведения о коллекторах, нефтенасыщенности и лиофациальной принадлежности пермских (послекунгурских) отложений, собранные в виде единой базы данных (БД), отображающей данные о стратиграфической приуроченности и мощности нефтенасыщенных слоев, об интенсивности и равномерности нефтепроявлений, а также о характеристиках коллекторов и их лиофациальной принадлежности. Всего проанализированы материалы по 358 пробуренным структурным скважинам.

Результатом сбора, анализа и систематизации, имеющихся на момент проведения работ, геолого-геофизических материалов явилось обоснование точек заложения четырех структурных (с поисково-оценочными задачами) скважин. Осуществлено бурение данных скважин с сопутствующим комплексом ГРР (отбор керна, ГИС, испытания скважин на приток на естественном режиме и после ПТВ на продуктивные пласты, лабораторные исследования керна, проб УВ и пластовых вод). Из отложений пачки «слоистый камень» приказанской толщи в двух скважинах получены незначительные притоки УВ.

На базе систематизации и анализа всего массива геолого-геофизической информации оценены ресурсы тяжелого углеводородного сырья в послекунгурских отложениях и выделены 4 участка недр, рекомендуемые для поиска залежей СВН.

## НЕТРАДИЦИОННЫЕ КОЛЛЕКТОРА УГЛЕВОДОРОДОВ ЭФФУЗИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕВОМАЙСКОЙ ПЛОЩАДИ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Бакиев А.Г.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия*

*Bakiev-aupur@mail.ru*

Актуальность темы: необходимость изучения минералого-геохимических особенностей пород габбро-диабазовой формации Первомайской площади РТ, вскрытой глубокой скважиной 279. Использованы методы: макро изучение керна скважины, трещиноватости пород, оптический метод, РФА-анализ. Кроме осадочных пород коллекторские зоны могут быть связаны с эффузивными породами, изученные в бассейнах Австралии, Калифорнийского района США, на южном борту Суэцкого грабена, Западно-Сибирской НГП. В пределах Волго-Уральской НГП такие образования известны в пределах Камско-Бельского, Серноводско-Абдуллинского и Камско-Кинельского авлакогенов [1]. Они были вскрыты скв.279 Первомайской площади РТ, изучены тела габбро-диабазов, «силлоподобного» типа, вскрытых этой скважиной в интервале глубин 1700-2160 м, мощностью до 460 м. Габбро-диабазы – полнокристаллические мелкозернистые вулканические породы, по химическому и минеральному составу близкие к базальтам, характеризуются малым содержанием кремнезёма (45-52%), окраска от тёмно-серой до зеленовато-чёрной. По результатам изучения керна скважины были установлены проницаемые зоны нетрадиционных коллекторов больших глубин (трещиноватые проницаемые зоны), связанные с более поздними тектоническими процессами. Выделяются типы: *субвертикальные, субгоризонтальные, наклонные*, по типу заполнения трещин: *открытые и залеченные вторичными минералами*. Глинистые корочки «зеркала скольжения» сложены Fe-Mg хлоритами. В габбро-диабазах установлена специфическая рудная минерализация, влияющая на параметры фильтрационно-емкостных свойств пород (ФЕС) – «скелетные» кристаллы магнетита. Основная масса пород сложена неизмененными породообразующими минералами, однако плагиоклазы частично выветрелые. Коллекторские свойства пород связаны с развитием специфической формы пустотного пространства: порово-трещинного типа. В разрезе габбро-диабазов участки пород с развитием «скелетных» кристаллов магнетита формируют более плотные участки, которые оказывают влияние на параметры ГИС, внося свой вклад. Другой тип рудной минерализации связан пиритом трещиноватых участков эффузивных пород, где формируется комплекс рудных и глинистых минералов коллекторских зон трещинно-порового типа. Полученные результаты свидетельствуют, что это тела «силлоподобных» тел, имеющие субгоризонтальное залегание, где нетрадиционные коллекторские зоны связаны с трещинно-поровым типом пустотного пространства, которые могут являться вместе с углеводородов глубинного генезиса, изучению которых необходимо уделять большое внимание в свете «подпитки» современных месторождений УВ.

1. А.Г. Бакиев Рудная минерализация эффузивных комплексов Первомайской площади Республики Татарстан / Сборник тезисов Итоговой научно-образовательной конференции студентов Казанского федерального университета. 2015, Т.1, С.91.
2. Г.М. Саранчина, Н.Ф. Шинкарев. Петрография магматических и метаморфических пород. Изд-во Недра, Ленинград, 1967, 324 с.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ГИДРАВЛИЧЕСКОГО РАЗРЫВА ПЛАСТА В СРЕДЕ MATLAB

Бакиев М.Д, Пеньков Г.М.

*Санкт-Петербургский Горный Университет в г. Санкт-Петербурге, Санкт-Петербург,  
Россия*

*bakievmd@gmail.com, penkovgrigoriy@gmail.com*

Гидравлический разрыв пласта (ГРП) является одним из самых распространенных методов интенсификации притока из нефтяных и газовых резервуаров. Применительно к особенностям разных сфер приложения гидроразрыва пород развивались его теоретические основы и методы расчетов соответствующих физических процессов в породном массиве. Для условий нефтегазовых ГРП получили широкую известность работы С.А.Христиановича, Г.И.Баренблатта и Ю.П.Желтова, а за пределами России-работы Т.Перкинса и Л.Керна, Д.Гиртсмы и Ф.Клерка и др [1].

В данной работе были смоделированы некоторые методы расчета параметров ГРП. В основу математических моделей легли работы: Ю.Д.Дядькина, Ю.П. Желтова, Т.Перкинса и Л.Керна. Данные методы отличаются друг от друга выбором исходных параметров и подходом к рассмотрению трещины.

Результатом данной работы является сопоставление фактических и расчетных данных, полученных по результатам математического моделирования. Построены графики изменения скин-эффекта от параметров ГРП, сопоставление которых позволит выявить оптимальную математическую модель ГРП для конкретных условий нефтегазового пласта.

1. Дядькин Ю.Д. Методика расчета и пути управления параметрами геотермального гидроразрыва. В кн. Проблемы геотермального энергии. Межд. симп., Т.2, СПГГИ, 1995, С.80-98.
2. Желтов Ю.П., Христианович С.А. О гидравлическом разрыве нефтеносного пласта. *Изв. АН СССР. ОТН*, 1955, **5**, 3-41.
3. Perkins T.K, Kern L.R. Widths of hydraulic fracturing. *J.Petrol.Techol.*, 1961. **9**, 937-949.

## ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ

Бойцова А.А., Кондрашева Н.К.

*Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург, Россия*

*cadaga@mail.ru*

Для правильного выбора технологических режимов различных процессов добычи, транспорта и переработки нефти необходимо знание не только физико-химических свойств исследуемой жидкости, но и реологических. Объектом исследования является тяжелая нефть Ярегского месторождения и выделенного атмосферного остатка. Для определения реологических характеристик использован ротационный вискозиметр RN 4.1. Выявлено, что зависимость логарифма вязкости от обратной температуры для нефти имеет практически линейный вид, а значения, полученные для мазута хорошо аппроксимируются двумя прямыми с точкой пересечения, соответствующей 60°C, на основании чего можно предполагать о наличии фазового перехода среды. Зависимости свободной энергии и энтропии активации вязкого течения от температуры имеют линейный вид для нефти; для атмосферного остатка значения энтропии резко снижаются при температуре фазового перехода, а значения свободной энергии активации вязкого течения атмосферного остатка при температуре фазового перехода не имеют резкого изменения, а лишь меняют угол наклона, что говорит о происходящих изменениях в структуре исследуемой среды. Определено, что значения энтропии исследуемых систем выше нуля, то есть имеет место разрушение структуры. Следует отметить резкое снижение значений энтропии после температуры фазового перехода, что говорит о процессе упорядочивания структуры системы после 60°C. По результатам исследований была определена зависимость частоты перескоков от вязкости для нефти Ярегского месторождения и ее атмосферного остатка до и после температуры фазового перехода; выявлен ее степенный характер [1].

*Исследования выполнены в рамках реализации гранта Российского научного фонда (проект № 15-17-00017).*

1. Бойцова А.А., Кондрашева Н.К. Исследование изменения структурно-механических свойств тяжелой нефти Ярегского месторождения в результате ректификации. «Neftegaz.ru», 2016, **7-8**, 76-83.

## ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ АЛЮМООКСИДНОГО НОСИТЕЛЯ НА АДСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА НАНЕСЕННЫХ ЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ В РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ БУТАДИЕНА-1,3

Борецкая А.В., Ильясов И.Р., Ламберов А.А.

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

*ger-avg91@mail.ru*

В представленной работе исследовано влияние модифицирования кислотно-основными добавками гидроксидов алюминия - предшественников алюмооксидных носителей - на свойства нанесенных частиц палладия. В качестве модификаторов использовали водные растворы уксусной кислоты, фторида аммония, гидроксида натрия и нитрата цезия, которые смешивали с псевдобемитом с последующей прокалкой при 550 °C в токе воздухе и при 650 °C гидроксида алюминия, обработанного нитратом цезия. Полученные образцы оксидов алюминия использовали в качестве носителей, которые подвергали хемосорбционной пропитке раствором ацетилацетоната палладия в бензоле. Содержание палладия во всех образцах составило 0,5 масс %. Каталитические свойства образцов определяли в реакции гидрирования бутадиена-1,3. Согласно методу термопрограммированной десорбции амиака, введение кислотных модификаторов способствует приросту сильных кислотных центров; использование основных добавок приводит к уменьшению общей кислотности с увеличением доли средних и сильных кислотных центров. Исследование свойств нанесенных частиц палладия проводили методами термопрограммированного восстановления водородом и хемосорбционного титрования монооксидом углерода с последующей десорбицией диоксида углерода, которые показали, что введение кислотных добавок при синтезе носителя приводит к формированию большего числа электрон-дефицитных частиц палладия. Основные добавки способствуют понижению концентрации сильных кислотных центров носителя и, как следствие, образованию частиц палладия с высокой электронной плотностью. Катализатор на основе не модифицированного носителя обеспечивает степень превращения бутадиена-1,3 до 56 % и селективность по целевому компоненту, бутен-1, - 35 %. Образцы, полученные при модифицировании носителя основными добавками, демонстрируют высокие показатели конверсии бутадиена-1,3 до 81 % с селективностью по бутен-1 до 37 %. Образцы катализаторов, приготовленные с использованием кислотных добавок, способствуют низкой конверсии до 41 %, однако, обеспечивают высокую селективность по бутен-1 до 59 %.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ БОБРИКОВСКИХ ЗАЛЕЖЕЙ НЕФТИ В ЗОНАХ РАЗВИТИЯ ВИЗЕЙСКИХ ВРЕЗОВ

Валеева С.Е., Баранова А.Г.

*Институт проблем экологии и недропользования Академии наук РТ, Казань, Россия*

*ssalun@mail.ru*

Моделирование бобриковских залежей нефти выполняется, используя весь комплекс геолого-геофизической информации: набор опорных литолого-стратиграфических поверхностей, построенных по результатам интерпретации и корреляции ГИС, по данным бурения, а также комплексной интерпретации сейсморазведочных работ, магниторазведки и гравиразведки, согласованных с геологическими представлениями о тектоническом строении региона. Применение современных программных средств позволяет использовать весь имеющийся геолого-геофизический материал для достоверной структурно-литопетрофизической оценки межскважинного пространства и построения адекватной модели месторождения.

Главная особенность моделирования бобриковских залежей заключается в обязательном учете такого характерного признака, как залегание нефтенасыщенных пластов в виде линз, выклинивающихся в сторону бортов вреза. При этом необходимо учитывать характер изменения кровли и подошвы этих линз, т.к. их строение отличается от вышележащих по разрезу площадных залежей. Именно это обстоятельство вызывает необходимость послойного коррелирования бобриковской толщи и прослеживания каждого эффективного прослоя по всей площади поднятия, контролирующего залежи, и исключает возможность объединения в один подсчетный объект двух (и более) прослоев, выделенных в разных пластах горизонта. Каждый из таких эффективных нефтенасыщенных пластов является самостоятельным объектом подсчета.

В общем случае можно утверждать, что бобриковские залежи на месторождениях, где визейские врезы выявлены или прогнозируются по ГИС, являются многопластовыми, причем ВНК каждой из них может иметь собственное высотное положение. Отсюда следует, что объединение бобриковских пластов в единый объект подсчета приводит к неверным результатам. Сравнение метода подсчета запасов, игнорирующего высотное и площадное развитие конкретных эффективных пластов и объединяющего эти пласти в один объект подсчета, с результатами геологического моделирования на основе послойной корреляции пластов и их пространственного положения показано на примере Аделяковского месторождения РТ. Если карты по кровле продуктивных отложений при разделении на пласти и при их совмещении совпадают, то карты по подошве продуктивных отложений и по подошве отдельных пластов различаются. Но самое явное различие проявляется на карте нефтенасыщенных толщин, которая не повторяет карты по отдельным пластам и построена с применением простого суммирования толщин по остальным пластам. В этом случае возникает такое явление, как завышение объема нефтенасыщенных пород. Хотелось бы отметить, что основная цель подсчета запасов нефти – подсчитать не большее количество запасов, а более точное и достоверное, что и достигается в процессе разделения толщи всего горизонта на отдельные пласти как самостоятельные подсчетные объекты.

## ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЙРОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПЕРАТИВНОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ГИС

Валидов М.Ф.<sup>a</sup>, Судаков В.А.<sup>a</sup>, Усманов С.А.<sup>a</sup>, Волосков Д.С.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия

<sup>b</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

*marat.validov@gmail.com*

Геофизические методы исследования скважин (ГИС) являются основой изучения нефтяных месторождений. Данные ГИС позволяют изучать геологическое строение месторождений и продуктивных горизонтов, как в локальном, так и в региональном масштабах.

Результатом ручной интерпретации ГИС является стратиграфические отбивки пластов, литотипы (фации), кривые пористости, проницаемости и нефтенасыщенности.

Использование нейросетевых алгоритмов интерпретации данных ГИС позволяет проинтерпретировать скважины заданного региона в значительно более короткие сроки по сравнению с ручной интерпретацией.

В данной работе представлены результаты разработки методики использования нейросетевых алгоритмов при машинной интерпретации данных ГИС для выделения литотипов и расчета коэффициента пористости.

Заложенный в коде нейросетевой алгоритм позволит интерпретировать скважины других участков с обязательной тренировкой на скважинах этих участков и с корректировкой настроек коэффициентов.

1. D. Tiab, E.C. Donaldson, Petrophysics, 4th Edition Theory and Practice of Measuring Reservoir Rock and Fluid Transport Properties, 2015
2. S. Haykin, Neural Networks: A Comprehensive Foundation Second Edition, 2008

## ОЦЕНКА НЕФТЕГЕНЕРАЦИОННОГО ПОТЕПНЦИАЛА ДОМАНИКОВОЙ ПОРОДЫ ПО ДАННЫМ ЭПР АНАЛИЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ ПИРОЛИЗА

Габдрахманов Д.Т.<sup>a</sup>, Хасанова Н.М.<sup>a</sup>, Каюкова Г.П.<sup>a,b</sup>, Морозов В.П.<sup>a</sup>, Михайлова А.Н.<sup>b</sup>, Вахин А.В.<sup>a</sup>, Базаревская В.Г.<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

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

<sup>c</sup> Институт «ТатНИПИнефть», Бугульма, Россия

[damir\\_chelny@mail.ru](mailto:damir_chelny@mail.ru)

Отложения семилукского (доманикового) горизонта широко распространенные на территории Татарстана являются аналогом нефтеносных сланцев, повышенный интерес к которым в последние годы обусловлен возможностью извлечения из них сланцевой нефти [1]. Отличительной их особенностью является то, что процесс преобразования органического вещества в нефть еще не завершен. Поэтому в породе наряду с легкой нефтью [1] содержится нерастворимое органическое вещество – кероген, рассматриваемый в качестве возможного источника углеводородов в продуктивных комплексах Ромашкинского месторождения. Цель работы заключается в изучении особенностей термического преобразования (пиролиз) органического вещества доманиковой породы, в том числе керогена, с целью разработки научных основ для создания технологий промышленной добычи нефти из данных отложений. Объектами исследования служили два образца кернового материала, отобранного из разных интервалов отложений семилукского горизонта Березовской площади Ромашкинского месторождения, а также образец породы после автоклавного опыта, проведенного при температуре 300°C в течение 5 часов в углекислотной среде. Пиролиз проб проводили последовательно в две ступени при 350 и 600°C в водородной среде в течение 30 минут каждая. Первая температура является переходной между режимом испарения и деструкции образца, вторая – соответствует завершению его термической деструкции. Исследование парамагнитных свойств исходных и термоактивированного образцов проводили методом ЭПР. Спектры ЭПР сняты при комнатной температуре с разверткой магнитного поля 1400 Гс для регистрации ионов Mn<sup>2+</sup>, VO<sup>2+</sup> и 100 Гс для регистрации ион радикалов и свободных радикалов органического вещества, находящегося в породе. Результаты пиролиза позволили провести моделирование природных и техногенных условий созревания органического вещества, так как повышение температуры вызывает деструкцию органического вещества, в том числе полимерных соединения типа керогена, с образованием менее сложных соединений – углеводородов. Результаты распределения концентраций радикалов органического вещества в исследованных образах представлены на рисунке 1.

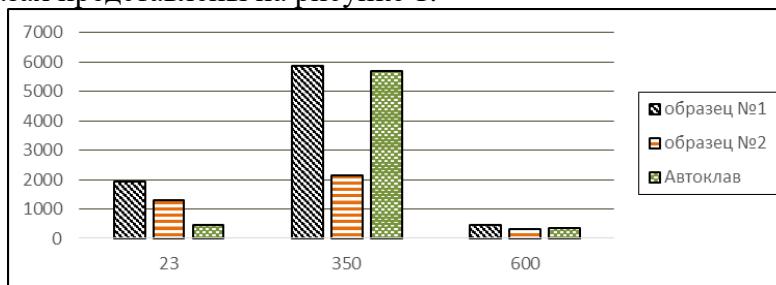


Рисунок 1. – Сравнение концентраций свободных радикалов органического вещества (в ampl/mg) исходных образцов и продуктов пиролиза при 350°C и 600°C.

Установлено, что доманиковые отложения на территории Березовской площади обладают большим нефтегенерационным потенциалом. Органическое вещество доманиковой породы представлено сингенетичным битумоидом и керогеном, который на данной территории не достиг степени катагенеза, соответствующей главной фазе нефтеобразования. Получены доказательства, свидетельствующие о потенциале доманиковых толщ как источников синтетической (керогеновой) нефти при ее термической обработке.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-45-02689  
р\_поворотье\_a.*

1. Муслимов Р.Х., Плотникова И.Н. О сланцевой нефти Республики Татарстан. *Нефтяное хозяйство*, 2014, **1**, 12-15.

## ВЫЯВЛЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА НЕФТЕЙ И БИТУМОИДОВ ИЗ ПОРОД ПО РАЗРЕЗУ БЕРЕЗОВСКОЙ ПЛОЩАДИ

Габдрахманов Д.Т.<sup>a</sup>, Михайлова А.Н.<sup>b</sup>, Каюкова Г.П.<sup>a,b</sup>, Плотникова И.Н.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия

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

*damir\_chelny@mail.ru*

Березовская площадь расположена в северо-западной части Ромашкинского месторождения, которое приурочено к сводовой части Южно-Татарского свода и представляет собой сложный многопластовый уникальный объект. С запада площадь ограничена Алтунино-Шунакским прогибом, являющимся отражением глубинного тектонического разлома в осадочном чехле. На тектоническую активность кристаллического фундамента в девонское время в пределах данной территории указывают установленные в девонских отложениях прослои вулканического туфа и крутопадающие тектонические трещины. Объектами исследования служили образцы нефти и керна из девонских ( $D_3dm$  и  $D_3md$ ,  $D_3tm$ ,  $D_3psh$ ,  $D_2gv$ ,  $D_2st$  osk) отложений, а также образцы керна из пород фундамента. Определен тип исходного органического вещества и степень его катагенетической преобразованности, а также нефтегенерационный потенциал пород исследуемых отложений. Для генетических суждений использовали общепринятые при исследованиях газохроматографические коэффициенты, представляющие собой отношение пристан/фитан ( $\Pi/\Phi$ ),  $\Pi/n\text{-C}_{17}$  и  $\Phi/n\text{-C}_{18}$ , а также «нечетности», позволяющие оценить окислительно-восстановительную обстановку в раннем диагенезе и катагенетические и миграционные процессы на последующих стадиях формирования залежей. Кроме того, в работе исследовали показатели, отражающие характер распределения н-алканов состава  $C_{10}$ – $C_{30}$  и высших полициклических углеводородов – биомаркеров (стеранов, терпанов). Выявлены отличительные особенности состава нефтий и битумоидов доманиковой формации от нефтий поддоманиковых отложений и битумодов из пород фундамента. Показан близкий компонентный состав битумоидов из пород фундамента и терригенных толщ девона и выявлена общность восстановительных условий их осадконакопления, что свидетельствуют о наличии глубинной флюидной составляющей в формировании нефтегеносности осадочных толщ на исследуемой Березовской площади.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-45-02689  
р\_поволжье\_a*

## БИОДЕГРАДАЦИЯ СМАЗОЧНЫХ МАСЕЛ УГЛЕВОДОРОДОКИСЛЯЮЩИМИ МИКРООРГАНИЗМАМИ

Галлямова С.Р., Морозов Н.В., Ганиев И.М.

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

*galliamova95@mail.ru*

Использование объектов нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности дает начало образованию больших объемов различных поллюантов, оказывающих отрицательное влияние на сточные воды и почву. Одними из наиболее опасных и часто встречаемых загрязнителей являются смазочные масла и сама нефть. Они влияют на жизнедеятельность почвенной и водной микрофлоры, фауны угнетая их физиологические и биохимические процессы, что впоследствии наносит большой урон экологии нашей страны.

Таким образом, наиболее экономически выгодным и экологически чистым способом решения данной проблемы может стать применение ассоциации отселектированных углеводородокисляющих микроорганизмов, участвующих в биодеградации углеводородных загрязнителей. Главным принципом данного процесса является разложение углеводородов до углекислого газа и воды.

При изучении микробиологической биодеградации смазочных масел, нами были использованы углеводородокисляющие микроорганизмы ранее выделенные из производственных сточных вод ОАО «Казаньоргсинтез», промышленной нефтебазы, многочисленных автохозяйств, теплоэлектроцентрали (ТЭЦ №2) и городского коллектора г. Казани. На основе изучения их культуральных, биохимических, физиологических свойств были выявлены наиболее активные штаммы в биодеградации широкого класса углеводородов, начиная с n-алканов до циклических углеводородов. Проведена идентификация, изучаемых активных микроорганизмов при помощи методов биотипизации и секвенирования, до родов: *Pseudomonas* (2 вида), *Brevibacterium* (2 вида), *Alcaligenes* (1 вид), *Micrococcus* (1 вид), *Bacillus* (1 вид), *Flavobacterium* (1 вид), *Clostridium* (1 вид).

Также предварительными опытами установлено, что эффективность разложения смазочных масел (трансформаторного и дизельного) возрастает в присутствии сорбентов и при соблюдении определенных условий среды.

## ВЛИЯНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ЗАБОЙНОГО ДАВЛЕНИЯ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СКВАЖИН БАШКИРСКОГО ЯРУСА НА ПРИМЕРЕ НГДУ «ЯМАШНЕФТЬ»

Гимазова Л.Я., Ефарова А.А.

*Альметьевский государственный нефтяной институт, Россия, РТ, Альметьевск, Россия*

*Leisan2202@mail.ru ,lela-alena@mail.ru*

Снижение забойного давления скважин ниже давления насыщения принято считать одним из способов интенсификации разработки нефтяных месторождений [1]. При разработке месторождений с применением законтурного и внутриконтурного заводнения данное снижение давлений является вполне приемлемым. Прогнозирование динамики продуктивности добывающих скважин в сложных геолого-физических условиях является одной из важных задач при установлении режимов работы скважин.

Однако, в процессе эксплуатации, бурения и последующего освоения происходит снижение продуктивности скважин, вследствие уменьшения забойного давления ниже давления насыщения в процессе разгазирования нефти. Если сохранить пластовое давление выше давления насыщения, то разгазирование нефти происходит только в ограниченной зоне вокруг скважин [2].

Авторами в данной работе на примере НГДУ «Ямашнефть» рассматривается вопрос изменения обводненности, депрессии на пласт и проводится анализ влияния забойного и пластового давления на дебиты жидкости для отложений башкирского яруса. В процессе анализа определена минимально допустимая величина забойного давления и рассматривается возможность снижения забойного давления ниже давления насыщения и ее влияние на продуктивность скважин в пределах отложений башкирского яруса. Отмечено, что при снижении забойного давления может происходить как уменьшение, так и увеличение коэффициента продуктивности, что является взаимообратимым процессом. Доказано снижение продуктивности скважин, эксплуатирующихся при забойных давлениях ниже давления насыщения из-за снижения фазовой проницаемости по жидкости в призабойной зоне продуктивного пласта при разгазировании нефти. В результате снижения коэффициентов продуктивности и производительности скважин увеличиваются сроки выработки извлекаемых запасов нефти. Для решений данной проблемы предлагается сохранение пластового давления на высоком уровне, что достигается при помощи раннего ввода в эксплуатацию системы ППД.

1. Вахитов Г.Г. Максимов В.П., Булгаков Р.Т., Валиханов А.В., Мирзаджанзаде А.Х., Аметов И.М., Мамед-Заде А.М., Азизов М.Г. Разработка месторождений при забойном давлении ниже давления насыщения. М., Недра, 1982, 229 с..
2. Мордвинов В.А. Поплыгин В.В. Управление продуктивностью скважин. Пермь: Изд-во Перм. нац. иссл. политехн. ун-та, 2011, 136 с.

**РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ ЛИТОЛОГИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ БИТУМНЫХ ПОДНЯТИЙ ШЕШМИНСКОГО ГОРИЗОНТА  
УФИМСКОГО ЯРУСА РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН**

Грунис Е.Г.

*Татарское геологоразведочное управление ПАО «Татнефть», Казань, Россия*

*evgenii.grunis@mail.ru*

Предметом и целью исследования проведенной работы является следующее: разработать и проанализировать алгоритм интерполяции литологической модели для геологической структуры, на примере двух поднятий сверх вязкой нефти, с нерегулярной (неравномерной) сеткой пробуренных на этой структуре скважин используя современные геоинформационные системы и технологии, в качестве которых выступает программный комплекс Petrel 2013 компании Schlumberger. В результате проведенного исследования поставленная цель работы была достигнута. Полученные результаты могут быть применимы для моделирования к аналогичным описанным в статье песчаным битумным поднятиям. В данной публикации показано превосходство геостатистического анализа данных над традиционным детерминистическим подходом применяемом в геомоделировании при подсчете запасов.

## **БИОУДОБРЕНИЯ НА ОСНОВЕ АБОРИГЕННЫХ ШТАММОВ МИКРООРГАНИЗМОВ ДЛЯ БИОРЕМЕДИАЦИИ НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ ЗЕМЕЛЬ**

Давлетшина А.Я., Дегтярева И.А.

*ФГБНУ «Татарский НИИАХП», Казань, Россия*

*kindness2006@mail.ru*

Для биоремедиации нефтезагрязненных почв и последующего получения на них экологически безопасной продукции созданы биоудобрения, основой которых являются углеводородокисляющие микроорганизмы, найденные в естественных условиях Республики Татарстан.

Исследования состояли из этапов: первый – количественный анализ почв Татарстана, загрязненных сернистой и девонской нефтью, на присутствие углеводородокисляющих микроорганизмов; второй – выделение и отбор эффективных штаммов по углеводородокисляющей активности (до 80-85%) и способности к деструкции различных алифатических и ароматических углеводородов (дизельное топливо, вакуумный газойль, мазут, толуол, гексан и др.); третий – определение совместимости штаммов методом штрихов и блоков; четвертый – их идентификация молекулярно-биологическими методами; пятый – депонирование углеводородокисляющих микроорганизмов консорциума А (*Micrococcus luteus* M-171, *Staphylococcus pasteurii* S1-717, *Staphylococcus pasteurii* S2-717) и консорциума Б (*Pseudomonas stutzeri* P-1026, *Achromobacter insolitus* A-102, *Achromobacter xylosoxidans* A-10) в Ведомственной коллекции полезных микроорганизмов сельскохозяйственного назначения Россельхозакадемии; шестой – создание жидких биоудобрений на основе вышеуказанных консорциумов в соотношении 1:1 с плотностью бактериальной суспензии до  $2,5 \cdot 10^{12}$  КОЕ/см<sup>3</sup>.

С созданными биоудобрениями были заложены вегетационные опыты на черноземной и серой лесной почвах, загрязненных дизельным топливом (5%). Внесение биоудобрений, на основе вышеприведенных консорциумов, способствовало снижению концентрации углеводородов на 52,5 и 70,0% соответственно, активному росту углеводородокисляющей микрофлоры и снижению фитотоксичности почв. Обладая полифункциональными положительными свойствами, микроорганизмы консорциумов активно встраиваются в естественную популяцию, быстро адаптируются и начинают эффективно разлагать углеводороды, используя их в качестве питания и энергии.

Применение биоудобрения на основе высокоэффективных аборигенных углеводородокисляющих микроорганизмов позволяет ускорить рекультивацию нарушенных земель, в том числе сельскохозяйственного назначения, и получать экологически безопасную продукцию растениеводства.

## ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МНОГОВАРИАНТНЫХ РАСЧЕТОВ ПРИ АДАПТАЦИИ ИСТОРИИ РАЗРАБОТКИ В ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕФТЯНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Делев А.Н., Усманов С.А.

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

*AIndelev@kpfu.ru*

В настоящее время в республике Татарстан разрабатывается множество небольших месторождений, которые, как правило, имеют слабую изученность. В связи с этим, перед специалистами остро встает проблема недостатка данных при геолого-гидродинамическом моделировании, что приводит к необходимости выявлять факторы, к которым чувствительна модель, определять, как, в какой мере они влияют на качество адаптации.

Объектом моделирования в данном проекте является нефтяное месторождение (разработка ведется с 60-х годов). Среди имеющейся информации практически отсутствовали данные исследования керна, специальные исследования керна (относительные фазовые проницаемости, капиллярные кривые) отсутствовали. Недостаток данных обусловил значительную неопределенность при построении кубов литологии, фильтрационно-емкостных свойств, относительных фазовых проницаемостей.

При создании гидродинамической модели в симуляторе tNavigator была проведена серия из 30 многовариантных расчетов с применением латинского гиперкуба в качестве метода планирования эксперимента. Выявлено, что наиболее значимыми параметрами, влияющими на адаптацию модели, являются положение водонефтяного контакта (ВНК) на второй залежи и абсолютная проницаемость по горизонтали. В результате расчетов было уточнено положение ВНК.

В результате проведенной работы на примере реального месторождения показано как интегрированный подход к моделированию позволяет не только адаптировать динамические модели, но и уточнять геологические модели по данным истории разработки.

1. А.Е. Алтунин, М.В. Симухин, О.А. Ядрышникова. Методы анализа различных видов неопределенности при моделировании нефтегазовых объектов. *Научно-технический вестник ОАО «НК «Роснефть»*, 2015, **1**, 66-72.

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОРОДЫ И КАТАЛИЗАТОРА НА ПИРОЛИЗ КЕРОГЕНА ТИПА II МЕТОДОМ ТГ / ИК

Емельянов Д., Агеенко В., Варфоломеев М.

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

*dima\_emelyan@mail.ru*

На фоне истощающихся запасов нефти возникает потребность в поисках альтернативных источников углеводородов, одним из которых является кероген. Запасы данного сырья составляют приблизительно 35% от мировых ресурсов углеводородов и представляют высокий интерес с точки зрения нефтедобычи. Обычно, превращение керогена в пригодную для использования форму энергии осуществляется путем пиролиза или сжигания. В то время как изучение окисления керогена представляет большой интерес для оптимизации процессов прямого извлечения энергии путем сжигания, результаты, полученные при изучении термического разложения, необходимы для понимания процессов, протекающих при проведении искусственного старения керогена внутри пласта.

В настоящей работе пиролиз керогена Баженовской свиты был изучен методом термогравиметрии, совмещенной с ИК спектрометрией, в температурном интервале 25 – 800 °C в среде азота при скоростях нагрева  $\beta = 5, 10, 15$  и  $20 \text{ К мин}^{-1}$ . Было установлено, что при пиролизе керогена наблюдаются две стадии потери массы  $\Delta m_1 \approx 28\%$  и  $\Delta m_2 \approx 9\%$ . Первая соответствует пику пиролиза керогена,  $T_{\text{пик } 1} = 434 \text{ }^{\circ}\text{C}$  при  $\beta = 10 \text{ К мин}^{-1}$ , тогда как вторая относится к разложению пирита ( $T_{\text{пик } 2} = 527 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Этот вывод подтверждается анализом ИК-спектров газообразных продуктов, выделяющихся в ходе реакции. Так, при  $T_{\text{пик } 1} = 434 \text{ }^{\circ}\text{C}$  наблюдается максимум в области валентных колебаний СН-групп ( $2800\text{-}3100 \text{ см}^{-1}$ ). В противоположность первому процессу, при  $T \geq 527 \text{ }^{\circ}\text{C}$  в ИК-спектре не наблюдаются пики, соответствующие наличию органических продуктов. Данные, полученные при различных скоростях нагрева, позволили рассчитать кинетические параметры процесса пиролиза керогена.

Влияния породы на разложение керогена было изучено на примере его смеси с доломитом. Показано, что порода не оказывает существенного влияния как на положение пиков на дифференциальных термогравиметрических кривых, так и на энергию активации процесса деструкции керогена. Влияние добавок  $\text{MnO}_2$ , являющегося перспективным катализатором, на процессы пиролиза керогена также было изучено в настоящей работе.

## СПОСОБЫ УЛУЧШЕНИЯ СМАЗЫВАЮЩИХ СВОЙСТВ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

Еремеева А.М.<sup>a</sup>, Кондрашева Н.К.<sup>a</sup>, Олейник И.Л.<sup>a</sup>, Алипов Д.Е.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

*eremeevaanzhelika@rambler.ru*

Интенсивность изнашивания двигателей автомобилей зависит от наличия, свойств и размеров смазочной пленки, образующейся на поверхности металла. Пленка может состоять из различных гетероатомных соединений топлива. Гидроочищенные дизельные топлива содержат, в основном, вещества, не обладающие достаточно хорошей адсорбционной и хемосорбционной активностью для образования пленки [2].

Наибольшая эффективность достигается при использовании в качестве добавки смеси сложных эфиров. Одним из методов их получения является синтез на основе растительных компонентов и спиртов [1]. Однако введение кислородсодержащих соединений ухудшает окислительную стабильность топлив.

Другим методом улучшения смазывающей способности является введение в гидроочищенное дизельное топливо азотсодержащих соединений. Эффективность от применения данных веществ значительно меньше, но при их использовании такой показатель как окислительная стабильность остается в пределах допустимой нормы.

Проведенные исследования показывают варианты снижения смазывающей способности топлива в зависимости необходимой эффективности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере.

1. С.И. Дворецкий, А.Н. Зазуля, С.А. Нагорнов, С.В. Романцова, И.А. Рязанцева Производство биодизельного топлива из органического сырья Специальный выпуск (39) - Москва: Изд. Университет им. В.И. Вернадского, 2012.

2. Н.К. Кондрашева, А.М. Еремеева Получение и исследование биодизельного топлива на основе кукурузного масла и бутилового спирта. Академический журнал Западной Сибири, 2014, **10(2)**, 24.

## ДОЛОМИТОВЫЕ КОЛЛЕКТОРЫ КАМЕННОУГОЛЬНЫХ ОТЛОЖЕНИЙ МЕЛЕКЕССКОЙ ВПАДИНЫ И ЮЖНО-ТАТАРСКОГО СВОДА

Ескин А.А.

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

*Eskin.aleksey@gmail.com*

Вторичные доломитовые коллекторы в нефтеносных районах Волго-Уральской антиклизы традиционно являются наиболее перспективными для промышленной разработки. В первую очередь это связано с наличием в них высокой доли сообщающейся полезной емкости, обуславливающей значительные дебеты извлекаемых запасов нефти.

Целью настоящей работы являлось изучение постседиментационных доломитовых ловушек нефтеносных карбонатных комплексов каменноугольного возраста Мелекесской впадины и Южно-Татарского свода.

На первом этапе было определено пространственное распределения выявленных типов коллекторов, установлены факторы формирования различных типов постседиментационных доломитов. В работе помимо традиционных методов литологического анализа использованы электронная микроскопия и катодолюминесцентный анализ (CL).

Анализ геологического строения нефтяных месторождений, где вскрываются доломитовые породы-коллекторы, показал, что процесс доломитизации на рассматриваемой территории носит мозаично-фрагментарный характер. Большая часть эпигенетических доломитов локализована среди разнофациальных известняков каменноугольного возраста. Причем в направлении от Мелекесской впадины к Южно-Татарскому своду отмечается тенденция как увеличения интенсивности процесса доломитизации, так и повышения охвата структурных этажей нефтеносных разрезов.

На рассматриваемой территории выявлены три морфологических типа неантклинальных доломитовых ловушек в каменноугольных отложениях Мелекесской впадины и Южно-Татарского свода: линзовидные; простые пластовые; сложные пластовые. Установлены области развития неантклинальных доломитовых ловушек: линзовидные приурочены к зонам водонефтяных контактов; пластовые приурочены к крыльям антиклинальных поднятий, сопряженным с тектоническими разломами и эрозионными врезами. Предложен механизм образования доломитовых коллекторов за счет окисления углеводородов и восходящей миграции углекислых глубинных флюидов к зонам разгрузки.

## ОСЛОЖНЕНИЯ И РЕМОНТЫ ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ СКВАЖИН С НИЗКИМ ПЛАСТОВЫМ ДАВЛЕНИЕМ

Загидуллин А.Ф., Раупов А.Р., Валимухаметов Р.Т.

*Альметьевский Государственный Нефтяной Институт, Альметьевск, Россия*

*aydar-zagidullin@bk.ru*

Несмотря на стремительное освоения Ромашкинского месторождения, ученые и специалисты-практики отчетливо понимали, что будущее нефтедобычи в Татарстане напрямую связано с умением извлекать из низкопроницаемых коллекторов содержимое мелких месторождений. Это привело к созданию управления «Ямашнефть». Ямашинское месторождение относится к сложным, насчитывая по разрезу семь продуктивных горизонтов.

На данный момент месторождение находится на последней стадии разработки. Фонд скважин имеет высокую обводненность, а также осложнен водонефтяными эмульсиями поэтому возникают технические проблемы, связанные с негерметичностью и износом оборудования ремонты.

Отсортировав 6500 ремонтов по Ямашинскому месторождению периодом времени 10 лет, мы выявили что только тульский, верейские горизонты и турнейские и башкирские ярусы имеют скважины с низким забойным давлением.

Проведя анализ по ремонтам, видно, что наиболее типичные технические проблемы: негерметичность НКТ, негерметичность системы клапанов ШСН, износ клапанных узлов ШСН, заклинивание плунжера ШСН, обрыв штанги по телу; осложнения: засорение клапанов, наличие водонефтяной эмульсии, отворот штанг.

Из выше сказанного можно сделать вывод, что при дальнейшем получении низкого забойного давления на Ямашинском месторождении есть вероятность получения уже известных ремонтов и осложнений, а предыдущий опыт послужит прецедентом.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ "UPSCALING" ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ФИЛЬТРАЦИОННО-ЕМКОСТНЫХ СВОЙСТВ И ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА ЦИФРОВЫХ ОБРАЗОВ ПЕСЧАНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ

Закиров Т.Р., Галеев А.А., Стаценко Е.О., Хайдарова Л.И.

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

*timurz0@mail.ru*

Структура порового пространства терригенных отложений являются важными характеристиками условий их формирования. В последние годы для анализа внутренней структуры горных пород все более широко используется метод рентгеновской компьютерной микротомографии. Преимуществом данного неразрушающего метода является возможность одновременного анализа геометрических размеров зерен и пор породы с одинаковой точностью.

В данной работе рассматриваются методические вопросы оценки размеров минимального фрагмента горной породы, обладающего физическими свойствами (распределение пор и зерен по размерам, абсолютная проницаемость) идентичными макроскопическим свойствам породы в целом. Объем такого минимального фрагмента называют «представительный элемент объема» (ПЭО).

В качестве образцов для исследования были выбраны песчаники Ашальчинского месторождения. Микротомографические измерения с разрешениями 10 мкм проведены на приборе *GE Phoenix v/tome/x s*. Процедуры сегментации поры/скелет и разделения зерен выполнялись в программе *Avizo Fire Edition (Visualization Sciences Group)*. Оценка коэффициента абсолютной проницаемости производилась с использованием авторской программы и *Avizo X-Lab Hydro*.

ПЭО для гранулометрического состава песчаников составляет 400 вокселей. Данное значение почти в 2 раза превышает значения REV для компонент тензора абсолютной проницаемости в главных осях и в 4 раза для коэффициента пористости. Показано, что формула Козени, характеризующая зависимость коэффициента проницаемости от эффективного диаметра зерен и пористости, дает заниженные значения, по сравнению с коэффициентами проницаемости, полученными при моделировании фильтрационных процессов в цифровых образах.

При помощи решеточных уравнений Больцмана была проведена оценка ПЭО кривой капиллярного давления при двухфазных потоках в масштабе пор (нефть и вода). Рассматривался процесс дренирования гидрофобного пласта. Показано, что ПЭО для кривой капиллярного давления составляет 300 вокселей.

*Работа выполнена при частично при поддержке гранта рнф (rscf) 15-11-10015 и гранта РФФИ мол\_а 16-35-00155*

**ПЕРЕСЧЕТ ЗАПАСОВ И РЕЗУЛЬТАТЫ АПРОБАЦИИ КЛАССИФИКАЦИИ  
2013 Г. НА ЗАЛЕЖАХ НЕФТИ БОБРИКОВСКОГО ГОРИЗОНТА  
ЧЕРНООЗЕРСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ**

Зирзизова Г.Ф.

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

*gelenaa3331@yandex.ru*

**Объектом** исследования является продуктивный бобриковский (радаевско-бобриковский) горизонт.

**Цель работы:** пересчет и сопоставление запасов нефти, подсчитанных по состоянию на 01.01.2012 г. и на 01.01.2014 г. по Временной классификации 2001 г., а также сопоставление запасов нефти, пересчитанных на 01.01.2014 г. по Временной 2001 г. и Новой (2013 г.) классификациям, то есть апробация последней. Согласно Инструкции выполнен также сравнительный анализ запасов, утвержденных в ГКЗ Роснедр и вновь подсчитанным.

При пересчете запасов показаны причины изменения подсчетных параметров, в том числе за счет проведения геолого-разведочных работ, включая детализационную сейсморазведку, бурение поисково-разведочных и эксплуатационных скважин, выявления новых залежей на подготовленных к бурению структурах.

При сравнении запасов нефти, полученных при пересчете в соответствии с Временной (2001 г.) и Новой (2013 г.) классификациям, показаны причины их различия: в основном изменение запасов происходит из-за разного подхода при разграничении категорий на подсчетных планах.

В дополнение к этому составлена программа доразведки бобриковского объекта Черноозерского месторождения.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЬНОГО ОБРАЗЦА НЕФТИ МЕТОДОМ ЯМР

Иванов Д.С.

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

*f.ma.dima@mail.ru*

В последнее время в нефтехимической промышленности всё больше внимания уделяется вопросу об интерпретации данных о реологических свойствах нефти, полученных косвенными методами. Одним из эффективно применяющихся методов в данной области является ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Данная методика активно используется для исследования месторождений нефти по всему миру. По данным на 2009 год до 40% месторождений нефти исследуется методами ядерного магнитного каротажа (ЯМК). Однако на сегодняшний день нет чёткого понимания механизма построения корреляционных зависимостей между измеряемыми ЯМР-параметрами и реологическими свойствами нефти [1,2].

На наш взгляд, существенный импульс развития в данной области можно было бы получить в случае реализации модельных рядов образцов нефти с задаваемым и, следовательно, контролируемым составом. Такой подход с одной стороны позволит установить влияние компонентного состава нефти на реологические и магнитно-резонансные характеристики нефти. С другой – является первым шагом к построению однозначной корреляции между реологическими свойствами нефти и характеристиками ЯМР.

Целью данной работы является поиск методики для создания модельного образца нефти и дальнейшее исследование ЯМ-характеристик исходной нефти и полученного модельного образца, который по своему количественному и качественному составу не отличается от исходного углеводорода.

В результате исследования показано, что значения ЯМ-характеристик совпадают. Полученный результат имеет принципиальное значение, так как доказывает возможность создания модельных образцов нефти с задаваемым и варьируемым в соответствии с задачей исследования составом.

1. Сковородников И.Г. Геофизические исследования скважин. изд. 3-е, перераб. и доп. Екатеринбург: Институт испытаний, 2009. 471 с. .
2. R. Freedman, N. Neiton Fluid Characterization using NMR Logging. *Petrophysics*, 2004, **5**, 241-250.

## РАЗРАБОТКА ПРОФИЛАКТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ НЕФТЯНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Киреева Е.В., Зырянова О.В., Певченко И.Г.

Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург, Россия

*elizaveta.kireeva.94@mail.ru, pevchenko-irina@mail.ru*

На сегодняшний день при перевозке пород с повышенной влажностью в холодные периоды происходит примерзание горной массы к металлической поверхности. Половина горной массы остается невыгруженной, что вызывает необходимость дополнительной ручной очистки [1,2]. Помимо этого, актуальна борьба с пылеобразованием на временных карьерных автодорогах и отвалах открытых горных разработок.

Заслуживает внимания метод обработки веществами нефтяного и нефтехимического происхождения, применение которых в эмульсионном виде повышает пожаробезопасность при их хранении и применении, а также снижает расход нефтепродуктов [2]. При нанесении средства на поверхности обрабатываемого материала образуется тонкая пленка, предотвращающая смерзание и пылеобразование сыпучих веществ. Профилактическое средство должно обладать высокой смачивающей и адгезионной способностью по отношению к обрабатываемому материалу, иметь низкую температуру застывания, доступную в настоящий момент сырьевую базу [3].

Данное исследование позволяет описать составы новых профилактических средств, представляющих собой легкоподвижную маслянистую жидкость на основе растворителя и загущающей добавки нефтехимического происхождения, доступных на одном из современных отечественных нефтеперерабатывающих заводов.

В ходе работы изучались изменения физико-химических свойств смесей в зависимости от концентраций компонентов (определенны плотность, вязкость, температура застывания и температура вспышки, содержание воды, серы и механических примесей). Так, были найдены наилучшие соотношения компонентов смесей, удовлетворяющих требованиям ТУ 0258-002-38507925 и ТУ 38.1011142-88. Результаты позволяют сделать предположение о возможности успешной замены таких средств, как Северин и Ниогрин, разработанных на базе университета, профилактическими средствами нового состава, отличающихся лучшими эксплуатационными свойствами. Не мало важно и то, что для создания предлагаемых профилактических средств используются более дешевые компоненты- остаток вакуумной переработки нефти (гудрон) и газойлевые фракции.

1. Н.К. Кондрашева, К.Е. Станкевич, С.В. Попова Исследование и разработка профилактической смазки Ниогрин. СПб, 2006. С.49.
2. З.И. Сюняев П.Л. Ольков, О.И. Рогачева и др. Ниогрин - продукт против смерзания. Уфа: Башкирское кн. изд-во, 1977. 31 с.
3. Галеев Р.Г., Хавкин В.А., Данилов А.М. О задачах российской нефтепереработки. *Mир нефтепродуктов*, 2009, 2, 3-7.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИЕМИСТОСТИ СРЕДНЕДИСТИЛЛЯТНЫХ ФРАКЦИЙ ГИДРОКАТАЛИТИЧЕСКИХ И ТЕРМОДЕСТРУКТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ К ДЕПРЕССОРНО-ДИСПЕРГИРУЮЩИМ ПРИСАДКАМ

Коноплин Р.Р., Рудко В.А., Кондрашева Н.К.

*Санкт-Петербургский горный университет, г. Санкт-Петербург, Россия*

*rostislav.konoplin1@gmail.com*

Одновременно с углублением переработки нефти ужесточаются требования к дистиллятным и остаточным видам топлив, которые применяются в судовых дизелях. Актуальным является вопрос замены старых видов топлив перспективными, с улучшенными характеристиками по составу и свойствам. Топливо маловязкое судовое разрабатывалось как замена дизельного, при этом оно соответствует международному стандарту ISO 8217 [1]. Оно имеет дистиллятное происхождение и применяется для судов морского, речного и рыбопромыслового флота. Из-за этого к нему предъявляются более жесткие требования по качеству, чем к высоковязкому топливу. Для улучшения низкотемпературных свойств, в частности температуры застывания, используют депрессорные и депрессорно-диспергирующие присадки различного состава и концентрации [2].

В данной работе было изучено влияние депрессорной присадки DodiFlow 5934 на легкий газойль замедленного коксования, гидроочищенную дизельную фракцию и дизельное топливо гидрокрекинга летней марки. Все исследования проводили в соответствии с ГОСТ 20287-91 метод Б. Присадка вводилась в виде 10 %-го раствора в прямогонной дизельной фракции, используемой в качестве разбавителя. При увеличении концентрации депрессора с 0,01 до 0,75 % масс., температура застывания для легкого газойля замедленного коксования понизилась минус 23 до минус 40 °C, гидроочищенной дизельной фракции снизилась с минус 17 до минус 37 °C, дизельного топлива гидрокрекинга летней марки – с минус 11 до минус 36 °C.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что данная присадка может быть рекомендована в качестве депрессора к судовому маловязкому топливу.

1. Митусова, Т.Н. Разработка и внедрение дизельных, печных, судовых и котельных топлив с депрессорными присадками. М.: ВНИИ НП, 1992. 343 с.
2. Тертерян, Р.А. Депрессорные присадки к нефтям, топливам и маслам. М.: Химия, 2010. 140 с.

## ИЗМЕНЕНИЕ МАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПОРОД ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ

Кузина Д.М., Нургалиев Д.К., Морозов В.П., Ескин А.А., Утемов Э.В.

*Казанский федеральный университет, Институт геологии и нефтегазовых технологий, Казань, Россия*

*di.kuzina@gmail.com*

Внутрипластовое горение (ВПГ) применяется с 1950-х гг. в основном на месторождениях тяжелой нефти [1]. В основе метода лежит горение части нефти, содержащейся в пористой среде, для увеличения подвижности несгоревшей фракции. Одной из нерешенных проблем является контроль продвижения фронта горения с поверхности Земли [2].

Цель данной работы — изучение изменения магнитных параметров пород в процессе горения битумов и оценка возможности использования наземных магнитных съемок для мониторинга фронта горения. Ранее влияние ВПГ на магнитные параметры пород коллектора не исследовалось, хотя превращениям железосодержащих минералов при нагревании посвящено большое количество работ [3-5].

Объектом исследования являлся керн, отобранный на Ашальчинском месторождении (Республика Татарстан), на котором ведется разработка залежей битумов в пермских отложениях на глубине ~100 м. Для изучения были отобраны образцы керна из трех скважин, интервал глубин 78-103 м. Образцы представлены породами покрышки (образцы из скважины 2 – глинистые аргиллиты серого цвета) и резервуара (образцы из скважин 1 и 3 – песчаники, содержащие битум).

Для изучения термохимических превращений железосодержащих минералов использовали метод дифференциального термомагнитного анализа (ДТМА) [4]. Исследования заключались в измерении скорости изменения индуктивной намагниченности пробы в магнитном поле 500 мТл при нагревании от 20 до 800°C со скоростью 25 град./мин. Второе нагревание проводили после охлаждения образца на воздухе. Кривые первого нагревания имеют общие особенности – на некоторых наблюдаются перегибы в области 310-350°C, начиная с температуры ~400°C для всех образцов отмечается начало увеличения намагниченности, которое завершается при температуре около 600°C (точка Кюри магнетита равна 575°C [3]). Различным является характер увеличения намагниченности в области температур от 400 до 600°C – местоположение, амплитуда и конфигурация пика.

1. Кудинов В.И. Совершенствование тепловых методов разработки месторождений высоковязких нефтий. М.: Нефть и газ, 1996. 284 с.
2. Akkutlu I.Y., Yortsos Y.C. *Combustion and Flame*, 2003, **134**, 229-247.
3. Dunlop D., Ozdemir O. *Rock Magnetism: Fundamentals and Frontiers*. United Kingdom, Cambridge University Press, 1997. 573 p.
4. Буров Б.В., Нургалиев Д.К., Ясонов П.Г. Палеомагнитный анализ. Казань, Изд-во КГУ, 1986. 167 с.
5. Хасанов Д.И., Гильманова Д.М., Насыртдинов Б.М. и др. *Нефтяное хозяйство*, 2013, **6**, 36-38.

## ТРАНСФОРМАЦИЯ СОЛЕЙ ПАЛЛАДИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ В ПРОЦЕССЕ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЙ АКТИВАЦИИ

Ласкин А.И., Ильясов И.Р., Ламберов А.А.

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

*artemka166@mail.ru*

Одним из самых распространенных способов получения металлических катализаторов, в том числе палладиевых, является нанесение исходных соединений на носители с последующим их восстановлением [1]. Поэтому изучение процессов, происходящих на поверхности носителя, в частности реакций восстановления водородом прекурсоров палладия, находящихся, как правило, в степени окисления +2, с целью формирования их активных форм, имеет чрезвычайно важное значение для приготовления высокоэффективных катализаторов [2].

Влияние на дисперсность нанесенного палладия и активность его в реакции селективного гидрирования метилацетилена и пропадиена оценивали с помощью методов хемосорбционного титрования монооксидом углерода с последующей его десорбцией, температурно-программируемого восстановления водородом и температурно-программируемого окисления кислородом, совмещенные с масс-спектроскопией.

Согласно полученным данным восстановление в водороде нанесенных органических солей палладия – ацетата и ацетилацетоната, приводит к активным формам металлического палладия с оптимальной температурой восстановления 400 °С. Использование же в качестве активационной среды кислорода приводит, в случае ацетилацетоната, к высокоактивным частицам палладия, вероятно обусловленные образованием, при окислительном термолизе комплексов, связей Me-O-Al, характерные для химически связанных с носителем малолигантных кластеров, в которых металл находится в координационно-ненасыщенном состоянии.

1. M. Lashdaf. Applied Catalysis A: General, 2003, **241**, 51-63.
2. W. Daniell. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 2002, **178**, 211-218.

## ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ КОМПОНЕНТОВ ЖЕЛЕЗООКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ГАЗИФИКАЦИЮ КОКСОВЫХ ОТЛОЖЕНИЙ В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ИЗОАМИЛЕНОВ В ИЗОПРЕН

Набиуллин И.Р.<sup>a</sup>, Латыпова Л.Р.<sup>b</sup>, Ламберов А.А.<sup>b</sup>, Гильмуллин Р.Р.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ПАО «Нижнекамскнефтехим», Нижнекамск, Россия

<sup>b</sup> ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия

*larisalatypova@gmail.com*

Железооксидные катализаторы нашли широкое применение в реакциях дегидрирования алкилароматических и олефиновых углеводородов. Одной из проблем этих катализаторов, как и других используемых в реакции дегидрирования, является образование в процессе эксплуатации углеродистых отложений (*кокса*) на их поверхности [1]. В литературе достаточно широко освещена роль каждого компонента, входящего в состав указанных каталитических систем на активность и селективность в реакциях дегидрирования [2-4]. Улучшение эксплуатационных свойств данных каталитических систем, в том числе и за счет снижения их коксуюемости, остается актуальной задачей.

Для оценки роли основных компонентов, входящих в состав железооксидных катализаторов, проведены лабораторные исследования в изотермических условиях в присутствии водяного пара. На модельных системах: гематит ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), железо-калий (Fe-K), железо-церий (Fe-Ce), железо-калий-церий (Fe-K-Ce) оценены каталитические характеристики в сравнении со степенью образования  $\text{CO}_2$  – продукта газификации кокса. Показано что на гематите, являющейся основой железооксидного катализатора, активность A (выход изопрена на пропущенные метилбутены) составляет 23 % мас., селективность S (выход изопрена на разложенные метилбутены) - 78 % масс. Содержание двуокиси углерода в продукте реакции не превышает 1,6 % масс.

Полученные результаты полезны для работ по модернизации железооксидных каталитических систем и будут использованы для усовершенствования промышленного катализатора дегидрирования.

1. Самахов А.А., Зайдман А.М. и др. Об изменениях активности катализаторов в процессе эксплуатации. – Новосибирск: Наука, 1976. 108 с.
2. Максименко А.М., Минакова В.Б. и др. Катализаторы дегидрирования низших парафиновых и олефиновых углеводородов. ЦНИИТЭ Нефтехим. М.: 1969.

## ОБОРУДОВАНИЯ ПРИМЕНЯЕМЫЕ В ИЗГОТОВЛЕНИИ РЕМОНТНЫХ КОНСТРУКЦИЙ МУФТ ГАЗОПРОВОДОВ

Мамина Р.Ф.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань,  
Россия*

*Mamina\_Rimma26@inbox.ru*

В мировой практике эксплуатации трубопроводных систем, транспортирующих углеводородное сырье, актуальной проблемой является восстановление герметичности и прочности дефектных участков труб с целью поддержания проектной производительности трубопроводов в течение длительного времени. Основным методом ремонта в мировой практике является использование муфтовых технологий. Данная технология остается безальтернативным методом ремонта при утечках продукта в подземных газо- и нефтепроводах, а также незаменима в качестве временной меры для ремонта критических или сквозных дефектов при невозможности в данное время остановить перекачку продукта. [1]

Основным оборудованием для изготовления муфт является экструдер [2]. Экструдер (от лат. extrudo - выталкиваю), машина для размягчения (пластикации) материалов и придания им формы путём продавливания через профилирующий инструмент (экструзионную головку), сечение которого соответствует конфигурации изделия [3].

Экструзионной обработке могут подвергаться почти все основные виды полимеров: термопласти, эластомеры, реактопласти [2]. Основными видами экструзионных машин являются: одношнековые, двухшнековые, поршневые и дисковые. Для экструзии пластмасс применяют шнековые, или червячные экструдеры, обладающие рядом преимуществ.

Двухшнековые экструдеры демонстрируют лучшее качество транспортировки, что позволяет им работать даже с плохо сыпучим сырьем [3].

Таким образом, основным оборудованием для изготовления ремонтных конструкций являются двухшнековые экструдеры.

1. Романцов С.В. Разработка конструкций стеклопластиковых муфт и методов расчета их работоспособности при ремонте газопроводов. <http://earthpapers.net/preview/178262/d?#?page=4> (Дата обращения: 07.02.2016).
2. Экструзия. Экструдеры. Экструзионные линии [http://www.encegmbh.ru/rus/extruding\\_machines.php#extrusion\\_method](http://www.encegmbh.ru/rus/extruding_machines.php#extrusion_method) (Дата обращения: 07.02.2016).
3. Экструзия и экструдеры <http://www.elcer.com.ua/polymers/equipment/extruder/>. (Дата обращения: 07.02.2016).

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕТАЛЛОВ ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ И МОДИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ В ГИДРОТЕРМАЛЬНО-КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

Михайлова А.Н.<sup>b</sup>, Феоктистов Д.А.<sup>a,b</sup>, Каюкова Г.П.<sup>a,b</sup>, Петрухина Н.Н.<sup>c</sup>

<sup>a</sup> ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

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

<sup>c</sup> Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчева РАН, Москва, Россия

*stasu07@mail.ru*

В последние годы в мире широко ведутся исследования, связанные с созданием новых высокоэффективных технологий извлечения и переработки тяжелого нефтяного сырья. Добыча указанного сырья осложняется большим числом проблем, связанных с высоким содержанием в нем высокомолекулярных углеводородных и гетеросодержащих соединений, отсутствием легких фракций, что обеспечивает его малую подвижность в пластовых условиях, также как и в процессах транспортировки и переработки [1]. Особенности тяжелых нефтей и природных битумов предполагают разработку новых технологий облагораживания их состава в пластовых условиях, главная цель которых - перевод высокомолекулярных компонентов в легкокипящие углеводороды в результате тепловой обработки пласта с участием различных катализаторов конверсии.

В работе представлены исследования влияния природы металлов на гидротермальные превращения высокомолекулярных компонентов тяжелой нефти.

Объектом исследования служила тяжелая высоковязкая нефть из пермских отложений Ашальчинского месторождения Республики Татарстан, а также продукты ее преобразования в гидротермально-катализитических процессах. Опыты проведены в нейтральной и углекислотной средах, в автоклаве при температуре 300°C в течение 5 ч при начальном давлении в реакционной системе 1,5 МПа. В процессе опытов давление поднималось до 9 МПа. В качестве катализатора использовали карбоксилаты (резинаты) металлов переменной валентности: никеля и кобальта, железа и меди.

Результаты проведенных экспериментов показали, что в гидротермальных условиях при температуре 300°C применение в качестве катализаторов нефтерастворимых карбоксилатов, содержащих металлы переменной валентности, приводит к превращению тяжелой высоковязкой нефти в менее вязкую, обогащенную бензиновыми и керосиновыми фракциями, а именно, позволяет снизить ее вязкость как в нейтральной, так и углекислотной средах при температуре 10°C почти в два раза. При этом в групповом составе нефти увеличивается содержание насыщенных углеводородов и снижается содержание смол. Полученные результаты могут быть использованы при подборе катализаторов и условий внутрипластовой конверсии тяжелой нефти.

1. Р.Х. Муслимов, Г.В. Романов, Г.П. Каюкова и др. Комплексное освоение тяжелых нефтей и природных битумов пермской системы Республики Татарстан. Казань: Изд-во «ФЭН» Академии Наук РТ, 2012. 396 с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРУНТОВЫХ СРЕД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ЧАСТИЦ

Михеев В.В.

КФУ, Казань, Россия

*miheevvova@mail.ru*

В настоящее время механика деформируемого твёрдого тела сталкивается с определёнными трудностями в описании сред, которые являются иерархически организованными и могут быть представлены ансамблем последовательно сменяющих друг друга систем различных структур и разнообразными деформационными механизмами. Примерами таких сред являются различные грунтовые и сыпучие среды.

Конечно, сеточные методы прекрасно зарекомендовали себя при решении задач деформирования сложных гетерогенных сред различной природы. Но, тем не менее, существует широкий класс задач, в которых нагружение среды сопровождается различными разрушениями как поверхностной, так и внутренней его части, проскальзыванием фрагментов, интенсивным массопереносом, включая также перемешивание масс. Перспективным классом численных методов механики деформируемого тела, приспособленным для моделирования описанных выше факторов, является метод частиц.

Для учёта многочастичного взаимодействия выражение для силы, действующей на дискретный элемент  $i$  со стороны окружения, записывается в следующей форме [1]:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{R}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} \mathbf{F}_{pair}^{ij} + \mathbf{F}_n^i$$

В данном случае учитывается как суперпозиция парных элементов (влияние элемента  $i$  на элемент  $j$  и наоборот), так и вклад объёмнозависящей составляющей  $\mathbf{F}_n^i$ , связанной с совместным влиянием окружения. Одним из наиболее простых способов для расчёта положения частиц является алгоритм Верле [2]. Описание среды проводится с использованием языка программирования на высокопроизводительном компьютерном кластере, тем самым появляется возможность рассчитывать тела больших размеров и самой различной структуры [3,4]. На данный момент удалось смоделировать поведение среды, появилась возможность пронаблюдать процессы под действием нагрузок, получать координаты частиц в разные моменты времени, что позволяет на основе эксперимента получать данные о напряжённо-деформируемом состоянии среды.

1. Krivtsov A.M., Krivtsova N.V. Particle method and its use in Solid Mechanics. *Far Eastern Mathematical Journal*, 2002, **3**(2), 254-276.
2. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecule. *Phys. Rev.*, 1967, **159**(98), 103.
3. Denis Demidov, "VexCL: a C++ vector expression template library for OpenCL/CUDA", <https://github.com/ddemidov/vexcl>
4. Demidov D., Ahnert K., Rupp K., Gottschling P. Programming CUDA and OpenCL: a case study using modern C++ libraries. *SIAM Journal on Scientific Computing* 35, 2013, **5**, 453-472.
5. Структурные уровни пластической деформации и разрушения / Под ред. В.Е. Панина. Новосибирск: Наука, 1990. 255 с.

## ИННОВАЦИОННОЕ РАЗВИТИЕ НЕФТЕХИМИИ РОССИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЗАРУБЕЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Музафарова А.Р., Шайхутдинова Ф.Н.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

*AigylMuza@yandex.ru*

В современных экономических условиях внедрение инновационных решений является определяющим фактором в производстве и реализации конкурентоспособной продукции на мировом рынке. На сегодняшний день в мире можно отметить высокую активность во внедрении инноваций в нефтехимическом производстве, в частности, в производстве этилена

В соответствии с Планом развития газо- и нефтехимии России на период до 2030 года развитие мощностей производства нефтегазохимической продукции в Российской Федерации предполагается осуществлять в рамках шести нефтегазохимических кластеров, что позволит сократить затраты на логистику сырья, сбыт готовой продукции, сэкономить капитальные и операционные затраты, а также сбалансировать размещение производственных мощностей.

За счет этого рост производственных мощностей пиролиза в 4 раза, что позволит увеличить производство крупнотоннажных полимеров в 4,2 раза и синтетических каучуков в 1,6 раза.

Экономическим базисом для перехода России от сырьевой модели развития экономики к инновационной является повышение глубины переработки сырья и увеличение количества технологических переделов.

Необходимо отметить, что каждый последующий технологический передел в нефте- и газохимической отрасли кратно увеличивает выручку, получаемую от переработки 1 тонны исходного сырья, что позволяет увеличить выручку от реализации, приведенную к 1 тонне сырья для газонефтехимии, в 10 раз.

Доля легкого углеводородного сырья, потребляемого газо- и нефтехимической отраслью увеличится в 2 раза. Суммарная мощность установок пиролиза в России увеличится в 4,5 раза. Производство полимеров в России составит 19 млн. тонн, из которого внутреннее потребление составит 14,2 млн. тонн, а чистый экспорт 4,8 млн.тонн. Производство синтетических каучуков в России увеличится до 2 млн.тонн, что позволит в равных количествах потреблять и экспорттировать данный продукт [1].

Крупнейшими производителями нефтехимии в мире являются США, Китай, Саудовская Аравия, Южная Корея, Япония, которые за счет оптимального сочетания таких конкурентных факторов, как наличие сырья и емкого внутреннего рынка успешно реализуют стратегии развития нефтехимии в своих регионах

Спрос на нефтехимическую продукцию неуклонно возрастает, как на внутреннем, так и на мировом рынке. Базовыми видами полуфабрикатов, служащих для производства целой гаммы нефтехимической продукции, является этилен и этилбензол, используемые для производства разнообразных пластиков в частности полиэтилена, полипропилена, а также моноэтиленгликолов

В Северной Америке, в Ближнем Востоке, а также РФ развивается производство полиэтилена, полипропилена и МЭГ, а в Европе, в Азии, в Южной Америке, а также Африке эти продукты больше потребляются.

В России двенадцать крупнейших компаний, обеспечивают производство 3075 тыс. тонн в год по этилену и 1505 тыс. тонн в год по пропилену

Необходимо отметить, что для дальнейшего развития нефтехимии России существует ряд факторов и причин, а также проблемы их сдерживающие.

Развитие нефтехимии в России способствует привлечению потенциала международных компаний: ABB LUMMUS GLOBAL и Chicago Bridge & Iron Company, LyondellBasell, Linde AG, UOP, Maire Tecnimont, INEOS, BASF SE, Lurgi,Norsk Hydro ASA, Bayer AG, Asahi Kasei Engineering Corporation.

Кластерное взаимодействие, оптимальное сочетание сырьевой базы с точки зрения потребностей в углеводородном сырье всей нефтехимической отрасли России и внедрение передовых инновационных технологий позволяет усиливать и прочно удерживать позиции Российских нефтехимических предприятий на мировом рынке [2].

1. Музарова А.Р., Котова Н.В. Развитие нефтехимии в Ямало-Ненецком автономном округе. *Вестник КТУ*, 2016, 2, 34-37
2. Турекулова Д.М. статья «Актуальность развития нефтехимического кластера на мировом рынке». <http://fan-5.ru/na5/1402.php>

## ТЕРРИТОРИЯ ДЛЯ РАЗВИТИЯ НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА РФ НА ПРИМЕРЕ ЯМАЛО-НЕНЕЦКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА

Музарова А.Р., Котова Н.В.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

*AigylMuza@yandex.ru*

Этилен и пропилен являются важнейшими мономерами промышленного органического синтеза, поэтому производство низших олефинов осуществляется в крупных масштабах и непрерывно растет. Для их производства могут быть использованы различные источники углеводородного сырья. Их можно выделять из нефтезаводских газов. Прямое выделение этилена из нефтезаводских газов НПЗ обеспечивает объем производства этилена около 0,4% мас. на перерабатываемую нефть, поэтому в настоящее время большую часть низших олефинов получают на специальных установках путем пиролиза этана, пропана, бутанов, бензина, керосино-газойлевых фракций и сырой нефти. Уровень развития нефтехимии оценивается объемом производства этилена.

В г.Новый Уренгой, расположенном на севере Западной Сибири в Ямало-Ненецком автономном округе организацией ОАО "Газпром" было создано ООО "НОВОУРЕНГОЙСКИЙ ГАЗОХИМИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС", так как попутные нефтяные газы и легкие углеводородные газы (этан и частично пропан), образующиеся при подготовке газового конденсата к транспортировке и являющиеся уникальным сырьем для производства полиолефинов, а также развитая инфраструктура региона делают Новый Уренгой естественным и преимущественным местом для размещения газохимического комплекса.

По проекту планируется две очереди. Первая очередь комплекса состоит из установок по компримированию, осушке и удалению CO<sub>2</sub>, паровой пиролизной крекинг-установки, установок по очистке и разделению газов, а также завода по производству полиэтилена низкой плотности производительностью 420 тыс. т/год. Исходным сырьем для первой очереди комплекса является природный газ, расход которого составляет приблизительно 1412 тыс. т/год.

Вторая очередь комплекса будет располагаться на территории существующего завода. В ее составе спроектированы новые промышленные объекты по производству полиолефинов с общей дополнительной проектной мощностью на уровне до 1000 тыс. т/год. Вторая очередь комплекса НГХК будет осуществлять переработку сжиженного углеводородного газа и легких фракций газового конденсата, являющихся исходным сырьем для новой паровой крекинг-установки.

## ИМПОРТОЗАМЕЩАЮЩАЯ ПАКЕТНО-ВИХРЕВАЯ НАСАДКА КАК ИНСТРУМЕНТ РАЗВИТИЯ ГАЗО-НЕФТЕХИМИИ РФ

Музафарова А.Р., Емельянычева Е.А.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

*AigylMuza@yandex.ru*

В газовой и нефтехимической промышленности наибольшее применение нашли тарельчатые аппараты, однако в последнее время растет интерес к насадочным аппаратам, увеличивается количество внедрений колонн с насадками. Анализ мирового опыта показывает, что насадки являются перспективными контактными устройствами, так как во многих случаях технико-экономические показатели для насадочных контактных устройств выше, чем для тарелок

Отечественная пакетно-вихревая насадка ПВН устроена по принципу улья, чьи ячейки образованы отдельными лепестками сложной формы так, что обеспечивается турбулентный газовый поток уже при минимальных потоках газа. Создаваемый вихрь непрерывно генерирует огромное количество микрокапель жидкости и, тем самым, увеличивается площадь контакта фаз. Однако, в силу турбулентных завихрений и сложной формы ячейки, капли жидкости не покидают ячейки, а эффективно улавливаются на выходе из них. Парадоксально, но конструкция обладает как высокой диспергирующей, так и сепарирующей способностью относительно жидкой фазы.

Ячейки высотой от 55 до 120 мм объединяются в кольцевую цилиндрическую структуру. В создаваемом слое отсутствуют предопределенные каналы движения жидкости и газа, что усиливает процессы обмена. Кроме того, доля свободного сечения достигает рекордных 95-97 %, и поэтому ПВН обладает высокой пропускной способностью по жидким и газовым фазам, низким гидравлическим сопротивлением.

Конструкция ячеек также позволяет равномерно перераспределять жидкие и газообразные потоки по всему сечению аппарата, что обеспечивается высокое и стабильное значение коэффициента тепло - и массо-обмена.

Стендовыми испытаниями колонны с ПВН показана, что они могут эффективно работать при скоростях газовой фазы от 1 до 6м/сек, при рабочих плотностях орошения от 20 до 100 м<sup>3</sup>/м<sup>2</sup>час. Гидравлическое сопротивление единичного слоя ПВН насадки менее 100 Па, а доля свободного сечения в зависимости от материала насадки – 0.7÷0.99. К преимуществам вихревой насадки можно отнести: высокие оптимальные скорости газовой или паровой фазы (3-5.5 м/с); низкое гидравлическое сопротивление аппарата при больших расходах газа и жидкости; малая высота единицы переноса; высокий средний объемный коэффициент массоотдачи 12000-13000кг/м<sup>3</sup>ч [1].

Таким образом, применение современных насадочных устройств в массообменных аппаратах позволит достичь лучшей степени разделения, а также можно получить более чистые и соответственно дорогие продукты (высших марок), то более общим критерием эффективности может служить прибыль, получаемая от реализации данных продуктов. Отечественная пакетно-вихревая насадка ПВН не уступает зарубежным насадкам фирмы Sulzer, Ваку-пак<sup>TM</sup>, Goodloe<sup>TM</sup> и т.д, что свидетельствует о правильном направлении проводимых исследований в области создания конкурентоспособной импортозамещающей регулярной насадки для разделения.

1. Музафарова А.Р., Емельянычева Е.А. классификация, основные требования и конструктивные особенности современных насадочных контактных устройств. *Вестник КТУ*, 2016, 2, 63-67

## ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПЕРМСКИХ БИТУМОВ ТАТАРСТАНА ПО ДАННЫМ ЭПР И ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Муллакаев А.И., Хасанов Р.Р., Морозов В.П.

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

*Almazmullakaev@gmail.com*

Актуальность изучения месторождений природных битумов (ПБ) в Татарстане связана с перспективами их разработки в качестве высоко- и сверхвязких нефтей (СВН). В настоящее время ПАО «Татнефть» для разработки битумных полей применяется технология парогравитационного дренажа, позволяющая извлекать легкие фракции нефтяного вещества в результате прогрева продуктивных пород под действием нагнетаемого в пласт разогретого водяного пара [1]. Применение уникальных тепловых технологий добычи требует более внимательного изучения вещества битумов, характеризующегося чрезвычайно сложным химическим составом [2].

Для выяснения особенностей состава органического вещества (ОВ) битумов и закономерностей распределения его типов нами был использован такие методы как термогравиметрия и дифференциально сканирующая калориметрия (ТГА и ДСК), а также и ЭПР-спектроскопия. Образцы изучались по разрезу одной скважины и были отобраны с кровельной, средней и приподошвенной части продуктивного пласта. По данным ЭПР-спектроскопии установлены 2 типа органического вещества, отличающиеся органическими радикалами. Первый тип представляет собой органическое вещество угольного происхождения, которое сингенетично осадконакоплению. Второй тип относится к нефтяному ряду и имеет миграционное происхождение. По данным ТГА и ДСК наблюдается усложнение состава органического вещества в центральной части пласта, что выражается в увеличении количества пиков на спектрах. В приконтактовых участках продуктивного пласта состав ОВ напротив, упрощается.

1. Хисамов Р.С., Мусин М.М., Мусин К.М. и др. Обобщение результатов лабораторных и опытно-промышленных работ по извлечению сверхвязкой нефти из пласта. Казань: Изд-во «Фэн» Академии наук РТ, 2013. 232 с.
2. Каюкова Г.П., Романов Г.В., Муслимов Р.Х. и др. Химия и геохимия пермских битумов Татарстана. М.: Наука, 1999. 304с.

**МОДИФИКАЦИЯ ФУНКЦИИ БАКЛЕЯ-ЛЕВЕРЕТТА  
ДЛЯ НИЗКОДИССИПАТИВНОЙ АППРОКСИМАЦИИ УРАВНЕНИЯ  
ПЕРЕНОСА НАСЫЩЕННОСТИ**

Муртазин Т.А., Поташев К.А.

*Институт математики и механики КФУ, Казань, Россия*

*aleksandrovich313@yandex.ru*

Известно, что традиционные схемы аппроксимации гиперболического уравнения переноса насыщенности обладают высокой схемной вязкостью, имеющей критическое значение при использовании грубых расчетных сеток. Для достаточно точного описания продвижения фронтов насыщенности при численном решении даже одномерной задачи необходимо использовать расчетные сетки, содержащие сотни узлов. Это накладывает довольно высокие требования – например, в задачах подземной гидравлики при расстановке скважин с шагом в сотни метров необходимо использовать сетки с размером ячеек порядка одного метра. В этом случае на каждый  $\text{km}^2$  пласта сетка должна содержать порядка  $10^6$  ячеек.

В настоящей работе предложены довольно простые варианты аналитической модификации функции распределения фаз в суммарном потоке (функции Баклея-Леверетта, ФБЛ) двухфазной смеси через пористую среду. Идея предложенных модификаций вытекает из переноса результатов аналитического решения задачи Баклея-Леверетта на дискретизованную сеточную область пористой среды. В отличие от традиционных схем апскейлинга (ремасштабирования) фазовых проницаемостей данные модификации не требуют предварительного решения задач двухфазной фильтрации на детальной расчетной сетке. Для их реализации достаточно вычисления значений скачка насыщенности и так называемой средней насыщенности в зоне смеси через исходную функцию Баклея-Леверетта по известным аналитическим формулам.

Оценка эффективности методики продемонстрирована на примере численного решения задачи плоскопараллельного заводнения однородной пористой среды с использованием противопотоковой и TVD схем. Показано, что при использовании модификаций ФБЛ профили насыщенности и кривые обводнения, полученные из решения задачи на грубой расчетной сетке близки к соответствующим величинам, полученным из точного решения.

## INTENSIFICATION OF THE LOW-TEMPERATURE OXIDATION OF CRUDE OILS BY USING OF MnO<sub>2</sub>@SiO<sub>2</sub> CORE-SHELL NANOSTRUCTURED CATALYST

Mukhamatdinov I.I., Feoktistov D.A., Sitnov S.A., Vakhin A.V., Katnov V.E., Nurgaliev D.K.

*Kazan Federal University, Kazan, Russia*

*mc-gross@mail.ru*

Catalytic properties of rock-forming minerals in combination with technology of pumping the hot coolant in the reservoir allow to perform the chemical conversion of high molecular weight components of heavy oil directly in the reservoir. Improving the efficiency of extraction methods based on low-temperature oxidation is achieved through the use of pumped catalysts [1]. The particle size of ones should be much less than intergranular space of reservoir rock, which provides their distribution during filtration in the formation. In the work were synthesized nano-sizes catalysts based on manganese oxide with the structure of core-shell . On the surface of nanoparticles SiO<sub>2</sub> was taken restoration of Mn<sup>+7</sup> to Mn<sup>+4</sup> with the formation of the shell of manganese oxide.

The effectiveness of the obtained catalysts was studied in model experiments in the laboratory reactor on the sample of heavy oil. The catalyst used in the form of an aqueous dispersion.

In the reactor was maintained conditions same as in the reservoir under the implementation of the method of low-temperature oxidation, namely, a pressure of 50 bar, a temperature of 200 °C and 250 °C. The ratio of oil:water was 70:30, the content of catalyst is 0.1% by weight Mn of oil, the duration of the experiment was 6 hours.

Were synthesized nanoscale catalysts with the core-shell structure on the basis of manganese and silicon dioxide, particles of which have a high sedimentation and aggregate stability. Identified a number of aspects of the mechanism of action of nanosized catalysts, focusing on changes in the group composition of oil by low-temperature oxidation. It has been found increasing content of asphaltenes at reduction of their average molecular mass as a result of conversion of resins to asphaltenes.

1. Kayukova G.P., Gubaidullin A.T., Petrov S.M., Romanov G.V., Petrukhina N.N., Vakhin A.V. Changes of Asphaltenes' Structural Phase Characteristics in the Process of Conversion of Heavy Oil in the Hydrothermal Catalytic System. *Energy and Fuels*, 2016, **30**(2), 773-783

## ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ РАСТВОРОВ ПОЛИМЕРОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Мухаматдинов И.И., Вахин А.В., Алиев Ф.А., Ситнов С.А.

*Kazan Federal University, Kazan, Russia*

*mc-gross@mail.ru*

Одной из причин низкого коэффициента вытеснения и охвата пласта процессом заводнения на месторождениях, содержащих нефть повышенной вязкости, является большое соотношение вязкостей нефти и воды, приводящее к снижению охвата пласта вытесняющим агентом. Добавка в воду высокомолекулярного полимера позволяет повысить вязкость воды и соответственно улучшить соотношение подвижностей нефти и воды и за счёт этого повысить нефтеотдачу [1].

Для исследований были приготовлены 0,3 %-ные растворы полиакриламида (ПАА) различных марок, отличающиеся молекулярной массой (в качестве растворителя использовалась дистиллированная вода). Для определения краевого угла смачивания изготавливались таблетка диаметром 20 мм и толщиной 6 мм методом прессования. В качестве горных пород использовался кальцит и доломит. Реологические исследования были проведены на ротационном вискозиметре Rheotest RN 4.1 в режиме динамических испытаний при температурах от 20 до 40 °C.

По стандартной измерительной схеме «прямого» и «обратного» хода при значениях скорости сдвига до 100 с<sup>-1</sup> было выявлено, что композиции при температурах 20-40 °C начинают проявлять тиксотропные свойства. Одним из самых важных и принципиальных характеристик микроструктуры пористых сред нефтеносных пластов является смачиваемость их поверхности. От того, какой смачиваемостью характеризуется пористая среда, зависит специфика вытеснения нефти растворами полимеров, состояние и распределение остаточной нефтенасыщенности в пласте.

В результате исследований показано различие в параметрах кальцита и доломита, связанное с морфологией пор и различным взаимодействием молекул полимера с пористой средой.

1. Л. Лейк, Основы методов увеличения нефтеотдачи, Университет Техас, Остин, 1988, 449 с.

## ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ГИДРОТЕРМАЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СВОЙСТВА ПОЛУЧАЕМОГО ИЗ $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$ БЕМИТНОГО НОСИТЕЛЯ ДЛЯ КАТАЛИЗАТОРОВ НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Мухамедъярова А.Н., Егорова С.Р., Ламберов А.А.

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

*anm03@list.ru*

В различных катализитических процессах нефтехимического синтеза, осуществляемых в кипящем слое, важное место занимают микросферические катализаторы, оптимальным носителем для которых является  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Предшественником  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  – бемит, от характеристик которого напрямую зависят свойства носителя. Одним из способов получения бемита является последовательная переработка флокул гибсита заданного размера термической обработкой до смеси фаз бемита и  $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$ , и затем дальнейшей гидротермальной обработкой  $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$ , входящего в состав флокул, до бемита. Исследовано влияние условий гидротермальной обработки  $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$  на фазовый состав продуктов, полученных при  $T = 150\text{--}200^\circ\text{C}$ ,  $P = 1.0\text{--}1.9$  МПа и  $\text{pH} = 4.0\text{--}9.2$  с помощью методов термического анализа, сканирующей электронной микроскопии, рентгенофазового анализа, а также проведены измерения параметров пористой системы образцов. В водной суспензии продуктами гидротермальной обработки  $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$  являются фазы байерита и бемита, формирующиеся параллельными маршрутами в приповерхностном слое частиц по механизму растворения-осаждения. Кристаллы байерита формируют иглы длиной  $\sim 10$  нм. Благоприятными условиями для образования байерита являются  $T=150^\circ\text{C}$ ,  $\text{pH}=4.0$ , при которых его концентрация достигает 6–8 мас%. При  $180\text{--}200^\circ\text{C}$ ,  $\text{pH}=6.0\text{--}9.2$  байерит подвергается фазовому переходу в бемит. При  $\text{pH}=8.0\text{--}9.2$  формируются трехмерные частицы в форме параллелепипедов с размером ребра  $\geq 200$  нм, а при  $\text{pH}=4.0\text{--}6.0$  – двумерные частицы в форме пластин с размером ребра  $\sim 80\text{--}500$  нм и толщиной  $\sim 20\text{--}100$  нм. При концентрации бемита  $\leq 56$  мас% в кислой среде формируются мезопоры диаметром 3.7–7.5 нм, что приводит к уменьшению  $S_{\text{БЭТ}}$  до 155  $\text{m}^2/\text{г}$  и снижению  $V_{\text{БЭТ}}$  до 0.33  $\text{cm}^3/\text{г}$  за счет исчезновения тонких пор и затем роста до 0.42  $\text{cm}^3/\text{г}$  за счет повышения количества средних мезопор в интервале диаметров 3–5 нм. Полный фазовый переход  $\chi\text{-Al}_2\text{O}_3$  в бемит осуществляется при  $180\text{--}200^\circ\text{C}$  через 180 мин гидротермальной обработки.

## ГЛУБИННОЕ СТРОЕНИЕ ЗЕМНОЙ КОРЫ И ВЕРХНЕЙ МАНТИИ ПОД НЕФТЯНЫМИ МЕСТОРОЖДЕНИЯМИ-ГИГАНТАМИ

Огнев И.Н., Рахимов А. Л., Нургалиев Д. К.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия*

*ognev.igor94@gmail.com*

Цель данной работы заключается в том, чтобы исследовать существуют ли общие закономерности в строении земной коры и верхней мантии под крупнейшими нефтяными месторождениями планеты.

Для достижения поставленной цели необходимо собрать и представить в геоинформационных системах базу цифровых данных, которая включает в себя карту контуров крупнейших нефтяных месторождений, сейсмомагнитные модели Земли, карту магнитного поля Земли, карту гравитационного поля Земли и др.

Наиболее важным материалом с точки зрения определения глубинного строения Земли являются данные по сейсмической томографии. В качестве основных сейсмомагнитных моделей использовались GyPSuM [1] и LLNL-G3Dv3 [2], разрешение которых составляет 1 градус.

При помощи инструментария ArcGIS данные модели были представлены в виде наборов растровых изображений. Каждый растр представляет собой карту скоростей распространения продольных или поперечных упругих волн на определённой глубине.

На глубинах порядка 400-750 км согласно использованным моделям наблюдается разогретое мантийное вещество в районе распространения Западно-Сибирской нефтеносной провинции. Установление наличия или отсутствия связи подобной картины глубинного строения Земли с нефтеносностью данного региона и определение глубинного строения Земли в районах других нефтяных месторождений требует дальнейшего анализа.

1. Simmons N.A., Forte A.M., Boschi L., Grand S.P. GyPSuM: A joint tomographic model of mantle density and seismic wave speeds, *J. Geophys. Res.*, 2010, **115**, B12310.
2. Simmons N.A., Myers S.C., Johannesson G., Matzel E. LLNL-G3Dv3: Global P wave tomography model for improved regional and teleseismic travel time prediction, *J. Geophys. Res.*, 2015, **117**, B10302.

## ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ СИНТЕТИЧЕСКОЙ НЕФТИ, ОБРАЗУЮЩЕЙСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА КЕРОГЕН В СРЕДЕ СПИРТО-БЕНЗОЛА

Онищенко Я.В., Салих И.Ш.С., Вахин А.В., Нургалиев Д.К.

*ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия*

*yaroslav.onishchenko.1991@mail.ru*

Приоритетным направлением поиска альтернативных источников промышленной энергетики является исследование горючих сланцев, которых следует рассматривать как сырье для получения широкого спектра продуктов, вследствие высокого содержания в них смолисто-асфальтеновых соединений [1,2]. В данной работе преследовались следующие цели: возможность применения метода термокаталитического воздействия на кероген для извлечения синтетической нефти; синтез доступного и высокоэффективного катализатора деструктивного гидрирования; исследование состава, физико-химических свойств синтетической нефти и керогена до и после термокаталитического воздействия. В качестве объекта исследования выступает кероген баженовской формации.

Деминерализованный сланец экстрагировали хлороформом для удаления битумоида. Кероген выделяли последовательно обработкой измельченной породы растворами соляной и плавиковой кислот. Комплексносвязанный пирит не отделялся. Выделенный кероген относится к типу II согласно диаграмме Ван-Кревелена, основанной на соотношении (H/C) и (O/C).

Лабораторное моделирование термокаталитического воздействия на образец керогена проведено в автоклаве при давлении 50 атм, температуре 350°C, продолжительности 3 ч, в присутствии спирто-бензольной смеси в инертной среде. В качестве прекурсора катализатора использовали карбоксилат кобальта, дозировка 5 мас.% на кероген.

Показано, что в присутствии катализатора в 2 раза увеличивается выход синтетической нефти, образовавшейся в результате деструкции керогена: (с 8,5 до 16,1%). По результатам ЭПР-спектроскопии показано, что в образце, подвергнутого воздействию в присутствии катализатора, выше концентрация свободных радикалов. Наряду с преобразованием органического вещества наблюдается переход части пирита в оксидные соединения.

Таким образом, в работе показана возможность интенсифицировать процессы деструкции керогена при тепловых методах освоения керогенсодержащих месторождений. Использование катализаторов в коллоидном состоянии рассматривается как перспективный способ повышения нефтеизвлечения при освоении нетрадиционных углеводородов.

1. Bychkov A.Yu., Kalmykov G.A., Bugaev I.A., Kalmykov A.G., Kozlova E.V. Experimental Investigations of Hydrocarbon Fluid Recovery from Hydrothermally Treated Rocks of the Bazhenov Formation. *Moscow University Geology Bulletin*, 2015. **70(4)**, 299-304.

2. Бурдельная Н.С., Бушнев Д.А., Мокеев М.В. Изменения состава битумоида и химической структуры керогена при гидротермальном воздействии на породу. *Геохимия*, 2013, **9**, 819-833.

## ПЕТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКООМНЫХ КАРБОНАТНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ ЧЕРЕПЕТСКОГО ГОРИЗОНТА

Петрова Д.И., Королёв Э.А.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань, Россия*

*darja\_scorpion@mail.ru*

Карбонатные коллекторы черепетского горизонта турнейского яруса нижнекаменноугольной системы на территории Республики Татарстан относятся к сложным объектам нефтедобычи. Это обусловлено их высокой неоднородностью, относительно низкой пористостью и повышенной вязкостью нефти.

Литологические исследования пород черепеского горизонта показали, что в разрезах чередуются три типа карбонатных пород: биокластовые зоогенные известняки, биокластовые фито-зоогенные известняки и биокластовые фитогенные известняки. Первые характеризуются равномерной нефтенасыщенностью, являясь средненефтенасыщенными коллекторами, вторые – пятнисто-полосчатой нефтенасыщенностью, являясь низкоомкими коллекторами, трети – флюидоупоры, в которых нефтенасыщенность либо отсутствует, либо слабо выраженная, в виде редких пятнистых выпотов нефти. В рамках данной работы было проведено изучение петрофизических свойств выделенных литогенетических типов карбонатных пород.

Известняки биокластовые зоогенные слагают преимущественно верхнюю часть черепетского горизонта. Для них характерна относительно высокая пористость – 10,17-17,28%, объемная плотность – 2,24-2,34 г/см<sup>3</sup>, при плотности минерального скелета – 2,70-2,71 г/см<sup>3</sup>, прочность на одноосное сжатие – 3,8-5,85 МПа.

Известняки биокластовые фитозоогенные слагают преимущественно среднюю часть черепетского горизонта. Для них характерна более низкая пористость 9,55-13,05%, повышенная объемная плотность – 2,28-2,41 г/см<sup>3</sup>, при плотности минерального скелета – 2,69-2,71 г/см<sup>3</sup>, прочность на одноосное сжатие – 5,32-6,39 МПа.

Известняки биокластовые фитогенные слагают преимущественно среднюю и нижнюю часть черепетского горизонта. Для них характерна весьма низкая пористость 4,23-7,83%, высокая объемная плотность – 2,50-2,60 г/см<sup>3</sup>, при плотности минерального скелета – 2,69-2,71 г/см<sup>3</sup>, повышенная прочность на одноосное сжатие – 5,75-7,73 МПа.

## ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ АТРИБУТОВ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ СЕЙСМОФАЦИЙ НА ПРИМЕРЕ 2D СЕЙСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА ТЕРРИТОРИИ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Платов Б.В., Хамидуллина Г.С.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия*

*swborispl@mail.ru*

Сейсмические данные являются основой изучения нефтяных месторождений. По данным сейморазведки строятся структурные карты, используемые для подсчёта запасов.

Однако сейсмическая запись несет в себе значительное количество информации об изменении геологических свойств, в частности о распределении фаций.

Для сейсмофациальной интерпретации необходимо выполнить сейсмостратиграфическую привязку, которая требует наличия данных акустического и плотностного каротажа. Для использования данных старого фонда скважин (в которых акустический и плотностной каротажи не проводились) авторами предложена методика расчетов синтетических сейсмограмм с использованием данных стандартного нейтронного каротажа.

После привязки сейсмических отражений проводилась трассирование сейсмических горизонтов.

Геологические фации находят различное отражение в сейсмических разрезах [1]. Сейсмические атрибуты позволяют контрастнее выделить сейсмофации в разрезе. В приведенной работе использовались сейсмические атрибуты Local structural dip, Chaos, Variance [2]. Данные атрибуты позволяют выделить в разрезе биогенные постройки, области врезов, зоны спокойной седиментации.

1. T. Randen, E. Monsen, et al., Three-Dimensional Texture Attributes for Seismic Data Analysis, 2000b in Ext. Abstr, Ann. Internat. Mtg. Soc. of Expl. Geophys., Calgary, Canada.
2. T. Randen, L. Sønneland, A. Carrillat, T.S. Valen, T. Skov, S.I. Pedersen, B. Rafaelsen and G. Elvebakk, Preconditioning for Optimal 3D Stratigraphical and Structural Inversion, 2003, 65th EAGE Conference & Exhibition.

## ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ПРОЦЕСС РАЗЛОЖЕНИЯ ГИДРОПЕРОКСИДА КУМОЛА

Разуваева Ю.С., Усманова Ю.Х.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань,  
Россия*

*julianner@mail.ru, usmanova-yulduz@mail.ru*

Окислительные превращения алкилароматических углеводородов лежат в основе перспективных методов получения различных кислородсодержащих органических соединений. Среди известных катализаторов “мягкого” инициирования процессов окисления высокую активность проявляют 2-этилгексаноаты непереходных металлов [1-3].

Нами была проведена серия опытов для исследование эффективности катализитического действия 2-этилгексаноата кальция ( $\text{Ca}(\text{ЭГ})_2$ ) в реакциях разложения гидропероксида кумола (ГПК) [3]. В качестве растворителя использовался хлорбензол, который проявляет инертность в реакциях разложения гидропероксидов.

Чтобы подтвердить отсутствие влияния хлорбензола на термодинамику процесса был проведен квантово-химический расчет энергии активации катализитического комплекса в присутствии растворителя и без него.

Расчеты проводились в программном пакете Priroda, базисный набор 6-31G(d,p). Расхождение значений энергии Гиббса реакции распада ГПК в газовой среде и среде хлорбензола, соответственно, составило 1,25% отн.

1. Эмануэль Н.М., Денисов Е.Т., Майзус З.К. Цепные реакции окисления углеводородов в жидкой фазе. М.: Наука. 1965. 375 с..
2. Нуруллина Н.М., Батыршин Н.Н., Разуваева Ю.С., Усманова Ю.Х. *Вестник Казанского Технологического Университета*, 2014, **17(10)**, 51.
3. Нуруллина Н.М., Батыршин Н.Н., Харлампиidi X.Э. *Вестник КГТУ*, 2002, **1-2**, 79-85.

## МЕХАНИЗМ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ РАСПАДА ГИДРОПЕРОКСИДА КУМОЛА В ПРИСУТСТВИИ СОЕДИНЕНИЯ КАЛЬЦИЯ

Разуваева Ю.С., Усманова Ю.Х.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань,  
Россия*

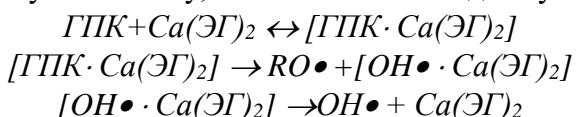
*julianner@mail.ru, usmanova-yulduz@mail.ru*

Окислительные превращения алкилароматических углеводородов лежат в основе перспективных методов получения различных кислородсодержащих органических соединений. Среди известных катализаторов “мягкого” инициирования процессов окисления высокую активность проявляют 2-этилгексаноаты непереходных металлов [1-3].

Нами была проведена серия опытов для исследование эффективности катализитического действия 2-этилгексаноата кальция ( $\text{Ca}(\text{ЭГ})_2$ ) в реакциях разложения гидропероксида кумола (ГПК). Проанализировав экспериментальные данные, мы предположили, что при взаимодействии катализатора и гидропероксида первоначально образуется промежуточный комплекс ГПК- $\text{Ca}(\text{ЭГ})_2$  состава 1:1 мольн [2].

С целью подтверждения нашего предположения был проведен квантово-химический расчет энергии активации катализитического комплекса и характер его распада.

Расчеты проводились в программном пакете Priroda, базисный набор 6-31G(d,p). Термодинамические характеристики распада ГПК, полученные в рамках квантовой химии, подтверждают это, причем активация является безбарьерной, а распад протекает ступенчато.  $\Delta E$  системы составила 193,3178 кДж. Значение энергии активации термического разложения ГПК в рамках того же расчета составило 226,9876 кДж/моль. Очевиден выигрыш в затрачиваемой энергии. Причем было установлено, что распад протекает по предполагаемому механизму, как наиболее выгодному:



1. Эмануэль Н.М., Денисов Е.Т., Майзус З.К. Цепные реакции окисления углеводородов в жидкой фазе. М.: Наука. 1965. 375 с..
2. Нуруллина Н.М. Дисс. к. х. н., Казан. гос. технол. ун-т, Казань. 2005, 130 с.
3. Нуруллина Н.М., Батыршин Н.Н., Разуваева Ю.С., Усманова Ю.Х. *Вестник Казанского Технологического Университета*, 2014, **17(10)**, 51.

## КАЧЕСТВЕННЫЙ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ СОСТАВ ОБРАЗЦОВ НЕФТИ, ДОБЫТОЙ НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ БАШКОРТОСТАНА И ТАТАРСТАНА, ПО ДАННЫМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Рахматуллин И.З., Ефимов С.В., Маргулис Б.Я., Ключков В.В.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*ilfat89rakhmatullin@gmail.com*

Природный объект – нефть – содержит сотни веществ, относящихся в основном к трем гомологическим рядам углеводородов – алканам, циклоалканам и аренам, а также гетероатомные соединения (в частности, смолисто-асфальтеновые вещества), содержащие неметаллы (серу, кислород, азот) и микроэлементы (ванадий, никель, железо, цинк и др.). В отличие от других физико-химических методов, ЯМР спектроскопия позволяет получать как качественную (тип молекул), так и количественную (доля молекул) информацию о смеси органических соединений [1]. С учетом значения нефти для народного хозяйства задача адаптации современной одномерной ЯМР ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) и двумерной ЯМР (COSY, HSQC, NOESY) спектроскопии к определению состава нефти является весьма важной и актуальной.

Проведено исследование образцов нефти из шести месторождений методами одномерной и двумерной ЯМР-спектроскопии и определены количественные доли ароматических молекул, олефинов, алканов и циклоалканов в исследуемых образцах. Показано, что количественно доли ароматических молекул, олефинов, алканов и циклоалканов в исследуемых нефтях при переходе от образца к образцу изменяются несущественно. Однако, наблюдались незначительные различия между спектрами образцов, взятых из разных уровней одной и той же нефтяной скважины. Это обстоятельство следует учитывать при разработке оборудования для автоматизированного анализа качества нефти и нефтепродуктов.

1. Г.А. Калабин, Л.В. Каницкая, Д.Ф. Кушнарёв. Количественная спектроскопия ЯМР природного органического сырья и продуктов его переработки. М.: Химия, 2000. 408 с.

## ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПАРОТЕПЛОВОЙ ОБРАБОТКИ НА НАТИВНЫЙ БИТУМОИД В СОСТАВЕ ТЕРРИГЕННОЙ ПОРОДЫ-КОЛЛЕКТОРА

Ситнов С.А., Феоктистов Д.А., Исаков Д.Р., Вахин А.В.

<sup>a</sup> ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

*sers11@mail.ru*

В последние годы в мире в условиях ухудшения структуры запасов углеводородного сырья энергетические компании и правительства стран все большее внимание уделяют нетрадиционным видам жидких углеводородов, таких как тяжелые нефти [1]. В связи с этим разработка новых технологий добычи таких нефтей является приоритетным направлением развития всей нефтяной отрасли [2].

Объектом исследования служил битумоид, экстрагированный из исходного нефтенасыщенного песчаника, а также битумоиды, извлеченные из породы после каталитического и некatalитического акватермолиза. Условия: начальное давление 3 бар, рабочая температура 150 и 200 °С, продолжительность процесса была зафиксирована на уровне 6 часов. Концентрация прекурсора катализатора, в качестве которого был выбран карбоксилат железа, составляла 5% на навеску образца породы.

На основе результатов исследования, полученных с применением физико-химических методов, установлено, что в отличие от некatalитического процесса каталитического акватермолиза даже при минимальной температуре способствует более полному протеканию реакции крекинга наиболее высокомолекулярных компонентов тяжелой нефти и, как следствие, снижению вязкости последней. Так, по результатам SARA-анализа установлено, что при использовании катализатора и температуры 200 °С эксперимента проявляется наибольший эффект в аспекте уменьшения доли высокомолекулярных асфальтенов (с 6,42 до 3,29%). По сравнению с исходной нефтью, увеличилось содержание смолистых соединений и для продуктов каталитического акватермолиза оно выше, что связано, по-видимому, с уменьшением молекулярной массы молекул асфальтенов при деструкции в результате реакции гидрогенолиза.

1. Бахтизина Н.В., *Научно-технический вестник ОАО «Роснефть»*, 2011, **3**, 30-35.
2. Данилова Е., *Химический журнал.*, 2008, **декабрь** 34-37.
3. Baibekova, L.R., Petrov, S.M., Sitnov, S.A., and etc., *International Journal of Applied Chemistry*, 2015, **11**, 587-592.

## КАТАЛИТИЧЕСКИЙ АКВАТЕРМОЛИЗ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛОГАНИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА

Ситнов С.А., Онищенко Я.В., Петровнина М.С.. Феоктистов Д.А.

*ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия*

*sers11@mail.ru*

Постепенное ухудшение структуры мировых запасов углеводородов делает актуальным разработку месторождений трудноизвлекаемых (тяжёлых) нефтей, запасы которых сопоставимы с запасами традиционных [1]. Для повышения эффективности рассматривается возможность использования наноразмерных или молекулярных катализаторов, нагнетаемых в пласт. Изыскание новых эффективных катализаторов, получаемых с использованием доступного сырья, является актуальной задачей для повышение энергоэффективности тепловых методов добычи тяжелых нефтей.

Лабораторное моделирование процесса акватермолиза проводили с использованием реактора высокого давления с перемешиванием (объем 300 мл). Модельная система представляла собой смесь нефти и воды при массовом соотношении 70:30, которая подвергалась температурному воздействию при температуре 150 и 180 °C в условиях некаталитического и каталитического процесса, а также с добавлением донора водорода. Прекурсор катализатора (карбоксилат кобальта) и донор вводились из расчета 1,0 мас.% на нефть. Начальное давление было зафиксировано на уровне 0,3 МПа. Продолжительность эксперимента составляло 6 часов.

На основании результатов перераспределение компонентного состава образцов нефтей (SARA-анализ) установлено, что наиболее существенное снижение высокомолекулярных компонентов, а именно смол (на 21,4 % масс.) и асфальтенов (на 17,3% масс.) наблюдается в случае применения комплекса катализатора и донора протонов при температуре 180°C, что коррелирует с вязкостно-температурными данными, указывая на синергетический эффект выбранных параметров и условий протекания процесса акватермолиза.

Таким образом, применение катализатора, активная форма которого формируется *in situ*, в сочетании с донором водорода позволяет интенсифицировать процессы внутрипластового облагораживания высоковязкой нефти в процессе паротепловой обработки залежи, за счет необратимого снижения вязкости добываемой нефти, что облегчает ее дальнейшую транспортировку и переработку.

1. Maksutov R., Orlov G., Osipov A., *Energy Technologies*. 2005, **6**, 36-40.

## ПРОЕКТИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ МОНИТОРИНГА РАЗРАБОТКИ ЗАЛЕЖЕЙ СВЕРХВЯЗКИХ НЕФТИ

Усманов С.А., Судаков В.А., Хасанов Д.И., Степанов А.В., Хамидуллина Г.С.

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

*sausmanov@gmail.com*

На сегодняшний день в республике Татарстан активно разрабатываются залежи сверхвязкой нефти. Основной используемый способ добычи – технология парогравитационного дренирования (SAGD).

С целью увеличения эффективности разработки таких залежей остро стоит вопрос о создании комплекса методов для контроля и регистрации процессов, происходящих в залежи при закачке пара. Традиционные методы контроля за разработкой мелкозалегающих залежей преимущественно базируются на использовании сейсморазведки и плохо адаптированы для мелкозалегающих залежей сверхвязких нефтей либо очень дороги, таким образом, требуются специальные модификации геофизических методов.

Представленная работа выполнена в рамках комплексного проекта по созданию высокотехнологического производства при взаимодействии КФУ и ПАО «Татнефть» и поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. В работе приводятся основные подходы, примененные в процессе создания комплекса методов геофизического мониторинга паровой камеры при разработке мелкозалегающих залежей сверхвязкой нефти и природных битумов методом парогравитационного дренажа на месторождении ПАО «Татнефть». Разработанный комплекс методов включает в себя сейсмические и электроразведочные методы исследований.

В рамках разработки технологии мониторинга проведен комплекс специальных исследований керна для определения принципиальной возможности регистрации распространения паровой камеры с использованием сейсмических методов. Отличительной чертой разработанной технологии мониторинга является использование погружных приборов для регистрации сейсмического сигнала и регистрации становления электрического поля.

## ВЛИЯНИЕ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ЖЕЛЕЗА $\text{Fe}^{3+}$ НА ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ ТАТАРСТАНА В УСЛОВИЯХ ПАРОТЕПЛОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Феоктистов Д.А.<sup>a</sup>, Ситнов С.А.,<sup>a</sup> Вахин А.В.<sup>a</sup>, Каюкова Г.П.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

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

*briorius@inbox.ru*

На фоне истощения запасов и ухудшения структуры традиционных углеводородных ресурсов в последние годы в мире широко ведутся исследования, связанные с созданием новых высокоеффективных технологий извлечения и переработки тяжелого нефтяного сырья [1-2]. Одним из перспективных методов извлечения тяжелых нефтей, обеспечивающий снижение вязкости в пласте и частичное преобразование тяжелых компонентов, является паротепловое воздействие на пласт в присутствии катализатора [3].

В работе представлены результаты влияния на преобразование тяжелой нефти трехвалентного железа  $\text{Fe}^{3+}$ , которое вводилось в виде железосодержащего органического комплекса, полученного взаимодействием при нагревании лигандообразующего компонента и оксида железа (III). Объектом исследования служила тяжелая нефть Ашальчинского месторождения Татарстана и продукты ее паротепловой конверсии.

Результатами физико-химических методов исследований исходной нефти и продуктов ее преобразования являются данные по компонентному составу нефтей, их элементный анализ и структурно-группового состава. В продуктах опытов независимо от количества введенного катализатора увеличивается содержание легких компонентов, снижается доля смол и асфальтенов. По данным элементного анализа в процессе каталитического акватермолиза происходит перераспределение гетероатомов в изучаемых компонентах. В фракциях смол нефтей, подверженных преобразованию, увеличивается содержания азота. Увеличение доли водорода по отношению к углероду в продуктах каталитического акватермолиза свидетельствует об облегчении фракционного состава нефти. Процесс акватермолиза значительно влияет на структурно-групповой состав фракций асфальтенов. В основном воздействию подвергаются кислородсодержащие эфирных группы. Фракции смол нефтей после процесса каталитического акватермолиза характеризуются меньшей окисленностью, уменьшается показатель парафинистости, а при дозировке прекурсора катализатора 1% резко возрастает степень ароматичности.

1. Marshall A. G., Rodgers R. P., *Acc. Chem. Res.*, 2004, **37(1)**, 53-59.
2. Feoktistov, D.A., Sitnov, S.A., Vahin, A.V., Petrovnina, M.S., Kayukova, G.P., Nurgaliev, D.K. *Int. Journal of Applied Engineering Research*, 2015, **10(24)**, 45007-45014.
3. Hyne J. B., Greidanus J. W., Tyrer J. D. et al., Caracas, Venezuela, 7-17 February 1982. New York: McGraw Hill, 1984. P.404-411.

## ПЕТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕСЧАНИКОВ АШАЛЬЧИНСКОГО БИТУМНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Ханипова Р.Р., Королёв Э.А.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань, Россия*

*r.hanipova@mail.ru*

Ашальчинское месторождение природных битумов территориально расположено в Альметьевском районе Республики Татарстан. Продуктивными здесь являются песчаники шешминского горизонта уфимского яруса пермской системы. Битумоносные интервалы неоднородны, в них наблюдается переслаивание различных по своим свойствам и степени флюидонасыщенности песчаных пластов, перекрытых сверху пачкой «лингуловых глин». Анализ литологического строения и петрофизических характеристик песчаников продуктивных интервалов позволил выделить в разрезах три группы терригенных пород.

Первая группа представлена плотными известковыми песчаниками. В разрезах они характеризуются светло-серой с зеленоватым оттенком окраской, отсутствием, либо незначительным содержанием углеводородов. В породах обломочная часть составляет 65-85%, цемент–15-35%. Песчаники мелкозернистые, алевритистые, слабоглинистые. Пористость пород составляет 1,3-2,8%, плотность – 2,27-2,56 г/см<sup>3</sup>, остаточная влажность – 0,8-2,5%, предел прочности на сжатие – 75,34-105,16 МПа, на изгиб – 3,59-5,01 МПа.

Вторая группа представлена равномерно битумонасыщенными, слабоизвестковыми песчаниками. Породы относительно плотные, однородной темно-коричневой окраски. Обломочная часть составляет 89-93%, цемент–7-11%. Песчаники мелкозернистые, алевритистые. Пористость пород составляет 8,2-15,9%, плотность – 1,80-2,06 г/см<sup>3</sup>, остаточная влажность – 1,2-3,5%, предел прочности на сжатие – 11,46-22,72 МПа, предел прочности на изгиб – 0,15-1,08 МПа.

Третья группа представлена слаболитифицированным битумонасыщенным песчаником. Породы имеют рыхлое сложение, в керне рассыпаются на отдельные куски, характеризуются однородной темно-коричневой окраской. Обломочная часть составляет 93-96%, цемент–4-7%. Пористость пород составляет 10,8-18,3%, плотность – 1,40-1,86 г/см<sup>3</sup>, остаточная влажность – 1,08-2,06%. Прочностные свойства, в силу агрегатного состояния песчаников, определить не удалось.

## МАГНИТНЫЙ СОРБЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЙ ОЧИСТКИ ВОДЫ ОТ НЕФТЕПРОДУКТОВ И ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ

Харлямов Д.А., Маврин Г.В., Данилова Е.А.

*Набережночелнинский институт (филиал) Казанского (Приволжского) федерального университета, Набережные Челны, Россия*

*kharlyamov@gmail.com*

Нефтепродукты (НП) и ионы тяжелых металлов (ИТМ) являются одними из наиболее опасных компонентов загрязнений водных объектов. Методы очистки сточных вод (СВ), применяемые на многих производствах, в должной мере не обеспечивают эффективного извлечения НП и ИТМ, что требует внедрения дополнительных методов для доведения качества СВ до нормативных требований. В последнее время в качестве сорбционных материалов (СМ) все чаще рассматриваются отходы производства. Однако во многих случаях предлагаемые СМ требуют применение многоступенчатых систем и обладают индивидуальной селективностью по отношению к НП и ИТМ. В представленной работе на основе отходов производства МДФ плит (древесное волокно) и магнетита получен магнитный СМ способный одновременно производить извлечение из СВ и НП, и ИТМ.

В ходе работы определен фракционный состав СМ, а также физико-химические характеристики, на растровом электронном микроскопе получены снимки исходного и модифицированного волокна, методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии определен элементный состав. При помощи ИК Фурье-спектроскопии в интервале частот  $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$  сняты и описаны ИК-спектры. Определены значения максимальной сорбционной емкости и водопоглощения, подобраны оптимальные условия сорбции.

На гальваническом производстве проведены промышленные испытания предлагаемого СМ для доочистки СВ. Согласно полученным результатам применение предлагаемого СМ позволило уменьшить в СВ содержание эмульгированных НП и ИТМ до нормативных требований. Средняя эффективность предлагаемого метода составила 97 %.

Полученный СМ не требует переоснащения существующих очистных сооружений и может использоваться на типовом стандартном оборудовании, обладает относительно невысокой стоимостью, что будет способствовать легкому и быстрому внедрению его на предприятиях.

## УТОЧНЕНИЕ ЗАПАСОВ НЕФТИ В ЗОНАХ РАЗВИТИЯ ВИЗЕЙСКОГО ВРЕЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕОЛОГИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Чукмарова А.И.<sup>a</sup>, Шамсутдинов Р.Ф.<sup>a</sup>, Мингазов И.Р.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Татарское геологоразведочное управление ПАО «Татнефть», Казань, Россия

<sup>b</sup> К(П)ФУ, Институт геологии и нефтегазовых технологий, Казань, Россия

*chukmarova\_aliya@mail.ru*

Основной целью работы является уточнение запасов нефти залежи, осложненной зоной развития визейского вреза. Главной задачей является узучение строения залежи нефти путем комплексного анализа интерпретации данных ГИС, результатов проведенных сейморазведочных работ в модификации МОГТ 3D и построения геологической модели в программном комплексе Roxar.

В данной работе рассматривается Западно-Яуркинское поднятие Яуркинского месторождения, расположенного в Самарской области, вблизи с северной границей с Республикой Татарстан. Последний подсчет запасов нефти бобриковской и турнейской залежей был проведен в 2012г., после чего были проведены сейморазведочные работы и пробурен ряд скважин, уточнившие геологическое строение, в частности контур развития вреза.

Комплексирование данных глубокого бурения и сейморазведки МОГТ 3D позволило авторам уточнить пространственное расположение «врезовой» зоны, которая, предположительно, сливается в единую протяженную область и контролирует нефтеносность нижнекаменноугольных отложений. Построение «врезовой» зоны производилось с использованием интегрированного структурного моделирования, где для построения структурной поверхности использовались карты толщин каждого пласта бобриковского горизонта по отдельности. Так, для пласта Б2 и Б3 карты толщин ограничивались выделенной зоной вреза. Также обязательным условием при интегрированном моделировании является учет взаимного расположения всех поверхностей бобриковского горизонта и турнейского яруса, построенных на основе скважинных и сейсмических данных.

Таким образом, зная характер расположения «врезовой» зоны в трехмерном пространстве мы произвели подсчет запасов нефти на геологической модели. С учетом уточненного геологического строения и изменённым количеством запасов по объектам мы сможем подобрать оптимальный комплекс мероприятий (схему эксплуатационного бурения), совершенствующий систему разработки Западно-Яуркинского поднятия.

## ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ РАЗРАБОТКИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ С РАЗЛОМНО-БЛОКОВЫМ СТРОЕНИЕМ И С ЗОНАМИ ТРЕЩИНОВАТОСТИ

Бакиров И.И.<sup>b</sup>, Шамсутдинов Р.Ф.<sup>a</sup>, Попова И.А.<sup>a</sup>, Чукмарова А.И.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Татарское геологоразведочное управление ПАО «Татнефть», Казань, Россия

<sup>b</sup> К(П)ФУ, Институт геологии и нефтегазовых технологий, Казань, Россия

*shamsutdinov.rustem@gmail.com*

Основной целью проведенных исследований была оптимизация расположения добывающих и нагнетательных скважин в зависимости от положения в блоке или от зон разуплотнения вмещающих пород.

Результаты сейсморазведки в модификации МОГТ 3D позволили выделить блокоразделяющие разломы на Западно-Измайловском и зоны тектонической трещиноватости на Южно-Измайловском месторождениях. Необходимо отметить, что на месторождениях пробурен ряд эксплуатационных скважин, ведется разработка объектов.

В работе были проведены: анализ геологического строения залежей нефти, анализ динамики работы добывающих скважин (в ряде скважин прослеживается относительно хорошая зависимость дебита скважин от расстояния до зоны трещиноватости) и моделирование резервуаров с помощью программного комплекса ROXAR. В качестве исходной информации для геологического моделирования использовался 3D куб параметра «ant-tracking».

Главный структуроформирующий разлом субширотного простирания Западно-Измайловского ограничивает поднятие с юга, оперяющие разломы ортогональны главному, делят резервуар на блоки, имеющие разное гипсометрическое положение в плане, что влечет изменение уровней ВНК в пределах залежей нефти. Разница в уровнях ВНК для данково-лебедянских отложений составляет 12,3 м, для турнейских – 10,5 м. Образно выражаясь, строение залежей нефти очень напоминает «клавиши пианино». Тектонические напряжения в районе Южно-Измайловского месторождения были гораздо менее слабыми, что привело к развитию зон разуплотнения и трещиноватости отложений осадочного чехла.

Оптимальным является размещение добывающих скважин внутри блоков вблизи зоны разуплотнения пласта, а скважин под нагнетание - в блоках, не изолированных зоной трещиноватости от добывающих скважин.

Исходя из выявленных закономерностей, дальнейшее разбуривание объектов рекомендуется проводить с использованием боковых и горизонтальных стволов, на основе результатов интерпретации сейсморазведки 3D, выявившей зоны разрывных нарушений и разуплотнения пласта. При размещении проектных добывающих и нагнетательных скважин траекторию проводки стволов следует выбирать с учетом блокоразделяющих разломов и зон разуплотнений и трещиноватости.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛОТНОСТИ СЕТКИ СКВАЖИН ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ПРОГНОЗНЫХ РАСЧЕТОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОДНОГО ИЗ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ТАТАРСТАНА

Судаков В.А., Шангараева А.И.

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

*sudakovav@gmail.com, AIShangaraeva@kpfu.ru*

В работе исследуется влияние плотности сетки скважин для выбора варианта разработки одного из месторождений Республики Татарстан. Выполнены и проанализированы восемь прогнозных вариантов с помощью гидродинамической модели. Размещение проектных скважин выполнено по равномерной треугольной сетке с расстоянием между скважинами 50м, 100м, 150м, 300м, разработка залежей рассматривалась на естественном режиме и с организацией ППД. Бурение запланировано от центра к периферии. Условия вскрытия перфорацией в модели для скважин во всех вариантах заданы с одинаковыми параметрами, по умолчанию. Скин-фактор задан равным 0. Условиями отключения и перевода скважин под нагнетание являлись достижение в процессе эксплуатации обводненности продукции 98% либо снижение дебита по нефти до 0.8 м<sup>3</sup>/сут (0.5т/сут).

Для изучения взаимовлияния скважин в зависимости от расстояния между ними выполнены расчеты на гидродинамической модели с разрежением сетки. Расчеты показали, что с увеличением плотности сетки скважин входные дебиты падают в 1,4-1,6 раза (таблица 1, рисунок 1).

Таблица 1. – Зависимость входного дебита от плотности сетки скважин.

Сетка	Вх дебит (т/сут)	Кол-во скв.
50	1.15	35
100	1.64	12
150	2.49	4
300	3.95	4

В результате многовариантных расчетов определено, что технологически оптимальным для объектов данного поднятия является сетка 150 на 150 метров. Плотность сетки составляет 3.2 га/скв. При данной сетке достигается максимальный КИН за оптимальные сроки с минимальным количеством скважин.

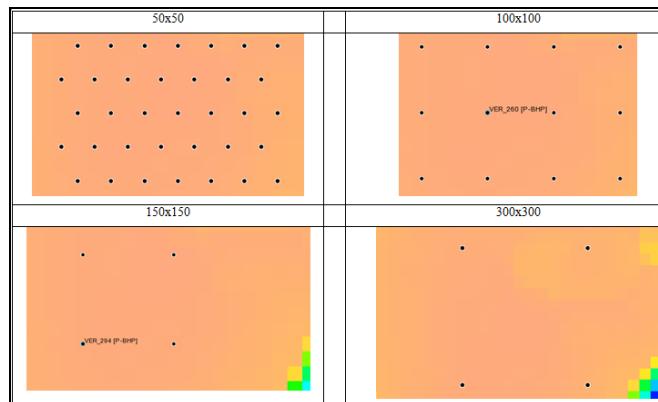


Рисунок 1. – Схема расположения скважин.

## **ОЦЕНКА ПРИГОДНОСТИ И ВОЗМОЖНОСТИ ДОБЫЧИ НИЖНЕПЕРМСКИХ ВОД ДЛЯ РАЗРАБОТКИ АШАЛЬЧИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ СВЕРХВЯЗКИХ НЕФТЕЙ**

Ястребова Е.Н.

*Институт Геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия*

*yastrebova\_kate@mail.ru*

В связи с истощением запасов девонских нефей и переходом их разработки в позднюю стадию, ведутся работы по освоению перспективных источников углеводородного сырья, к которым, прежде всего, относятся сверхвязкие нефти и природные битумы.

На территории Татарстана выявлено около 450 залежей ПБ. Основные запасы их территориально располагаются в пределах восточного борта Мелекесской впадины, западном склоне Южно-Татарского свода (ЮТС), в так называемой Черемшано-Бастрыкской зоне. Залежи сосредоточены на сравнительно небольшой глубине. Несмотря на это добыча битумов затруднительна. Трудности извлечения битумов обусловлены высокой вязкостью, низким пластовым давлением, температурой и газосодержанием, а также наличием воды в подошвенной части и теле продуктивного пласта.

Подавляющее большинство таких залежей в мировой практике разрабатывается карьерным и шахтным способами. В Татарстане в конце 80-х годов прошлого столетия начаты опытно-промышленные работы (Мордово-Кармальское месторождение) с использованием внутрипластового горения, а с 2009 года промышленные работы с использованием парогравитационного метода (Ашальчинское месторождение). Для получения пара используются пресные речные воды, запасы которых ограничены. Поэтому ОАО «Татнефть» ставит задачу по поиску подземных вод достаточных для выработки пара.

В связи с этим изучение гидрогеологических условий подобных месторождений становится весьма актуальным.

## **СЕКЦИЯ 3 ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ Mn<sup>2+</sup> С ФРАГМЕНТОМ БЕТА-АМИЛОИДА АВ13-23 МЕТОДОМ ЯМР

Абдрахманов Р.Ж.<sup>a</sup>, Блохин Д.С.<sup>a</sup>, Усачев К.С.<sup>a</sup>, Каратаева Ф.Х.<sup>b</sup>, Клочков В.В.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

<sup>b</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

*Abdrakhmanov.kfu@yandex.ru*

В данной работе было рассмотрено связывание ионов Mn<sup>2+</sup> с фрагментом бета-амилоидного пептида (Aβ<sub>13-23</sub>). Возможный механизм агрегации Aβ-пептида, связан с образованием мономерного комплекса металл-пептид, вызывающий конформационные изменения пептида [1]. Исследование взаимодействия Aβ<sub>13-23</sub> с ионом металла проводились с помощью одномерных <sup>1</sup>H и двумерных <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H методов ЯМР-спектроскопии.

Данные ЯМР, полученные на сегодняшний день, для Aβ и для фрагментов утверждают, что пептид в водном растворе имеет неупорядоченное конформационное состояние, а в среде имитирующую биологическую мембрану принимает структуру в виде α-спирали [2]. Фрагмент Aβ<sub>13-23</sub> содержит предполагаемый центр агрегации [3]. Изучение Aβ<sub>13-23</sub> с ионами Mn<sup>2+</sup> даст нам информацию о взаимодействии пептида Aβ с ионами металлов.

Постепенное добавление соли марганца к Aβ<sub>13-23</sub> вызывает селективное и прогрессирующее уширение линий ЯМР-сигналов, а также наблюдается увеличение времени релаксации протонов, что позволяет отображать остатки, которые имеют неисчезающее диполярное или скалярное взаимодействие со спином электрона иона Mn<sup>2+</sup>. Наиболее заметное исчезновение сигналов в двумерных спектрах, при больших концентрациях ионов Mn<sup>2+</sup>, наблюдалось в NH-области аминокислотного остатка аспартата D23. Это может быть вызвано экранированием аспартата ионом марганца вследствие близкого расположения иона и аспартата друг к другу.

Из полученных данных, можно предположить, что С-концевая часть пептида Aβ<sub>13-23</sub> участвует в связывании с ионами Mn<sup>2+</sup> в присутствии аминокислотного остатка аспартата.

1. Gaggelli E., Janicka-Klos A., Jankowska E., Kozlowski H., Migliorini C., Molteni E. NMR Studies of the Zn<sup>2+</sup> Interactions with Rat and Human β-Amyloid (1-28) Peptides in Water-Micelle Environment. *J. Phys. Chem.*, 2008, B, **112**, 100-109.
2. Coles, M., Bicknell, W., Watson, A. A., Fairlie, D. P., and Craik, D. J. (1998). Solution structure of amyloid β-peptide (1-40) in a water-micelle environment. Is the membrane-spanning domain where we think it is? *Biochemistry*, 1998, **37**, 11064-11077.
3. Usachev, K.S., Filippov, A.V., Filippova, E.A., Antzutkin, O.N., Klochkov, V.V. *Journal of Molecular Structure*, 2013, **1049**, 436-440.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХОЛЕСТЕРИНА, КРЕАТИНИНА И МОЧЕВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА

Ильина М.А., Абзалова И.А., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

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

*Degteva\_marina@rambler.ru*

Для экспресс-диагностики заболеваний в последние годы в качестве объекта анализа все чаще предлагается использовать слюну. В состав слюны входят различные неорганические и органические вещества, в том числе холестерин (ХС), креатинин (Кр) и мочевая кислота (МК), которые являются маркерами многих заболеваний. Поэтому разработка высокочувствительных, селективных и экспрессных способов определения ХС, Кр и МК является актуальной задачей аналитической химии.

В настоящей работе рассмотрена возможность селективного вольтамперометрического определения ХС, Кр и МК на стеклоуглеродном электроде (СУ) с электроосажденными частицами золота.

В кислой среде на немодифицированном СУ МК окисляется с перенапряжением в далекой области потенциалов (при  $E_{\text{п}} 0.90$  В), а ХС и Кр в рабочей области потенциалов не окисляются. Частицы золота, электроосажденные на СУ проявляют каталитическую активность при окислении ХС, Кр и МК. Катализ проявляется в уменьшении перенапряжения окисления субстратов и увеличении тока окисления модификатора. Зависимость тока пика от скорости изменения потенциала указывает на кинетический характер окисления органических соединений. ХС, МК и Кр на электроде с электроосажденными частицами золота окисляются при 0.55, 0.80 и 1.10 В соответственно. Разность потенциалов пиков окисления этих соединений составляет 250-300 мВ, поэтому с помощью этого ХМЭ возможно совместное определение ХС, Кр и МК по одной вольтамперограмме.

На основании полученных результатов разработан способ вольтамперометрического определения ХС, МК и Кр при совместном присутствии на электроде с частицами золота. Градуировочный график линеен в диапазоне концентраций от  $5 \times 10^{-7}$  М до  $5 \times 10^{-3}$  М для ХС, от  $5 \times 10^{-8}$  М до  $5 \times 10^{-3}$  М для МК и от  $5 \times 10^{-6}$  М до  $5 \times 10^{-3}$  М для Кр. Относительное стандартное отклонение не превышает 5%.

## ИЗУЧЕНИЕ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ ЖЕЛАТИНЫ И ПОЛИСАХАРИДА К-КАРРАГИНАНА

Абмаева А.Д.

*Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия*  
*adabmaeva@gmail.com*

Исследование физико-химических принципов формирования и условий стабильного существования (био)полиэлектролитных комплексов (ПЭК) «желатина-полисахарид» имеет как фундаментальное, так и прикладное значение. В пищевой промышленности данные комплексы могут использоваться в качестве стабилизаторов, эмульгаторов и гелеобразователей пищевых продуктов.

Структурообразующие свойства (био)ПЭК «желатина -полисахарид» демонстрируют ярко выраженный синергетический эффект по сравнению со свойствами отдельно взятых компонентов. Кроме того, использование полисахаридов морского происхождения (к-каррагинан) повышают пищевую ценность продуктов питания и маскируют нежелательный привкус желатины. Другое важное направление исследования (био)ПЭК «желатина – полисахарид» - разработка технологии биосовместимых и биодеградируемых средств хранения и адресной доставки лекарственных веществ в живой организм.

Целью настоящей работы является исследование процесса гелеобразования для растворов желатины, к-каррагинана и их смесей методом ЯМР с ИГМП (ядерный магнитный резонанс с импульсным градиентным магнитным полем). Измерения проводились на спектрометре Bruker Avance 400 WB в температурном диапазоне от 323К до 288К. Получены результаты в виде зависимости поведения коэффициентов самодиффузии воды, желатины, к-каррагинана от температуры. Это позволит сделать выводы о процессе гелеобразования в данных системах.

## ФТОРИДНЫЕ КРИСТАЛЛЫ, АКТИВИРОВАННЫЕ ТРЁХВАЛЕНТНЫМИ ИОНАМИ НЕОДИМА – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КАЧЕСТВЕ СВЕТОУПРАВЛЯЕМОГО ОПТИЧЕСКОГО ЗАТВОРА

Наумов А.К., Аглямов Р.Д.

*Казанский Федеральный (Приволжский) Университет, Казань, Россия*

*aglyam92@mail.ru*

Развитие фотолитографии, в настоящее время, состоит в освоении технологии с использованием лазера с длиной волны 193 нм. В связи с этим для технологических задач возникла проблема в управлении его излучением – быстрое прерывание его пучка в нужные моменты времени. В работе [1] была предложена и экспериментально показана идея светоуправляемого оптического затвора (СУОЗ) на основе f-f переходов ионов Nd<sup>3+</sup>, которая позволяла «включать и выключать» спектральный диапазон 260-320 нм. Однако, из-за отсутствия потребностей практики, в использовании этого диапазона, идея не получила развития.

В данной работе, на основе данных литературы, был осуществлён подбор перспективных для СУОЗ фторидных кристаллов, активированных ионами редкоземельных элементов. Ими явились кристаллы SrF<sub>2</sub>:Nd<sup>3+</sup>, CaF<sub>2</sub>:Nd<sup>3+</sup>, KYF:Nd<sup>3+</sup> и NYF:Nd<sup>3+</sup>. Этот подбор производился по наименьшей интенсивности полос поглощения в области 180-270 нм.

Для исследования оптических свойств, этих подобранных кристаллов, была создана установка, на которой были зарегистрированы спектры поглощения из основного состояния в ВУФ и ИК областях спектра, а также спектры поглощения кристаллов в ВУФ области спектра, при возбуждении состояния <sup>4</sup>F<sub>3/2</sub> ионов Nd<sup>3+</sup>.

Результаты измерений для каждого из кристаллов представлены на совмещённых графиках. На этих графиках видно приращение поглощения образцов кристаллов на 2-3 см<sup>-1</sup> в области 193 нм при возбуждении состояния <sup>4</sup>F<sub>3/2</sub> ионов Nd<sup>3+</sup>, что вполне приемлемо для практики.

Таким образом, проведёнными исследованиями была экспериментально показана пригодность отобранных кристаллов для использования в практике в качестве СУОЗ для длины волны 193 нм.

1. Dubinskiy M. A. Light-driven Optical Switch, Based on Excited-state Absorption in Activated Dielectric Crystals. *Journal of Modern Optics*, 1991, **38(11)**, 2323-2326.

## КАТАЛИЗИРУЕМОЕ КОМПЛЕКСАМИ МЕТАЛЛОВ ГРУППЫ ХРОМА ДЕГАЛОГЕНФОСФОРИЛИРОВАНИЕ ГАЛОГЕНАРЕНОВ

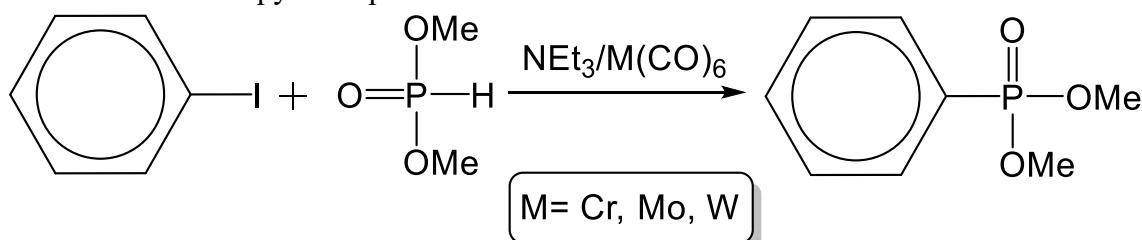
Адельшина М.В., Плотникова А.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

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

*adelshinamaya@gmail.com*

Ранее на кафедре ВМ и ЭОС было осуществлено дехлорфосфорилирование хлорбензола, находящегося в координационной сфере хрома [1], однако обнаруженная реакция протекала как стехиометрическая, а ее продукт – фенилдиэтилфосфит не был выделен из координационной сферы переходного металла.

Мы решили осуществить попытку провести катализическое дегалогенфосфорилирование йодбензола диметилфосфитом в присутствии карбонильных комплексов металлов группы хрома.



Для всех трех гексакарбонилметаллов в реакционной смеси детектировалось образование целевого фенилфосфоната, в реакционной смеси, в которую в качестве катализатора был добавлен гексакарбонилхром, наблюдалась полная конверсия диметилфосфита.

В аналогичных условиях реакции при переходе от гексакарбонилхрома к гексакарбонилвольфраму понижается как степень конверсии диметилфосфита, так и выход O,O-диметилфенилфосфоната. Для процесса, катализатором которого является Cr(CO)<sub>6</sub>, выход O,O-диметилфенилфосфоната после выделения и очистки составляет 73%, его спектральные данные соответствуют литературным. Возможно, активность каталитической системы обуславливает образование йодбензолтрикарбонилметаллов, протекающее быстрее для хрома.

1. A.I. Kuramshin, A.S. Gazizov, E.S. Kuramshina, R.A. Cherkasov Dehalophosphorylation Of Halobenzenes In The Coordination Sphere Of Group VIb Metals. *Russ. J. Gen. Chem.*, 2000., **70**(8), 1306-1307.

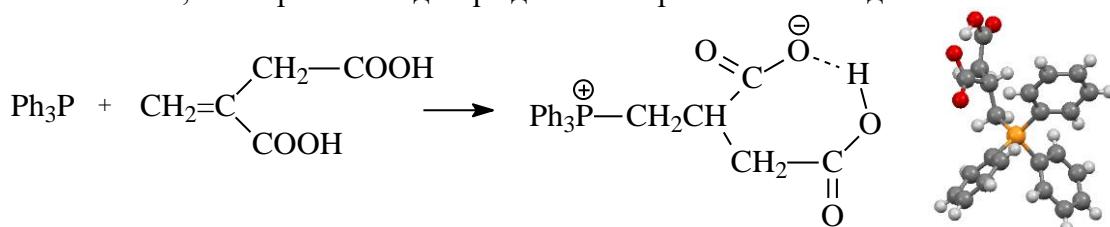
## СИНТЕЗ 3-КАРБОКСИ-2-((ТРИФЕНИЛФОСФОНИЙ)МЕТИЛ)ПРОПАНОАТА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Аксунова А.Ф., Бенджекевич К.Г., Бахтиярова Ю.В.

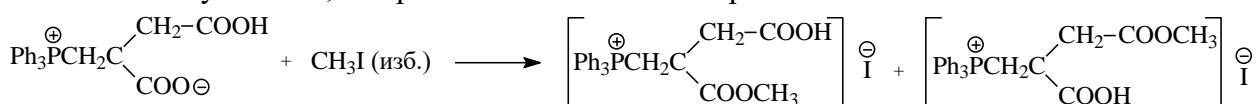
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

*alfiya-nizamieva@mail.ru*

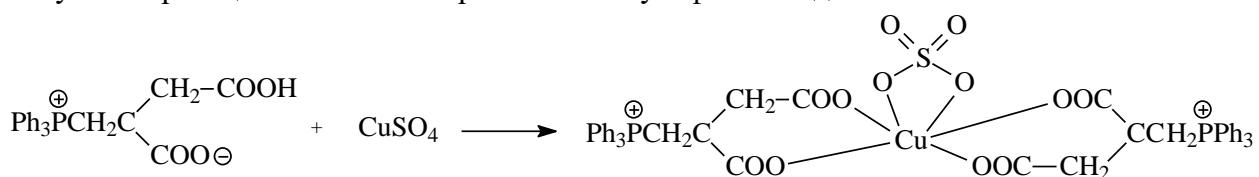
Реакция трифенилfosфина с итаконовой кислотой протекает с образованием кристаллического продукта 3-карбокси-2-((трифенилфосфоний)метил)пропаноата, д<sub>р</sub> 21.2 м.д., Т.пл. 160 °C (с разл). При хранении со временем дикарбоксилатный фосфабетаин остается стабильным, его строение подтверждено спектральными методами и РСА.



3-Карбокси-2-((трифенилфосфоний)метил)пропаноат был вовлечен в реакцию алкилирования. Реакция алкилирования фосфабетаина с избытком йодистого метила протекает в мягких условиях, с образованием смеси изомеров в соотношении 1:1.



Дикарбоксилатный фосфабетаин 3-карбокси-2-((трифенилфосфоний)метил)пропаноат легко вступает в реакции комплексообразования с сульфатом меди.



Строение продуктов подтверждено методами ИК и ЯМР спектроскопии.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ЭПОКСИДНЫХ СМОЛ ЭВТЕКТИЧЕСКИМИ СМЕСЯМИ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ

Алчин Р.М., Карамова А.И., Амирова Л.М.

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

*naryslan@yandex.ru*

Ароматические амины обладают хорошими отверждающими качествами, однако они являются твердыми кристаллами, плавящимися при температурах выше 70°C, и трудно растворяются в эпоксидных олигомерах. Поэтому важно снизить температуру плавления и улучшить растворимость подобных систем. Одним из путей устранения указанных недостатков является использование эвтектических смесей различных ароматических аминов.

Целью работы было получение фазовых диаграмм двойных систем на основе ароматических аминов, исследование растворимости таких систем в эпоксидных олигомерах, изучение процесса отверждения эпоксидных олигомеров эвтектическими смесями, а также изготовление пластины из композиционного материала и полученных образцов.

Для исследования были взяты следующие ароматические амины: 4,4'-диаминодифенилметан, 4,4'-диаминодифенилсульфон, 4,4'-диаминодифенилоксид, орто-, пара-, и мета-фенилендиамины. В качестве эпоксидного олигомера использовалась эпоксидная смола ЭД-22, а в качестве наполнителя использовалась углеродная ткань.

Значения температур плавления, а также режимы отверждения определяли на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия). Температуры стеклования определяли на динамическом механическом анализаторе DMA Q800. Испытания полученного композиционного материала проводились на универсальной электромеханической машине Instron 5882.

Были построены фазовые диаграммы двойных систем ароматических аминов и определены составы эвтектических смесей. Были изучены процессы отверждения эпоксидных олигомеров эвтектическими смесями ароматических аминов и оптимизированы температурно-временные режимы отверждения. Определены температуры стеклования полимеров на основе ЭД-22 и смесей ароматических аминов. Изучены теплофизические свойства эпоксидных полимеров, получены теплостойкие связующие для изготовления композитов на основе эвтектических составов ароматических аминов. С применением полученного связующего изготовлена углепластиковая пластина. Исследованы теплофизические свойства полученного композиционного материала. Благодаря наличию большого числа ароматических циклов и высокой функциональности эпоксидной смолы, после отверждения формируется теплостойкий и высокопрочный композиционный материал.

1. Амирова Л.М., Сидоров И.Н., Андрианова К.А. Физико-химия полимеров: Учебное пособие. Казань: Изд-во Казан, гос. техн. ун-та, 2005. 220 с.
2. M.S. Fedoseev. Curing of epoxy oligomers by the eutectic mixture of aromatic amines. *Polymer science, Series D. Clues and Sealing Materials*, 2008, **1(1)**, 41-43.

## ПРИМЕНЕНИЕ ГЛИН РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ БЕЛОГО КЕРАМИЧЕСКОГО КИРПИЧА

Арискина К.А., Салахов А.М.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*kristina.ariskina.95@mail.ru*

При производстве керамических материалов, применяемых как в строительстве, так и в быту, одним из фундаментальных факторов, определяющих потребительские свойства, является цвет. В последнее время классический терракотовый цвет облицовочного кирпича менее актуален по сравнению с другими цветами. Особой популярностью пользуются светлые оттенки керамического кирпича, которые достигаются использованием при производстве различных беложгущихся глин. Однако в республике Татарстан широко распространены не только беложгущиеся глины, но и красножгущиеся. Применение красножгущихся глин при производстве белого керамического кирпича также представляет большой интерес.

Цель настоящей работы является разработка технологии производства белого керамического кирпича на основе глин различных месторождений республики Татарстан.

В процессе исследования решались следующие задачи:

1. Исследовать глины Алексеевского, Салмановского и Нижнеуварельского месторождений (электронный микроскоп EVO-50XVP, дифрактометр XRD-7000S (Shimadzu, Япония), дифрактометр D2 Phaser (Брукер, Германия));
2. Провести фазовый анализ керамики из Салмановской и Алексеевской глин (мессбауэровский спектрометр СМ1201 (ИАП РАН, г. Санкт-Петербург));
3. Определить валентное состояние ионов железа и характер их химической связи в керамике из Алексеевской и Салмановской глин (мессбауэровский спектрометр СМ1201 (ИАП РАН, г. Санкт-Петербург));
4. Выявить закономерности образования светлой окраски керамических изделий из глин Салмановского и Нижнеуварельского месторождений, а также Алексеевского месторождения с добавкой мела.

Полученные образцы из Салмановской глины имеют белый цвет, из Алексеевской глины – коричневый, однако содержание железа в исходных глинах практически одинаково. Белый цвет образцов из Салмановской глины обусловлен высоким содержанием карбонатов. Добавка мела к глине Алексеевского месторождения приводит к осветлению образцов. Образцы из Нижнеуварельской глины имеют бледно-коричневый цвет. Выявлено, что с подъемом температуры обжига в серии образцов из Нижнеуварельской глины наблюдается осветление образцов.

## АНАЛИЗ КЕРАМИКИ ИЗ КОМПОЗИЦИЙ КАОЛИНИТОВЫХ ГЛИН И ЛЕГКОПЛАВКОЙ ГЛИНЫ САХАРОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Арискина Р.А., Салахов А.М.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*ariskina\_regina@mail.ru*

Одной из главных задач в развитии современной керамики является улучшение качества лицевого кирпича. Достигнуть улучшения свойств керамических изделий возможно за счет введения в исходный состав керамической шихты добавок из высококачественного сырья, однако в настоящее время во многих регионах России остро стоит проблема его нехватки. С целью выявления влияния, оказываемого светложгущимися глинами Нижне-Увельского и Кумакского месторождений на легкоплавкую глину Сахаровского месторождения, были сделаны серии образцов из композиций данных глин в соотношениях 3:7, 4:6, 5:5, после чего проведен двухчасовой обжиг при температурах 1000°C и 1050°C в муфельной печи.

Целью настоящей работы является определение влияния, оказываемого добавками из оgneупорных светложгущихся глин на легкоплавкую глину Сахаровского месторождения. Для этого проведена сравнительная характеристика каолинитовых глин Нижне-Увельского, Киембаевского и Кумакского месторождений и анализ их композиций с легкоплавкой глиной Сахаровского месторождения.

Исследования проводились с использованием следующих приборов:

1) рентгенофазовые (РФА) - на дифрактометре XRD-7000S (Shimadzu, Япония) в комплекте с высокотемпературной приставкой. Количественный анализ выполнен в программе Difrac.eva; 2) электронно-микроскопические - на микроскопе EVO-50XVP.

В результате исследований установлено, что в керамических образцах из композиций на базе глины Сахаровского месторождения увеличение доли светложгущихся глин Нижне-Увельского и Кумакского месторождений приводит к росту усадки, снижению водопоглощения и росту плотности. Таким образом, установлена целесообразность использования добавок из каолинитовых глин в технологии производства лицевого кирпича из низкокачественного глинистого сырья с целью улучшения их физико-механических свойств. Более того выявлено, что с ростом температуры в интервале от 1000°C до 1150°C данные каолинитовые глины претерпевают изменения в цвете от светло-розовых до бежевых оттенков.

**КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ПОЛЕ НА ИОНАХ ПРАЗЕОДИМА В КРИСТАЛЛЕ  
 $\text{PrCu}_3\text{Ru}_4\text{O}_{12}$**

Архипова Е.А.<sup>a</sup>, Еремин М.В.<sup>a</sup>, Еремина Р.М.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт Физики, Казань,  
Россия

<sup>b</sup> Казанский физико-технический институт имени Е. К. Завойского РАН, Казань,  
Россия

*elya4445@yandex.ru*

Построен оператор кристаллического поля, действующего на 4f-электроны иона празеодима в кристалле  $\text{PrCu}_3\text{Ru}_4\text{O}_{12}$ . Согласно рентгеноструктурным данным ионы кислорода в этом кристалле формируют икосаэдрическое окружение, а ионы рутения – кубическое. Точечная группа симметрии -  $T_h$ . Такая группа симметрии встречается довольно редко и поэтому вид соответствующего оператора кристаллического поля мало изучен. Построенный оператор кристаллического поля применен для расчета уровней энергии основного мультиплета  $\text{Pr}({}^3\text{H}_4)$ . Параметры кристаллического поля определены по данным о температурной зависимости магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости. Анализ данных о зависимости удельной теплоемкости от магнитного поля позволил установить, что основное состояние (триплет) при низких температурах слегка расщеплено на дублет и синглет, причем нижним является дублет.

## ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ ГАДОЛИНИЯ(III) С ЛИМОННОЙ КИСЛОТОЙ В РАСТВОРАХ КАТИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Атласова З.З., Журавлева Ю.И., Амиров Р.Р.

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

*azzatlasova@mail.ru*

Растворы полимеров представляют собой ультрамикрогетерогенную среду, способную влиять на ход химических реакций, состав и свойства продуктов. В настоящее время для очистки технологических сточных вод от катионов металлов перспективно использование метода полимер-усиленной ультрафильтрации. Обнаружить связывание полимеров с комплексами парамагнитных ионов металлов позволяет метод ЯМР-релаксации, ранее успешно использованный для изучения таких взаимодействий с участием ионов марганца и комплексонов.

В результате проведенного исследования было показано, что стабилизированный катионным полимером полиэтиленимином (PEI) трис-комплекс  $\text{Gd}(\text{HL})_2\text{L}^{4-}$  образуется в растворе только в присутствии образцов разветвленного PEI (мол. масса не ниже 25000); стабилизированный PEI трис-комплекс  $\text{Gd}(\text{HL})_2\text{L}^{4-}$  не разрушает солевой фон в количестве 150 мМ хлорида натрия; присутствие иного катионного полимера, хлорида поли(диаллил-N,N'-диметиламмония) (PDADMAC) не привело к образованию и стабилизации вышеупомянутого трис-комплекса. Это подтверждает важность типа головной группы полимера в стабилизации анионных комплексов. В PDADMAC катионная функция обусловлена наличием четвертичных атомов азота, не способных к дополнительному образованию водородных связей. В PEI катионная функция обусловлена наличием аммонийных групп азота, способных к образованию водородных связей. Последнее, по-видимому, является главным фактором стабилизации анионных комплексов (в том числе необычного состава) в растворах PEI.

Получен важный практический результат исследования: Для успешного проведения ультрафильтрации растворов, содержащих ионы гадолиния(III), необходимо ввести пятикратный избыток лимонной кислоты, избыток водорастворимого катионного полимера PEI (мол. масса не менее 25000) и поддерживать pH среды в диапазоне 4-8.

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

## ПРИЕМНОЕ УСТРОЙСТВО ДЛЯ БЕСПИЛОТНЫХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ

Ахмадиев А.Ф.

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

*Gallimov26@yandex.ru*

Взрывной рост рынка БЛА и связанных с ним услуг прогнозируется при преодолении в скором времени ряда технических и административных барьеров, ограничивающих использование БЛА в национальном воздушном пространстве. Использование беспилотных авиационных комплексов (БАК) в гражданской области на сегодняшний момент практически ограничивается частными случаями локальных применений в интересах решения текущих производственных или хозяйственных задач, преимущественно в экспериментальном порядке [1].

Целью работы является создание и разработка системы приема данных с борта БПЛА.

Для достижения цели дипломной работы поставлены следующие задачи:

- провести литературный и патентный анализ;
- рассмотреть основные принципы работы системы связи БПЛА;
- увеличить пропускную способность и помехоустойчивость каналов передачи информации;

– проанализировать элементную базу компонентов БПЛА в рамках импорт замещения;

– на основе данных анализа, разработать оптимизированную систему приема данных с борта БПЛА.

По итогам работы был спроектирован приемник с дискретизацией промежуточной частоты (ПЧ), используемый для работы нелицензируемом диапазоне радиочастотного спектра ISM (промышленный, научный и медицинский диапазон) 2,4–2,48 ГГц.

1. Ганин С.М., Карпенко А.В., Колногоров В.В., Петров Г.Ф. Беспилотные летательные аппараты. Тула. 1999.

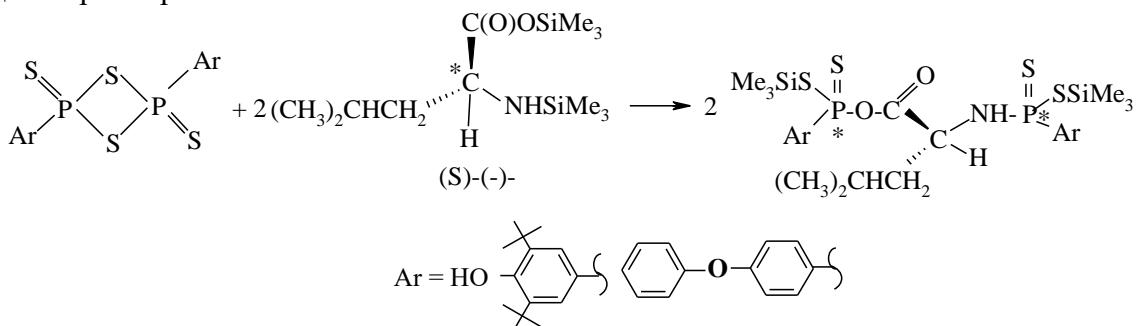
## БИС(ТРИМЕТИЛСИЛИЛОВЫЕ) ДИЭФИРЫ (S)-(-)-АМИНОКИСЛОТ В РЕАКЦИЯХ ДИТИОФОСФОРИЛИРОВАНИЯ

Ахмедова Г.Р., Белов Т.Г., Низамов И.Д., Черкасов Р.А., Низамов И.С.

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

*2675007@mail.ru*

Для создания синтетических аналогов фосфорсодержащих природных соединений с потенциальной биологической активностью наиболее перспективными являются протеиногенные (*S*)-(-)-аминокислоты и олигопептиды на их основе. В качестве дитиофосфорилирующих агентов (*S*)-(-)-аминокислот можно использовать сульфины фосфора такие, как тетрафосфордекасульфид и 2,4-диорганил-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфины. (*S*)-(-)-Аминокислоты, содержащие, по крайней мере, две функциональные группы – карбокильную и аминогруппу – в реакциях с тетрафосфордекасульфидом или 2,4-диорганил-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфидами дают трудноразделимую смесь дитиофосфатов или дитиофосфонатов. В связи с этим протоны карбоксильных и аминогрупп в (*S*)-(-)-аминокислотах мы заменили на триметилсилильные группы и получили их O,N-бис(триметилсиландиэфиры). Так, O,N-бис(триметилсиландиэфир) (*S*)-(-)-лейцина гладко реагирует с 2,4-диарил-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфидами в мягких условиях с образованием O,N-бис(S-триметилсиландиэфир)арилдитиофосфонатов в виде смеси диастереомеров.



Хиальные O,N-бис(S-триметилсиландиэфир)арилдитиофосфонаты использованы в реакциях замещения с ортоэфирами с целью получения S-эфиров дитиофосфоновых кислот.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-03-00897-а.*

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕФОРМИРОВАНИЯ И ОЦЕНКИ ДОЛГОВЕЧНОСТИ АРМИРОВАННОЙ БАЛКИ

Ахметзянов Р.И., Бухаров Б.Т., Каюмов Р.А.

*Институт строительства, КГАСУ, Казань, Россия*

*nrustem@bk.ru*

В докладе рассматривается задача об изгибе армированной балки под поперечной нагрузкой. Считается, что полная деформация состоит из упругой части и деформации ползучести. Упругая часть связана с напряжениями законом Гука. Исследуются варианты связи напряжений и деформаций ползучести в виде законов течения и упрочнения. Для оценки долговечности балки вводится параметр поврежденности Работнова, связанный с напряжениями дифференциальным соотношением. Деформация волокон по высоте балки при изгибе принимается линейной согласно гипотезе Бернулли. Для замыкания системы добавляется уравнения равновесия в виде связи в сечении напряжений с нормальной силой и изгибающим моментом. Рассматриваемая система уравнений решается методом конечных разностей по времени. По продольной координате на каждом шаге по времени получается алгебраическое уравнение относительно кривизны балки. Определяется зависимость распределения напряжений по высоте сечения балки для различных значений времени. Долговечность определяется из условия достижения параметром поврежденности значения единицы. Решение задачи проводится для различных вариантов механических характеристик. Результаты представлены в виде таблиц и графиков.

1. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1979. 744с.
2. Рахимов З.Р., Алтыкис М.Г. Долговечность строительных материалов. Казань, 2005. 114 с.
3. Каюмов Р.А. Расширенная задача идентификации механических характеристик материалов по результатам испытаний конструкций из них. *Известия РАН. Механика твердого тела*, 2004, 2, 94-103

## МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ИК-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ ЭРБИЯ В КРИСТАЛЛЕ LiYF<sub>4</sub>

Герасимов К.И.<sup>a</sup>, Миннегалиев М.М.<sup>a</sup>, Малкин Б.З.<sup>b</sup>, Байбеков Э.И.<sup>a,b</sup>, Моисеев С.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Казанский Квантовый Центр, КНИТУ-КАИ, Казань, Россия

<sup>b</sup> Институт Физики КФУ, Казань, Россия

*edbaibek@gmail.com*

В данной работе были исследованы сверхтонкая структура уровней и интенсивности квантовых переходов  $^4\text{I}_{15/2} \rightarrow ^4\text{I}_{13/2}$ ,  $^4\text{I}_{9/2}$  ионов трехвалентного эрбия в кристалле  $^{167}\text{Er}:^7\text{LiYF}_4$  в присутствии стационарного магнитного поля. Уровни энергии ионов эрбия были рассчитаны в рамках основной электронной конфигурации  $4\text{f}^{11}$  с учетом вкладов кристаллического поля, сверхтонкого взаимодействия с ядерным спином  $7/2$  изотопа  $^{167}\text{Er}$ , и зеемановского взаимодействия. В расчетах использовались параметры кристаллического поля и дипольные константы связи, определенные из предыдущих спектроскопических исследований кристалла [1]. Интенсивности магнитных и электрических дипольных переходов были рассчитаны на основе проекции дипольных операторов в базисе конфигурации  $4\text{f}^{11}$ . Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными спектрами поглощения для всех рассмотренных сверхтонких переходов, различных поляризаций излучения и в диапазоне магнитного поля 0-7000 Гц [2]. Спектры поглощения  $\pi$ - и  $\sigma$ -поляризованного лазерного излучения в инфракрасном диапазоне на переходах 0,8 и 1,5 мкм были измерены при температуре 4 К. Были рассчитаны g-факторы и выведены правила отбора для переходов между основным состоянием  $^4\text{I}_{15/2}(\Gamma_{56})$  и возбужденными состояниями  $^4\text{I}_{13/2}(\Gamma_{78})$ ,  $^4\text{I}_{13/2}(\Gamma_{56})$ ,  $^4\text{I}_{9/2}(\Gamma_{56})$ . Результаты работы могут быть использованы с целью экспериментальной реализации квантовой памяти на основе состояний редкоземельных ионов в кристалле LiYF<sub>4</sub>.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 14-12-01333, а также стипендии Президента РФ (Э.И. Байбеков).*

1. M.N. Popova et al. *Phys. Rev. B*, 2000, **61**, 7421-7427.
2. K.I. Gerasimov et al. *Phys. Rev. B*, 2016, **94**, 054429(1-8).

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ НЕГИДРОСТАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ WRF

Баканин А.С.

*ФГБУ «УГМС Республики Татарстан», Казань, Россия*

*mailaru@mail.ru*

Weather Research and Forecasting (WRF) – одна из наиболее сложной разработанной системы численного прогноза погоды и атмосферного моделирования. В настоящее время WRF позиционируется в качестве единого рабочего инструмента для совместного использования научно-исследовательскими учреждениями и метеослужбами различных стран. Математические модели атмосферы различных масштабов активно используются для прогноза осадков, как в холодное, так и в теплое полугодие [1].

В качестве эксперимента было рассмотрено 274 случаев различных схем параметризаций, с двумя доменами сетки, т.е. 548 вариантов двух областей при конкретной синоптической ситуации, углубляющегося циклона и связанной с нимвойной системы контрастных в температурном отношении волновых фронтальных разделов. Цель данных просчетов, произвести оптимальную юстировку модели WRF, схемы параметризаций идеально подходящие для региона Республики Татарстан, с различными синоптическими ситуациями. Изменения выбранных схем параметризаций руководствовалось, как правило, наиболее влияющими блоками воздействиями на результаты. В численных экспериментах выбирались различные схемы параметризаций, подбирались комбинации с наилучшим образом описывающие физические процессы в атмосфере с учетом погодных условий.

Рассчитанные характеристики точности и качества модели представляются удовлетворительными на текущем этапе исследования. Модель адекватно воспроизводит возникновение крупномасштабных зон осадков, с некоторым их количественным завышением в ряде схем параметризаций, как отдельно по срокам, там и суммарно.

1. The Weather Research & Forecasting Model. <http://www.wrf-model.org> (Дата обращения. 19.07.2016).

## ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИОЛЕФИНОВ

Балькаев Д.А.<sup>a,b</sup>, Амирова Л.Р.<sup>a</sup>, Беззаметнов О.Н.<sup>b</sup>, Скрябнев Г.В.<sup>b</sup>, Амирова Л.М.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский федеральный университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань, Россия

*dinar.balkaev@yandex.ru*

Целью данной работы явилось изучение реологических и теплофизических свойств ряда промышленных гомо- и сополимеров пропилена и этилена производства ПАО «Нижнекамскнефтехим». В данном исследовании ставились следующие задачи: определение температуры стеклования и плавления ряда полипропиленов и его сополимеров, определение степени кристалличности исследуемых объектов, исследование зависимости вязкости от скорости сдвига и напряжения сдвига.

Для широкого круга полипропиленов проводились реологические исследования на ротационном вискозиметре (Discovery Hybrid Rheometer DHR-2 (TA Instruments, Германия)) с применением комплекса программного обеспечения (Orchestrator software), позволяющего анализировать молекулярную массу и молекулярно-массовое распределение, а также на капиллярном вискозиметре Rosand RH2000 (Malvern).

В качестве объектов исследования были выбраны: гомополимеры пропилена (макки: PP1500J, PP1525J), статистический сополимер пропилена и этилена (макки PP4345S, PP4445S), блок-сополимеры пропилена и этилена (макки: PP8300N, PP9240M, PP9240K, PP8300G, PP8400G, PP9240N, PP9240P, PP8348SM).

Методом ДСК с термомодуляцией (калориметр 214 Polyma (Netzsch, Германия)) были определены теплофизические характеристики и переходы, степень кристалличности полимеров.

Для гомо- и сополимеров пропилена и этилена (с различным молекулярно-массовым распределением, с различным содержанием этиленовых групп и их распределением) в широком интервале температур были получены зависимости вязкости от скорости и напряжения сдвига. Проведен анализ данных зависимостей и выявлены закономерности влияния структуры сополимеров (содержания этиленовых групп и их распределения) и молекулярно-массового распределения.

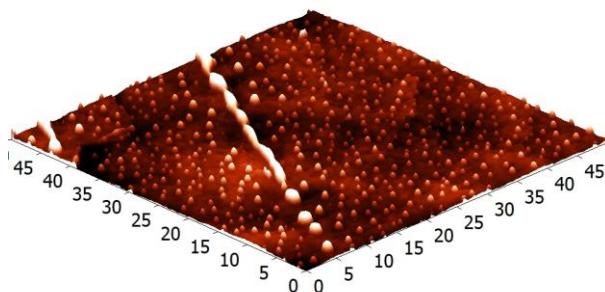
## СИНТЕЗ И МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ МОРФОЛИНПРОИЗВОДНЫХ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРПОЛИОЛОВ ВТОРОЙ И ТРЕТЬЕЙ ГЕНЕРАЦИЙ

Басалаев А.С., Гатаулина А.Р., Кутырева М.П., Улахович Н.А.

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

*ant14on@gmail.com*

Модификация гиперразветвленных полимеров морфолином позволит использовать их в медицине в качестве поликатионных носителей для лекарственных препаратов, в комплексообразовании с различными ионами металлов и в разработке перспективных материалов. На основе гиперразветвленных полиэфирполиолов (ГРПО) второй и третьей генераций H20 и H30 (ядро-этоксилированный пентаэритрит, мономер -2,2-ди(гидроксиметил)пропионовая кислота, 16 и 32 гидроксильных групп соответственно) получены полиэфирополиамины ( $L^I$ ) и ( $L^{II}$ ), содержащие фрагменты морфолина в терминальном положении. Методами ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопии и рН-метрии определено, что степень функционализации для соединений ( $L^I$ ) и ( $L^{II}$ ) составляет 75% и 78%, соответственно. Методами атомно-силовой и электронной микроскопии была исследована морфология поверхности соединений ( $L^I$ ) и ( $L^{II}$ ). Установлено, что для данных соединений характерна самоорганизация из растворов ( $\text{CHCl}_3$  и  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) с образованием нитевидных структур с везикулярными включениями.



3D изображение поверхности соединения ( $L^{II}$ ), методом ACM 50 x 50 мкм



Электронно-микроскопическое изображение нитевидных структур соединения ( $L^{II}$ )

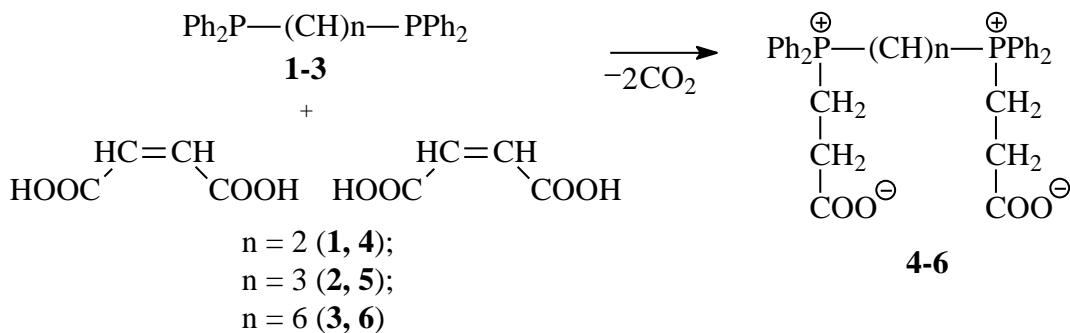
## НЕПРЕДЕЛЬНЫЕ ДИКАРБОНОВЫЕ КИСЛОТЫ В РЕАКЦИЯХ С ТЕРМИНАЛЬНО-ЗАМЕЩЕННЫМИ БИСДИФЕНИЛФОСФИНОАЛКАНАМИ

Бахтияров Д.И., Романов С.Р., Аксунова А.Ф., Бахтиярова Ю.В.

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

*Dmbakh@mail.ru*

С целью синтеза стабильных дикарбоксилатных фосфабетаинов нами была проведена серия реакций терминально-замещенных бис(дифенилфосфино)алканов с малеиновой кислотой.



Взаимодействие бисфосфинов с малеиновой кислотой в среде ацетонитрила протекает практически мгновенно с декарбоксилированием. Во всех случаях получены бесцветные кристаллические вещества не растворимые в диэтиловом эфире, хлороформе и ацетонитриле. Строение всех продуктов **4-6** подтверждено ИК, ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$  спектроскопиями. Для соединения **5** были получены данные РСА (рисунок 1). Стоит отметить, что по данным элементного анализа и РСА дикарбоксилатный фосфабетаин **5** не содержит молекул воды в своей кристаллической решетке.

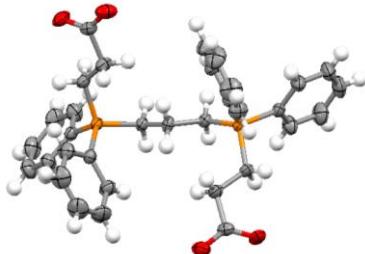


Рисунок 1. – Молекулярная структура фосфабетаина **5**.

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

## СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ ФОТОХРОМНЫХ ДИТИЕНИЛЭТЕНОВ, ИМЕЮЩИХ В СТРУКТУРЕ АЗОБЕНЗОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

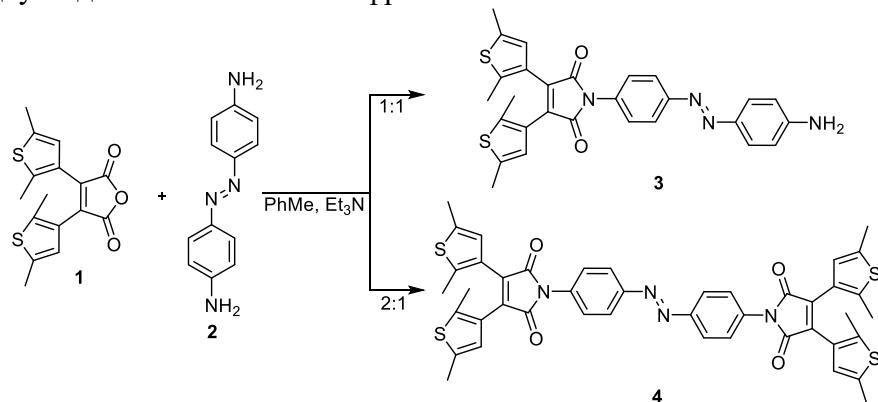
Беликов М.Ю., Ершов О.В., Липин К.В., Федосеев С.В., Иевлев М.Ю.

Химико-фармацевтический факультет  
Чувашского государственного университета им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

*belikovmil@mail.ru*

Гибридные фотохромные соединения, имеющие в структуре несколько фотопереключаемых фрагментов, в настоящее время привлекают существенный научный интерес, что связано с возможностью использования таких структур в качестве компонентов материалов для обработки информации, многоцветовых дисплеев [1].

Для синтеза новых соединений с несколькими фотохромными фрагментами нами проведено взаимодействие ангидрида **1** с 4,4'-диаминоазобензолом **2**. Обнаружено, что в зависимости от условий реакции может быть получено аминопроизводное **3**, а также соединение **4** с двумя дитиенилэтеновыми фрагментами.



Соединение **3** имеет в структуре два, а малеимид **4** три потенциально фотопереключаемых фрагмента, что делает перспективным использование данных фотохромов в качестве компонентов различных фоточувствительных материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Кабинета Министров Чувашской Республики в рамках научного проекта № 16-43-210352 р\_а.

1. A. Fihey, A. Perrier, W.R. Browne, D. Jacquemin *Chem. Soc. Rev.* 2015, **44**, 3719-3759.

## СИНТЕЗ ФОТОХРОМНЫХ ДИТИЕНИЛМАЛЕИМИДОВ, ИМЕЮЩИХ В КАЧЕСТВЕ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НИТРОКСИЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ

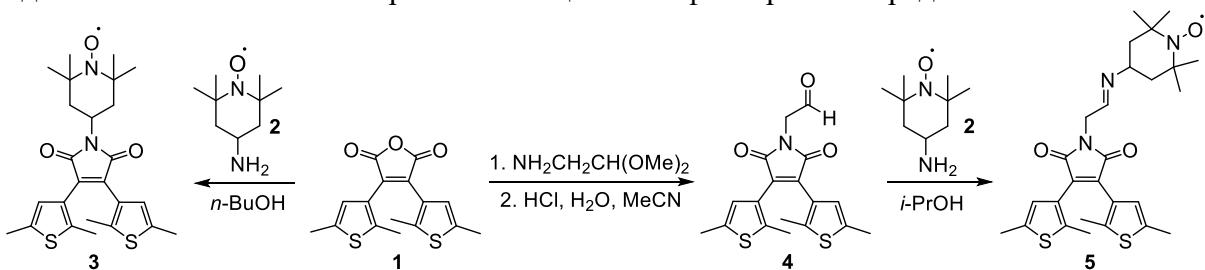
Беликов М.Ю.

Химико-фармацевтический факультет  
Чувашского государственного университета им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

*belikovmil@mail.ru*

Одним из перспективных направлений использования фотохромных дитиенилэтенов является их применение в качестве компонентов полимерных материалов, используемых в создании новых систем обработки информации [1]. Известно, что в ходе эксплуатации полимеры подвергаются старению, в том числе под действием облучения, поэтому актуальной является проблема поиска новых фоточувствительных органических соединений, имеющих в структуре помимо фотохромной составляющей еще и структурный фрагмент, повышающий устойчивость материала к фотодеградации. В качестве таких фрагментов могут выступать свободные нитроксильные радикалы.

В связи с этим было проведено исследование по разработке подходов к синтезу новых фотохромных дитиенилэтенов, имеющих в структуре нитроксильные радикалы. Так на основе соединения **1** и аминозамещенного радикала **2** был получен фотохромный нитроксил **3**. Также ангидрид **1** был переведен в альдегид **4** с последующим его взаимодействием с амином **2** и образованием целевого фотохромного радикала **5**.



Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда поддержки научно-проектной деятельности студентов, аспирантов и молодых ученых «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-33-80159 мол\_эв\_а.

1. M. Irie, T. Fukaminato, K. Matsuda, S. Kobatake. *Chem. Rev.* 2014, **114**, 12174-12277.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТВЕРДОСТИ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Беляев А.В., Галимов Э.Р.

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

*alexey-beljaev@mail.ru*

Сварка является одним из основных технологических процессов получения неразъемных соединений во многих отраслях промышленности. Основной целью является выпуск сварных конструкций, обладающих определенными служебными свойствами (прочностью, твердостью и др.).

Обзор отечественной и зарубежной литературы показал широкое применение различных подходов для прогнозирования свойств различных участков сварных соединений. Одним из них является параметризация микроструктур, которая благодаря дополнительному математическому анализу позволяет оценивать параметры однородности  $f$  и упорядоченности  $D$ , характеризующие меру нарушения самоподобия и отражающие геометрическую неоднородность составляющих изображения. Для автоматизации расчетов этих параметров структуры Г.В. Встовским [1] разработан соответствующий алгоритм и программа «MFRDrom». Исследования, проведенные в области мультифрактальной параметризации, описаны в трудах ученых Б. Мандельброта, В.С. Ивановой, А.Г. Колмакова, И.Ж. Бунина, В.В. Герова, А.С. Баланкина, А.Д. Анварова и др. Метод параметризации микроструктур требует определенной подготовки проб, проведения металлографического анализа, исследований механических свойств, анализа микроструктур, последующей статистической обработки и получения регрессионных зависимостей [2]. В отдельных случаях в дополнение к параметризации возникает необходимость в расчетно-экспериментальном определении температур в процессе сварки.

Схема прогнозирования твердости в общем виде включает обработку микроструктур с расчетом параметров однородности  $F_{200}$  и упорядоченности  $D_1-D_{200}$ , приращения температуры  $\Delta T$ , балла зерна  $z$  и др.; объект «черный ящик». Прогнозирование твердости осуществляется нормировкой функций, составлением матрицы планирования полного факторного эксперимента, оценкой однородности дисперсий функции отклика и вычислением коэффициентов полинома математической модели. В результате может быть определена твердость в зависимости от параметров структуры на участке шлифа.

Предложенный подход, основанный на фрактальном анализе микроструктур и тепловом расчете, позволяет повысить точность прогнозирования механических свойств сварных соединений на различных участках. Рассмотренный метод в целом позволяет повысить качество и обеспечить стабильность свойств неразъемных соединений, выполненных различными методами сварки.

1. Встовский Г.В. Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов. Ижевск: Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 116 с.
2. E.R. Galimov, A.G. Ablyasova, A.S. Maminov, S.V. Kuryntsev, A.V. Belyaev. Prediction of mechanical properties of welded joints. *Journal on International Scientific Publication: Materials, Methods & Technologies*, 2011, **5(3)**, 39-49.

## ТЕРМИЧЕСКАЯ ДЕГРАДАЦИЯ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ, НАПОЛНЕННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ

Бердюгина И.С., Стексова Ю.П., Шибаев А.А., Баннов А.Г.

*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

*irina\_berdugina@mail.ru*

Широко применяемые во многих областях промышленности эпоксидные композиты, в качестве электретов, клеев, связующих компонентов и защитных экранов, обладают одним существенным недостатком – термической деструкцией при повышенных температурах. Одним из способов решения данной проблемы является введение наполнителя в эпоксидную матрицу для замедления процесса термической деградации. В качестве таких наполнителей актуально использовать углеродные материалы, такие как многостенный углеродные нанотрубки (МУНТ) и терморасширенный графит, полученный из интеркалированного графита или оксида графита (ТРГ-1 и ТРГ-2, соответственно).

В данной работе была исследована зависимость термической деградации композитов от типа наполнителя, содержания наполнителя (от 0 до 2,5 масс. %), способа введения наполнителя в эпоксидную матрицу (DER-331) и типа отвердителя. В качестве отвердителя применялись аминные отвердители полиэтиленполиамин (ПЭПА) и триэтилентетрамин (ТЭТА). Термическая деградация композитов оценивалась с помощью синхронного термического анализатора Netzsch STA 449C при нагреве образца со скоростью 10 К/мин в смеси аргон-кислород в диапазоне температур 55–700 °C.

Проведенный анализ позволил сделать следующие выводы: среди трех типов различных углеродных наполнителей, МУНТ оказывает большее влияние на термическую деградацию в низкотемпературной области (до 260 °C), однако в температурном диапазоне 340–380 °C замедлению термической деградации способствует ТРГ-1. Увеличение содержания наполнителя до 2,5 масс. % увеличивает термическую стабильность в интервале температур 420–700 °C. Композиты на базе ЭС/ТРГ-1 проявляют более высокую термическую стойкость при использовании метода приготовления без использования растворителя. Среди наполненных образцов более слабой термической деградацией обладают образцы, отверженные ПЭПА, а среди ненаполненных – ТЭТА.

## ЛОГИКА АДАПТИВНОГО SMART ВЕЛОСИПЕДА

Бойко А.Д., Халяфиев А.А.

*Набережночелнинский институт КФУ, Набережные Челны, Россия*

*Boykoaleksey94@gmail.com*

На данный момент существуют различные гибридные велосипеды. Они используют простую схему управления. Максимум четыре режима: мотор выключен, мотор включен, мотор включается во время прокрутки педалей и так называемый круиз контроль (мотор помогает поддерживать определенную скорость). Для того чтобы сделать велосипед по настоящему интеллектуальным, чтобы он активно участвовал в процессе езды, необходимо расширить функционал управления доступный пользователю.

Для более точного определения режима работы смарт-велосипеда необходимо знать возраст пользователя. С использованием возраста можно определить тренировочные зоны подходящие самому пользователю. Тренировочные зоны определяют интенсивность педалирования и использование различных физиологических систем, поставляющих энергию для того или иного режима. Тренировочные зоны рассчитываются по следующей формуле (Важно! Данные полученные после расчета усреднены. Для более точной информации обратитесь к врачу):

$$208 - (0,7 \times \text{возраст}) = \text{ЧСС}$$

ЧСС – частота сердечных сокращений

Далее, необходимо свериться с таблицей частоты сердечных сокращений.

Было создано несколько программных продуктов, в том числе и система управления. Языком программирования для написания программных продуктов был выбран C+. Программы были разработаны для аппаратной части Arduino.

Для упрощения работы пользователя с умным велосипедом предлагается использовать приложение для смартфонов на платформах Android и iOS. Такая схема работы будет удобна всем пользователям смартфонов.

Для начала работы с адаптивным Smart велосипедом необходимо вставить смартфон в специальный держатель на руле, таким образом происходит синхронизация приложения с велосипедом. Пользователь вводит некоторые данные о себе, такие как: возраст, вес, рост. Так же если у человека имеются проблемы со здоровьем или он находится на стадии реабилитации после болезни или операции, он может выбрать соответствующие пункты в меню приложения.

Исходя из введенных данных, физических показателей самого пользователя во время использования умного велосипеда, искусственный интеллект будет обрабатывать их и сравнивая с базой знаний, управлять электродвигателями. Помимо этого, smart будет вести собственную статистику для конкретного пользователя, анализировать его состояние и давать необходимую нагрузку. Тем самым будет использован в роли адаптивного тренажера для людей со слабым здоровьем и людей проходящих курсы реабилитации после болезни, операции или травмы. Пользователь сможет просматривать статистику улучшения его физического состояния, а также контролировать процесс реабилитации.

## ПРИМЕНЕНИЕ РАСПЫЛИТЕЛЬНОЙ СУШКИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ КАЗЕИНА

Болдырев А.Е., Усманова Л.С., Герасимов А.В.

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

*boldyrev25@gmail.com*

Большинство новых лекарственных препаратов плохо растворимы в воде, что уменьшает их поглощение в желудочно-кишечном тракте.

В настоящее время существует несколько способов улучшения растворимости лекарственных средств, таких как увеличение площади поверхности за счет уменьшения размера частиц, улучшение смачиваемости, снижение кристалличности путем получения твердой дисперсии, использование соединений включения, таких как производные циклодекстрина, использование полиморфных форм или сольватированных соединений, а также использование солевых форм.

В качестве водорастворимой полимерной матрицы при доставке лекарственных препаратов широкое распространение получили полиэтиленгликоли и плюроники. При этом полимерные наночастицы также страдают от проблемы полидисперсности. В ходе синтеза образуются частицы с большим диапазоном размеров и нерегулярным формированием ветвей. Одной из альтернатив является использование белков, которые монодисперсы и зачастую имеют сферическую архитектуру. Проблемой остается подготовка белковых препаратов, которые циркулируют в крови достаточно долго, чтобы скапливаться в целевых областях, но которые можно удалить из организма с разумной скоростью, чтобы избежать долговременного накопления. Одним из самых удобных белков, с точки зрения практического использования в составе композиционных лекарственных препаратов, является казеин, т.к. его структура хорошо изучена и хорошо налажена крупнотоннажная технология его получения.

В настоящей работе с помощью метода распылительной сушки (Buchi Nano Spray Dryer B-90) были получены композиционные лекарственные препараты фенацетина и прогестерона с казеином. Подобраны оптимальные условия проведения сушки, определено остаточное содержание растворителя в полученных композитах.

## ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ФАЗ В СИСТЕМЕ Y – Fe – Co – O.

Брюзгина А.В., Урусова А.С., Черепанов В.А.

*ИЕН Департамент «Химический факультет» ВГАОУ ВО УрФУ имени первого  
Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

*anna.bryuzgina@mail.ru*

На протяжении последнего десятилетия сложные оксиды  $\text{YFeO}_{3\pm\delta}$ ,  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12-\delta}$  изучались, вследствие того что они обладают интересными магнитными свойствами и соответствующими структурными изменениями [1,2]. Изучение фазовых равновесий в системе Y – Fe – Co – O проводили при 1373 К на воздухе. Для этого было синтезировано 48 образцов с различным соотношением металлических компонентов, из них в указанных условиях получено 18 однофазных, не однофазных – 30. По результатам рентгенофазового анализа установлено, что в изучаемой системе образуется четыре ряда твёрдых растворов: твёрдые растворы на основе  $\text{CoO}$ , на основе  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , на основе  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  и на основе феррита иттрия ( $\text{YFeO}_{3\pm\delta}$ ). В данной работе подробно был изучен ряд на основе феррита иттрия  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$ . Дифрактограммы образцов были проиндексированы в рамках орторомбической ячейки, пространственная группа  $Pnma$ . По результатам РФА установлено, что однофазные сложные оксиды  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$  образуются в интервале составов  $0 \leq x \leq 0.45$ . Показано, что увеличение содержания кобальта в  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$  приводит к монотонному уменьшению параметров и объёма ячеек, что можно объяснить размерным эффектом. В результате проделанной работы в изучаемых условиях диаграмма состояния Y – Fe – Co – O была разбита на 8 фазовых полей.

Следующим этапом работы было изучение физико-химических свойств кобальт-замещенных ферритов иттрия. Методом ТГА для всех однофазных сложных оксидов получены зависимости кислородной нестехиометрии ( $\delta$ ) от температуры ( $T=298 - 1373$  К) на воздухе. Показано, что введение кобальта в позиции железа в  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$  ( $0 \leq x \leq 0.45$ ) приводит к уменьшению содержания кислорода в образцах. Значения коэффициентов термического расширения для  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$  ( $0 \leq x \leq 0.45$ ) варьируются от 10.56 до 14.87  $\text{KTP} \times 10^6$ ,  $\text{K}^{-1}$  при 298 - 650 К и от 11.14 до 21.80  $\text{KTP} \times 10^6$ ,  $\text{K}^{-1}$  при 650 - 1373 К. С ростом температуры общая электропроводность  $\text{YFe}_{0.65}\text{Co}_{0.35}\text{O}_{3\pm\delta}$  заметно увеличивается начиная с 800 К и достигает значения 19.28 См/см при 1373 К. Изучение химической совместимости образцов составов  $\text{YFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3\pm\delta}$  ( $0 \leq x \leq 0.45$ ) с материалом электролита  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{2-\delta}$  проводили на воздухе в течении 20 часов при 1173 - 1373 К. Установлено, что образцы указанных составов не взаимодействуют с материалом электролита во всем исследованном температурном интервале.

1. H. Aono, K. Moritani, T. Naohara, T. Maehara, H. Hirazawa, Y. Watanabe. *Mater. Letters*, 2011, **65**, 1454-1465.
2. M. Bhat, B. Kaur, R. Kumar, P.A. Joy, S.D. Kulkarni, K.K. Bamzai, P.N. Kotru, B.M. Wanklyn. *Nucl. Instr. & Meth. in Ph. Res.*, 2006, **243**, 134-142.

## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОВ В СИСТЕМЕ Y – Ba – Fe – Co – Cu – O.

Брюзгина А.В., Урусова А.С., Аксёнова Т.В., Черепанов В.А.

ИЕН Департамент «Химический факультет» ВГАОУ ВО УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*anna.bryuzgina@mail.ru*

Слоистые перовскиты  $\text{LnBaMe}_2\text{O}_{5+\delta}$  (где Ln – РЗЭ; Me – Mn, Fe, Co) в настоящее время вызывают повышенный интерес для применения в качестве катодных материалов в твёрдооксидных топливных элементах.

Целью настоящей работы явилось изучение кристаллической структуры сложных оксидов, образующихся в системе Y – Ba – Fe – Co – Cu – O при 1273 К на воздухе.

Образцы для исследования были получены по глицирин-нитратной технологии. Всего было приготовлено более 90 образцов с различным соотношением металлических компонентов, заключительный отжиг которых проводили при 1237 К.

Образцы для исследования были получены по глицирин-нитратной технологии. Для синтеза использовали оксиды  $\text{Y}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CuO}$ , карбонат бария  $\text{BaCO}_3$ , металлические кобальт и железо. Отжиг образцов проводили при температуре 1023 – 1273 К на воздухе. Аттестацию полученных оксидов осуществляли методом рентгеновской порошковой дифракции в  $\text{CuK}\alpha$ -излучении. Параметры элементарных ячеек были рассчитаны в программе «Celref 3» и уточнены методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «Fullprof 2015».

По результатам рентгенофазового анализа установлено, что однофазные сложные оксиды

$\text{YBaCo}_{2-y-z}\text{Fe}_y\text{Cu}_z\text{O}_{5+\delta}$  образуются в интервале  $0 \leq y < 0.7$ ,  $0 \leq z \leq 0.9$  и при  $y=0.7$   $0.4 \leq z \leq 0.9$  А также ряд твёрдых растворов был получен на основе  $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$ .

Дифрактограммы однофазных твёрдых растворов  $\text{YBaCo}_{2-y-z}\text{Fe}_y\text{Cu}_z\text{O}_{5+\delta}$  с  $0 \leq y \leq 0.2$ ,  $0 \leq z \leq 0.15$  хорошо описываются тетрагональной ячейкой типа  $3a_p \times 3a_p \times 2a_p$  (пр. гр.  $P4/mmm$ ), а с  $0.2 < y \leq 0.6$ ,  $0 \leq z \leq 0.15$  и с  $0 \leq y < 0.7$ ,  $0.15 < z \leq 0.9$  в тетрагональной ячейкой типа  $a_p \times a_p \times 2a_p$  (пр. гр.  $P4/mmm$ ). Сложные оксиды  $\text{YBaFe}_{2-x}\text{Cu}_x\text{O}_{5+\delta}$  в интервале  $1.0 \leq x < 1.1$  описываются тетрагональной ячейкой типа  $a_p \times a_p \times 2a_p$  (пр. гр.  $P4mm$ ). Для подтверждения структуры на образцах  $\text{YBaCo}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{5+\delta}$  ( $\text{Me}=\text{Fe}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $x=0$ ;  $0.2$ ;  $0.6$ ) была проведена электронная микроскопия.

Показано, что увеличение содержания меди в  $\text{YBaCo}_{2-y-z}\text{Fe}_y\text{Cu}_z\text{O}_{5+\delta}$  приводит к монотонному увеличению параметров и объёма ячеек, что можно объяснить размерным эффектом. Для всех однофазных образцов были рассчитаны структурные параметры.

**НОВЫЕ ЖИДКИЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ С ВЫСОКОЙ ИОННОЙ  
ПРОВОДИМОСТЬЮ**  
Васильева А.А., Селютин А.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

*vasilyeva1510@gmail.com*

С развитием современного общества увеличилась роль электроэнергии в нашей жизни, в связи с этим все большее внимание к себе привлекают энергетические накопители.

Полиоксометаллаты (ПОМ) являются многофункциональными материалами, получившими широкое применение в катализе, медицине, биологии и материаловедении[1] благодаря их уникальному сочетанию физико-химических свойств, в том числе высокой стабильности их окисленной и восстановленной форм и возможности многократного переноса электрона- эти свойства дают основания полагать, что ПОМ могут отлично подходить на роль электролитов в энергетических накопителях[2].

В работе рассмотрены неорганические ионные жидкости состава  $\text{Li}_{13}[\text{Ln}(\text{TiX}_{11}\text{O}_{39})_2]^*x\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Li}_5[\text{M}(\text{TiX}_{11}\text{O}_{39})]^*x\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Li}_6[\text{N}(\text{TiX}_{11}\text{O}_{39})]^*x\text{H}_2\text{O}$ , где X – вольфрам или молибден, Ln – лантаноид, M – 3d металл в степени окисления +3, N – 3d металл в степени окисления +2.

В рамках исследования усовершенствована методика синтеза ПОМ данного строения, изучено изменение свойств материалов при варьировании входящих в их состав элементов, выявлены наиболее стабильные образцы с наилучшими проводящими характеристиками.

Особенности структурного строения изучены с помощью рентгенофлуоресцентного, термогравиметрического анализов и метода масс-спектрометрии с электро-спрей ионизацией. Исследование электрохимических свойств синтезированных материалов проведено методами циклической вольт-амперометрии и циклической потенциометрии.

1. Dimitris E. Katsoulis A. *Chem. Rev.*, 1998, **98**(1), 359-388.
2. Wang X. *Solid State Ionics*, 2003, **156**(1-2), 71-78.

## ТЕРМИЧЕСКАЯ УТИЛИЗАЦИЯ ИЛОВЫХ ОСАДКОВ СТОЧНЫХ ВОД МЕТОДОМ БЫСТРОГО ПИРОЛИЗА.

Буренков С.В.<sup>a</sup>, Забелкин С.А.<sup>a,b</sup>, Грачёв А.Н.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия

<sup>b</sup> К(П)ФУ, Казань, Россия

Bareen93@mail.ru

В настоящее время большая часть сточных вод перерабатывается методом биологической очистки. В результате образуется большое количество иловых осадков. Утилизация иловых осадков сточных вод является очень актуальным вопросом, так как производимое в настоящее время их захоронение требует больших финансовых затрат и сопряжено с экологическими проблемами [1].

В настоящее время существует несколько технологий термической переработки, альтернативных традиционному сжиганию иловых осадков сточных вод [2-6]. Это такие технологии, как жидкофазное окисление, пиролиз и газификация. Процесс пиролиза имеет ряд преимуществ по сравнению с другими методами. При пиролизе происходит термическая стерилизация и образуются производные продукты (газ, жидкость, твёрдый углистый остаток), которые могут быть использованы как топливо или как сырьё для нефтехимического производства. Кроме того, в процессе пиролиза тяжёлые металлы (например, ртуть и кадмий) могут быть отделены вместе с углистым остатком.

Быстрый пиролиз позволяет максимизировать выход жидких продуктов при термической переработке. Образующиеся в результате быстрого пиролиза иловых осадков жидкие продукты представляют собой тёмно-коричневую жидкость, состоящую из сложной смеси окисленных углеводородов. В рамках данных исследований были проведены эксперименты по быстрому пиролизу иловых осадков, что позволило произвести оценку материального баланса процесса быстрого пиролиза. Также были проведены исследования по определению основных зависимостей процесса от режимных параметров проведения эксперимента.

Основными выводами, сделанными в рамках данного исследования, является то, что быстрый пиролиз иловых осадков позволяет переработать их в целевые продукты (газ, уголь, жидкость). Также одной из главных зависимостей является увеличение доли жидких продуктов, при увеличении скорости нагрева осадков.

1. Туровский И.С. Обработка осадков сточных вод. М: Стройиздат, 1984.
2. Ларионов Т.А. Содержание тяжёлых металлов в осадках сточных вод и зелёной массе растений. Тр. ВНИИ вет. санит., гигиены и экологии. 1996, 102, 66-70.
3. К.Л. Чертес, А.К. Стрелков, Д.Е. Быков и др. Утилизация осадков сточных вод в качестве материала для изоляции ТБО / ВСТ, 2001, **6**, 36-39.
4. Bottril P. Minimizing the sludge disposal problem. *Water and Waste treat*, 1997, **40(9)**, 26.
5. Burns H., Gremminger L. Lime and flyash stabilization of waste water treatment sludge. Pat. 5277826 (USA). Priority 01.11.1991. Published 11.01.1994.
6. Соколов Л.И., Петров А.Н. Утилизация осадка сточных вод. ВСТ, 1995, **8**, 15-17.

## РАЗРАБОТКА СПОСОБА ИЗГОТОВЛЕНИЯ НЕРАЗЪЁМНЫХ ИЗДЕЛИЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Валиев А.М.

*Набережночелнинский институт (филиал) ФГАОУ ВО КФУ, Набережные Челны, Россия*

*amvaliev@mail.ru*

В настоящее время разработка новых и перспективных технологий обработки металлов давлением без применения современных систем компьютерного моделирования, является сложной и трудоемкой задачей. Примером такой технологии может быть изготовление различных неразъемных изделий пластической деформацией, основным преимуществом применения которых является возможность сочетания в одном цельном изделии технических свойств различных марок сталей отдельных его элементов. Например, с помощью применения таких изделий можно решить задачу экономии дорогостоящих металлов при сохранении эксплуатационных свойств.

С помощью компьютерного моделирования в программном комплексе Deform-2D процесса формоизменения цилиндрических заготовок при операции открытой прошивки авторами разработан новый способ изготовления неразъемных изделий пластической деформацией на примере стержневого штампового инструмента для пробивки отверстий [1]. Разработаны математические модели и алгоритмы расчета геометрических параметров соединяемых элементов изделия по размерам готового неразъемного изделия. На основе результатов компьютерного моделирования процесса разработан способ управления сборкой неразъемного изделия с учетом поэтапной локализации деформации в соединяемых элементах изделия в реальном масштабе времени.

Применение компьютерного моделирования с помощью программы Deform-2D позволило существенно сократить время и трудоемкость исследований для разработки нового способа изготовления неразъемных изделий пластической деформацией.

1. Валиев А.М., Шибаков В.Г., Панкратов Д.Л. Методика проектирования и технология изготовления сборного стержневого штампового инструмента. СТИН, 2015, 7, 20-23.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ БАЛКИ ИЗ КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА ПРИ ПЛОСКОЙ ФОРМЕ ИЗГИБА

Каюмов Р.А., Мухамедова И.З., Валиуллина И.Р.

*Казанский государственный архитектурно-строительный университет, Казань,  
Россия*

*valiullina.iluza@yandex.ru*

Наряду с инженерными расчетами конструкции и отдельных ее элементов на прочность и жесткость, необходимо проводить анализ общей и местной устойчивости. Аварии от потери устойчивости конструкции или отдельных ее элементов наиболее опасны тем, что потеря устойчивости наступает внезапно. Наряду с металлическими конструкциями композитные конструкции, изготовленные из сравнительно тонких и длинных стержней, чаще теряют устойчивость, так как имеют меньшую жесткость. В частности, тонкостенная балочная конструкция часто подвержена аварийному состоянию от потери устойчивости плоской формы изгиба отдельных ее элементов.

В работе рассчитывается общая потеря устойчивости консольной балки при плоском изгибе, изготовленной из композитного материала с различными условиями нагружения. Устойчивость рассматриваемой балки зависит как от размеров поперечного сечения, так и ее свободной длины. Получено уравнение, описывающее возмущенную форму равновесия плоской формы изгиба консольной балки, изготовленной из композитного слоистого материала. Решено дифференциальное уравнение равновесия с использованием соответствующих граничных условий и определены расчетные формулы. Проведены численные эксперименты по выявлению закономерности изменения общей потери устойчивости при плоской форме изгиба балки, изготовленной из композитного материала, в зависимости от геометрических параметров. Численные эксперименты представлены в виде графиков и зависимостей.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-08-06018) и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект №1660 государственного задания в сфере научной деятельности по Заданию № 2014/58 за 2016.*

1. С.П. Тимошенко Устойчивость упругих систем, М.: Гостехиздат, 1955, 568 с.

**ПЕРОКСИДАЗНЫЕ БИОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОДОВ,  
МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И  
НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗЕАРАЛЕНОНА**

Варламова Р.М., Медянцева Э.П., Хайбуллина А.И.

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

*rvarlamov@mail.ru*

Среди микотоксинов в настоящее время своими канцерогенными, эстрогенными и тератогенными свойствами, а также широкой распространенностью выделяется микотоксин зеараленон. В естественных условиях зеараленон чаще всего в высоких концентрациях обнаруживается в кукурузе и других зерновых продуктах.

Предложены новые амперометрические биосенсоры для определения зеараленона на основе модифицированных МУНТ/НЧ Ag в ГРПО Boltorn H20, H30 печатных графитовых электродов и иммобилизованной пероксидазы, позволяющие в ряде случаев расширить диапазон определяемых концентраций, снизить  $c_n$ , улучшить коэффициент корреляции, получить более воспроизводимые результаты. Подобраны условия функционирования разработанных биосенсоров (рН буферного раствора, концентрация субстрата – аскорбиновой кислоты, концентрация пероксида водорода).

Изучение действия зеараленона на иммобилизованную пероксидазу хрена, входящую в состав биочувствительной части амперометрического биосенсора на основе печатных электродов, показало, что в его присутствии наблюдается уменьшение величины аналитического сигнала в области концентраций от  $1 \times 10^{-6}$  до  $1 \times 10^{-10}$  М.

Пероксидазный биосенсор, модифицированный МУНТ в хитозане позволяет расширить диапазон определяемых концентраций от  $1 \times 10^{-6}$  до  $5 \times 10^{-11}$  моль/л, снизить  $c_n$  для зеараленона до  $7 \times 10^{-12}$  моль/л, улучшить коэффициент корреляции.

Изучение действия зеараленона на модифицированный МУНТ и НЧ Ag пероксидазный сенсор показало, что зеараленон оказывает ингибирующее действие на такой сенсор в области концентраций от  $1 \times 10^{-6}$  до  $1 \times 10^{-11}$  М. Степень (процент) ингибирования при действии на фермент – субстратную систему пероксидаза–аскорбиновая кислота составляет для зеараленона от  $(88.3 \times 0.7)\%$  до  $(70.5 \times 0.6)\%$  в изученной области концентраций.

Полученные результаты позволили определить зеараленон с помощью разработанных биосенсоров в пищевых продуктах (кукурузной, ячневой крупах, кукурузных хлебцах) на уровне и ниже ПДК с  $S_r$  не более 0.057.

## РАЗРАБОТКА ЗВУКОПОГЛОЩАЮЩИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ СЭНДВИЧЕВЫХ СИСТЕМ ЭКРАНОВ СЕМЕЙСТВА АВТОМОБИЛЕЙ КАМАЗ

Вахитова С.М., Шаехова И.Ф.

*Набережночелнинский институт (филиал) ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)  
федеральный университет», Набережные Челны, Россия*

*vakhitova.svetlana@yandex.ru*

Материалы, серийно применяемые в автомобилях «КАМАЗ» в качестве шумоизоляции двигателя и КПП на сегодняшний день не могут удовлетворить всем установленным требованиям. Одни не обладают достаточной стойкости к воспламенению и достойных звукопоглощающих свойств, другие, напротив, имея хорошие звукопоглощающие и огнестойкие характеристики, являются нетехнологичными, имея рыхлую структуру. Все применяемые материалы объединяет низкий коэффициент теплопроводности, что приводит к перегреву двигателя – тепло не отводится от греющихся механизмов, что приводит к изменению режимов их работы.

Поэтому разработка композиционных материалов сэндвичевой звукопоглощающей системы, является актуальной. Матрицей звуко-вибропоглощающего слоя, благодаря ряду технологических свойств, выбран полиуретан.

Опытным путем было выявлено оптимальное соотношение компонентов смеси, которое позволило создать структуру материала, максимально обеспечивающее звукопоглощение. В отличие от волокнистых материалов, разработанные композиционные материалы обладают открытопористой структурой, благодаря чему материалы гораздо эффективнее поглощают звуковые колебания.

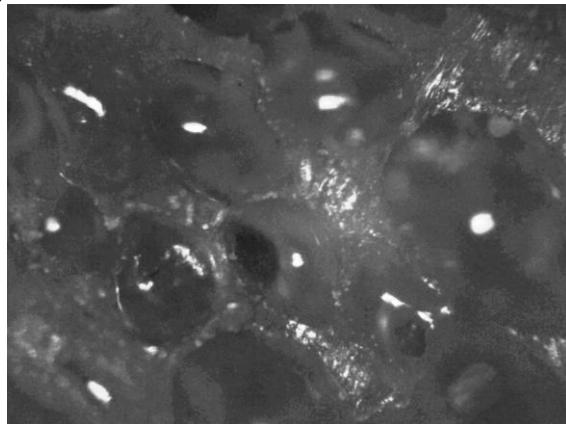


Рисунок 1. – Микроструктура полиуретанового  
отверждённого композита с соотношением матричных компонентов:  
125масс.ч. ГСС и 100 масс.ч. ПФП(х 50)

## ЭФФЕКТ УСИЛЕНИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА КРАСИТЕЛЯ МЕТИЛ ОРАНЖЕВОГО НА ИОННО-СИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАХ СЕРЕБРА В КРЕМНИИ

Воробьев В.В.<sup>a,b</sup>, Осин Ю.Н.<sup>a,b</sup>, Брандт Н.Н.<sup>c</sup>, Степанов А.Л.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН, Казань,  
Россия

<sup>c</sup> Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*slava.v679@gmail.com*

В настоящее время важнейшей задачей на практике является определения малых концентраций органических веществ. Одним из быстроразвивающихся направлений регистрации молекул является метод комбинационного рассеяния света (КР) [1]. Однако в связи с относительно малой интенсивностью спектра КР требуется дополнительное развития этого метода. Одним из способов усиления КР-сигнала является помещение анализируемых молекул вблизи поверхности наночастиц (НЧ) благородных металлов, приводящее к гигантскому КР (ГКР). Целью данной работы является наблюдение ГКР от органического соединения - красителя метилового оранжевого (МО), нанесенного на подложки пористого кремния с наночастицами серебра (Ag:PSi), изготовленных по оригинальной технологии методом высокодозовой низкоэнергетической ионной имплантации [2]. Для получения образцов имплантация проводилась при энергии ионов  $E = 30$  кэВ, дозе облучения  $D = 1.5 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> и плотности тока в ионном пучке  $J$  от 2 до 50 мкА/см<sup>2</sup>. МО был растворен в дистиллированной воде до концентрации 10<sup>-2</sup> М. В результате проведенных измерений экспериментально наблюдался эффект ГКР для молекул МО, осажденных на поверхности Ag:PSi. Установлено, что наибольшее усиление сигнала ГКР регистрируется на подложке Ag:PSi изготовленной при максимальном используемом значении  $J = 50$  мкА/см<sup>2</sup>. Показано, что для отдельных ГКР-линий в измеряемом спектре коэффициент усиления интенсивности составляет более 2.

1. Fleischmann M., Hendra P. J., McQuillan A. J., *Chem. Phys. Lett.*, 1974, **26**, 163.
2. Stepanov A.L., Nuzhdin V.I., Valeev V.F., Vorobev V.V., Kavetsky T.S., Osin Y.N., *Rev. Adv. Mat. Sci.*, 2015, **40**, 155.

## СИНТЕЗ И МЕМБРАННО-ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ АЗАПОДАНДОВ

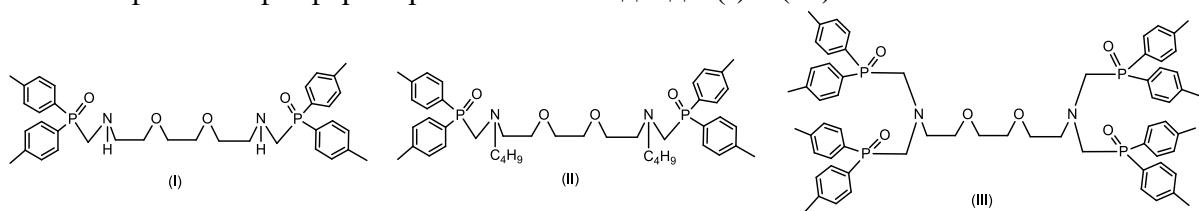
Гайнуллин А.З., Давлетшин Р. Р., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

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

*aksainaz@mail.ru*

Синтетически доступные ациклические аналоги краун-эфиров — азаподанды, являются весьма перспективными соединениями для использования в качестве компонентов экстракционных систем, пластифицированных мембран ионселективных электродов и переносчиков субстратов различной природы.

На основе трехкомпонентной реакции Кабачника - Филдса нами были получены новые липофильные фосфорилированные азаподанды (I) – (III):



В таблице представлены результаты изучения мембранных транспортных свойств соединений (I-III) по отношению к ионам щелочноземельных металлов, полученные методом пассивного транспорта.

Таблица 1. – Значения потоков ( $\Pi$ ) для ионов  $C_{M(II)}=0.2\text{ M}$ ;  $C_{(I-III)}=0.1\text{ M}$ .

№	Поток, $\Pi \cdot 10^5$ Моль/ $\text{м}^2\cdot\text{мин}$			
	Ca (II)	Mg(II)	Va (II)	Sr (II)
I	9.71	1.75	7.26	4.46
II	0.96	1.38	0.50	0.42
III	1.63	3.11	1.55	0.82

Высокие значения потоков катионов наблюдаются для фосфорилированного азаподанда (I). При введении дополнительных групп в молекулу переносчика (I), значения потоков уменьшаются, вероятно, из-за заслонения донорного атома азота. Найдено, что ионы магния транспортируются через мембрану всеми исследуемыми переносчиками наименее эффективно.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-03-00458).*

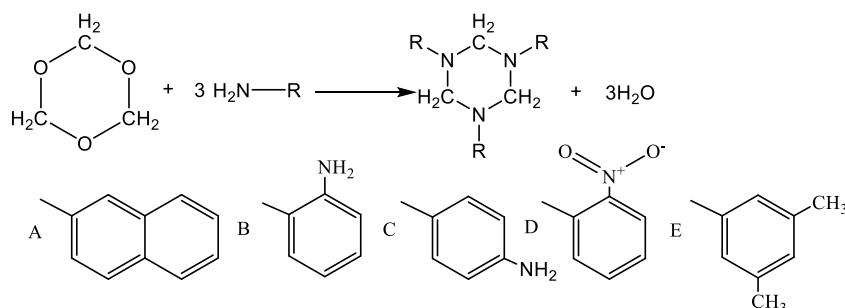
## БИ- И ТРИДЕНТАТНЫЕ АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ЛИГАНДЫ И КОМПЛЕКСЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Галимуллин Р.Н., Курамшин А.И., Колпакова Е.В., Галкин В.И.

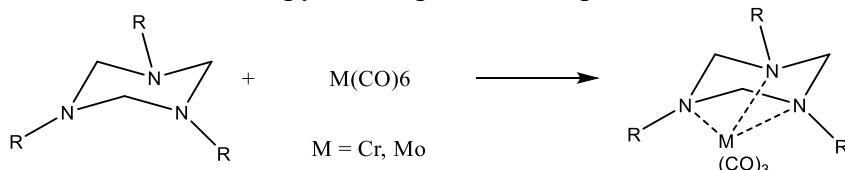
*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

*ramis-fenix@mail.ru*

Преимуществами применения азотсодержащих полидентатных лигандов в координационной химии переходных металлов, является более простые и менее опасные по сравнению с изолобальными фосфинами способы их синтеза, а также более широкие возможности для применения в синтезе координационных полимеров переходных металлов [1]. Для расширения представлений о влиянии тридентатных хелатирующих азотсодержащих лигандов на особенности координации и внутрикоординационного фосфорилирования 1-гетеро-1,3-диеновых молекулами был синтезирован ряд новых неописанных ранее триазинановых лигандов, строение и состав которого подтверждены с помощью физических методов исследования.



Полученные лиганды вовлечены в реакции с гексакарбонилхромом(0) и гексакарбонилмолибденом(0), продуктами реакции могут являться как моно-, так и полинуклеарные комплексы металлов 6 группы, строение которых зависит от типа лиганда.



1. A.I. Kuramshin, E.V. Kolpakova, V.I. Galkin Inner-sphere Hydrophosphorylation of 1-aza-1,3-dienes. Book of Abstracts of 21st International Conference on Phosphorus Chemistry, Kazan, 5-10 June, 2016, P.278.

# ЭКСТРАКЦИЯ ИОНОВ ЛИТИЯ, НАТРИЯ И КАЛИЯ О-2-ЭТИЛГЕКСИЛ-(N,N-ДИ-2-ЭТИЛГЕКСИЛ)МЕТИЛЕНАМИНОФОСФОНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Гарипова А.Р., Уразгалиева А.А., Гарифзянов А.Р.

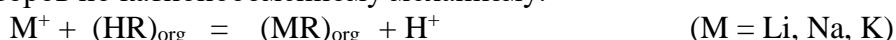
*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

*alsu-ismagilova@yandex.ru*

Экстракция является одним из наиболее широко используемых методов разделения и концентрирования в аналитической химии. Несомненным преимуществом экстракции является хорошая сочетаемость с различными физико-химическими методами определения.

Синтезированная в нашей лаборатории О-2-этилгексил-(N,N-ди-2-этилгексил)метиленаминофосфоновая кислота (HR) является хорошим лигандом для связывания ионов с малым атомным радиусом, содержит три разветвленные липофильные алкильные группы, благодаря чему хорошо растворяется в неполярных органических растворителях, таких как керосин, при этом обладает слабыми поверхностно-активными свойствами в двухфазных системах вода – органический растворитель.

Установлено, что раствор реагента в керосине экстрагирует ионы  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ , из щелочных растворов по катионаобменному механизму:



Степень извлечения возрастает с увеличением pH водной фазы (рисунок 1).

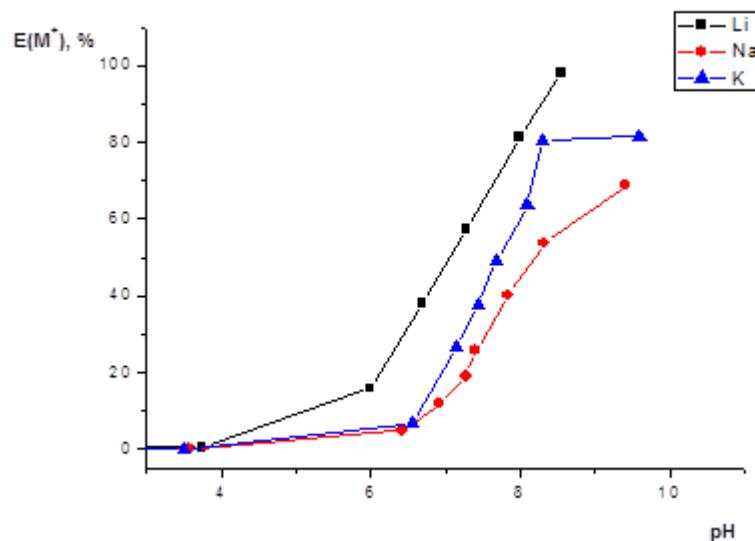


Рисунок 1. – Зависимость степени извлечения ионов металлов от pH водного раствора.

При этом литий экстрагируется лучше чем натрий и калий.

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ХИРАЛЬНОСТЬ В ПЕПТИДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Гарифуллин Р.И.<sup>a,b</sup>, Guler M.O.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань, Россия

<sup>b</sup> Institute of Materials Science and Nanotechnology, Bilkent University, Ankara, Turkey

*chemist84@gmail.com*

Супрамолекулярная хиральность коренится в асимметричном расположении структурных элементов в пространстве, например молекул или единиц с более высокой иерархией. Самособирающиеся системы, приводящие к такому роду хиральности, ввиду схожести с естественными биологическими системами имеют большое значение и потенциально могут привести к появлению новых функциональных материалов. В процессе самосборки, как хиральные так и ахиральные структурные единицы могут объединяться в хиральные наноструктуры. Хиральное расположение молекул хромофора в пространстве ведёт к возникновению хироптических свойств. Организация пигмент-белковых комплексов в макродоменах зеленых растений порождает супрамолекулярную биохиральность, исходящую из протяжённой хиральной упорядоченности комплексов. Благодаря этой упорядоченности, макродомены начинают интенсивно поглощать свет с круговой поляризацией и, таким образом, проявляют сильный сигнал кругового диахроизма (КД). В нашей работе [1] самосборка пептидных амфифилов (ПА) и их взаимодействия с молекулами пирена были направлены на имитацию супрамолекулярной биохиральности. Разработанные ПА самособираются в нановолокна с хиральной внутренностью, что позволяет достичь протяжённой хиральной упорядоченности. Ковалентный и нековалентный режимы взаимодействия были использованы для индуцирования супрамолекулярной хиральности. Ковалентный режим включал в себя ковалентное присоединение пирена к пептидной последовательности. После самосборки ПА в нановолокна наблюдался интенсивный КД. Режим же нековалентного взаимодействия предусматривал инкапсуляцию молекул пирена в гидрофобной сердцевине нановолокон второго ПА. Сосборка молекул ПА и пирена привела к возникновению хиральной упорядоченности и интенсивного КД-сигнала. Более того, в обоих режимах было возможно контролировать знак КД-сигналов с помощью пептидных изомеров, L или D.

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ МАКРОИНИЦИATOROV И 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА.

Мазильников А.И.<sup>a</sup>, Гатауллин И.<sup>b</sup>, Камалиев И.<sup>b</sup>, Давлетбаева И.М.<sup>a,b</sup>

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

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

*mazillove001@gmail.com*

С использованием ИК-спектроскопии, ТГА, ТМА, ДМА, измерений температурных зависимостей тангенса угла диэлектрических и механических потерь, краевого угла смачивания и водопоглощения исследованы серии полимерных материалов, полученных путем полиприсоединения 2,4-толуилендизоцианата (ТДИ) к макроинициатору анионной природы (ППЭГ), представляющим собой блок-сополимеры оксида пропилена и оксида этилена, с разным содержанием оксида этилена, часть гидроксильных групп которого замещена на калий-алкоголятные.

Установлено влияние относительного содержания периферийных блоков оксида этилена (ПОЭ) в составе ППЭГ на особенности полиприсоединения ТДИ и формирование надмолекулярной структуры полимеров. Построена предположительная схема формирования надмолекулярной структуры полимеров в зависимости от содержания ПОЭ % мас.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ГОРЯЧЕЙ ПРОВОЛОКИ

Вартанян М.А., Герасимов Р.И.

*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

*mariavartanyan@mail.ru*

Метод горячей проволоки является одним из нестационарных методов определения теплопроводности и в последние годы получил широкое распространение [1]. В РХТУ им. Д.И. Менделеева разработан испытательный стенд, реализующий один из вариантов данного метода – метод крестовины с возможностью проведения испытаний до 1200 °C. В настоящей работе с его помощью определяли эффективную теплопроводность теплоизоляционных материалов двух различных видов: волокнистых, на основе муллитокремнеземистого волокна, и неформованой теплоизоляции (керамзитобетонов) плотностью 96-300 и 600-1000 кг/м<sup>3</sup> соответственно. Подготовку образцов и проведение испытаний осуществляли, как описано в работе [2]; испытания проводили в интервале 300-1200 °C. Полученные результаты приведены в таблице.

Температура испытания, °C	Эффективная теплопроводность, Вт/(м·К), образцов плотностью, кг/м <sup>3</sup>		
	<i>Волокнистая теплоизоляция</i>		
	96	128	300
600	0,11	0,11	0,10
800	0,11	0,12	0,11
1000	0,19	0,12	0,12
1200	0,25	0,14	0,11
<i>Керамзитобетон</i>			
	580	830	1010
300	0,08	0,19	0,14
600	0,10	0,11	0,15
900	0,08	0,13	0,16

Установлено, что значения и характер зависимости эффективной теплопроводности от температуры и плотности исследуемых материалов хорошо согласуются с имеющимися данными, определенными в стационарном режиме [1]. Различие этих показателей не превышает 15 %, что делает метод горячей проволоки перспективным для определения теплопроводности теплоизоляционных материалов при высоких (до 1200 °C) температурах.

*Авторы выражают благодарность ООО «ПКФ «Цемогнеупор» (Подольск, Московская обл.) и ООО «Теплопромпроект» (Москва) за предоставленные образцы.*

1. J.H. Lienhard IV. Phlogiston Press, 2012, 766 p.

2. Б.С. Скидан, С.А. Борисов. *Оgneупоры и техническая керамика*, 1999, 4, 38-41.

## ЭВОЛЮЦИЯ КОСТНОЙ ТКАНИ В ПОЛУПЛОСКОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ

Герасимов О.В.

*Институт математики и механики им. Лобачевского, КФУ, Казань, Россия*

*olegbishkeck@gmail.com*

В настоящее время в биомеханике костной ткани актуальной задачей является описание пористых структур. Нашло распространение описание таких структур с помощью тензора структуры. Известно, что трабекулярная костная ткань является неоднородной пористой анизотропной структурой, механические свойства трабекулярной костной ткани в значительной мере определяются её внутренней структурой[1,2]. Многие задачи опорно-двигательного аппарата[3] требуют описания напряженно-деформированного состояния костной ткани с учетом формирования её структуры со временем при изменении внешних нагрузок.

Была рассмотрена задача о нагружении полуплоскости распределенным давлением. Начальное состояние ткани предполагалось равномерно заполненное круглыми порами. Для тензора структуры были определены собственные вектора. Геометрический смысл этих векторов – направление полурадиусов эллиптической формы поры на полуплоскости. Было проведено численное моделирование процесса адаптации костной структуры. В результате численного моделирования было выявлены закономерности изменения эллиптичности пор, их ориентации в плоскости и изменение пористости.

1. Р.Х. Закиров, Р.А. Зарипов, Ю.Г. Коноплев, В.И. Митряйкин, О.А. Саченков. Диагностика асептического некроза головки бедренной кости с использованием спиральной компьютерной и магнитно-резонансной томографии и применение математического моделирования при планировании операции по эндопротезированию тазобедренного сустава. *Практическая медицина*, 2012, **8-2(64)**, 63-68.
2. Ю.Г. Коноплев, А.В. Мазуренко, В.И. Митряйкин, О.А. Саченков, Р.М. Тихилов. Экспериментальное исследование влияния степени недопокрытия вертлужного компонента на несущую способность эндопротеза. *Российский журнал биомеханики*, 2014, **18**, 333-344.
3. Ю.Г. Коноплев, А.В. Мазуренко, О.А. Саченков, Р.М. Тихилов. Численное исследование влияния степени недопокрытия вертлужного компонента на несущую способность эндопротеза тазобедренного сустава. *Российский журнал биомеханики*, 2015, **19**, 330-343.

## ОЦЕНКА НАПРЯЖЕНИЙ ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ НЕОДНОРОДНОЙ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Герасимов О.В.

*Институт математики и механики им. Лобачевского, КФУ, Казань, Россия*

*olegbishkeck@gmail.com*

При решении задач по определению напряженно-деформируемого состояния (НДС) пористых структур необходимо учитывать структурные особенности материала[1,2]. В настоящее время в практике задач биомеханики костной ткани нашло развитие описание структуры с помощью тензора структуры. В этом случае предполагается, что тензор структуры суть квадратичная форма, описывающая форму поры. Построены физические соотношения, связывающие тензор напряжений и деформаций через упругие константы, тензор структуры и долю твердого объема материала. Применительно к биомеханике костной ткани актуальной задачей является анализ НДС дистального участка костей нижнего пояса конечностей. В настоящей работе дистальный участок смоделирован стержнем, нагруженным сжимающей силой и описываемым упомянутыми выше соотношениями. Актуальной задачей является оценка НДС в зависимости от характера пористой структуры и связь этой структуры с легко измеряемыми механическими макропараметрами. Целью исследования является оценка деформаций при различных параметрах системы. Были проведены расчеты для единичной нагрузки и построены диаграммы для компонент тензора деформаций в осях  $\lambda$ - $\alpha$ . Для оценки макропараметров[3] была построена зависимость коэффициента Пуассона материала в осях  $\lambda$ - $\alpha$ .

1. Р.Х. Закиров, Р.А. Зарипов, Ю.Г. Коноплев, В.И. Митрякин, О.А. Саченков. Диагностика асептического некроза головки бедренной кости с использованием спиральной компьютерной и магнитно-резонансной томографии и применение математического моделирования при планировании операции по эндопротезированию тазобедренного сустава. *Практическая медицина*, 2012, **8-2(64)**, 63-68.
2. Ю.Г. Коноплев, А.В. Мазуренко, В.И. Митрякин, О.А. Саченков, Р.М. Тихилов. Экспериментальное исследование влияния степени недопокрытия вертлужного компонента на несущую способность эндопротеза. *Российский журнал биомеханики*, 2014, **18**, 333-344.
3. Ю.Г. Коноплев, А.В. Мазуренко, О.А. Саченков, Р.М. Тихилов. Численное исследование влияния степени недопокрытия вертлужного компонента на несущую способность эндопротеза тазобедренного сустава. *Российский журнал биомеханики*, 2015, **19**, 330-343.

## СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ САМОСБОРКА АМФИФИЛЬНЫХ АНИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНА

Гильманова Л.Х., Якимова Л.С., Стойков И.И.

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

*lesyaucheba@gmail.com*

Исследование процессов молекулярной самосборки занимает важное место в области супрамолекулярной химии. В природе самосборка и самоорганизация являются ключевыми процессами в формировании клеточных мембран, вторичной структуры белков, ДНК и вирусов. Для создания супрамолекулярных систем органические соединения (рецепторы) должны быть комплементарны структуре «гостя». Одним из наиболее результативных подходов к синтезу рецепторных структур, способных к супрамолекулярной самосборке, является целенаправленная функционализация макроциклической платформы. В качестве компонентов самособирающихся систем можно использовать синтетические макроциклические платформы – (тиа)каликс[4]арены, предоставляющие уникальную возможность дизайна синтетических рецепторов.

С целью получения новых амфи菲尔ных производных (тиа)каликс[4]арена, функционализированных по нижнему ободу сульфокислотными группами, был проведен ряд синтезов с различными сульфонатами. Структура полученных макроциклов была исследована рядом физических и физико-химических методов, а именно ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии.

Для исследования способности синтезированных соединений к самоорганизации в воде был применен метод динамического рассеяния света. Структура и морфология образующихся ассоциатов хорошо видна из результатов просвечивающей микроскопии (TEM): образуются ветвящиеся дендримероподобные структуры на основе супрамолекулярного ПАВ и катионов серебра.

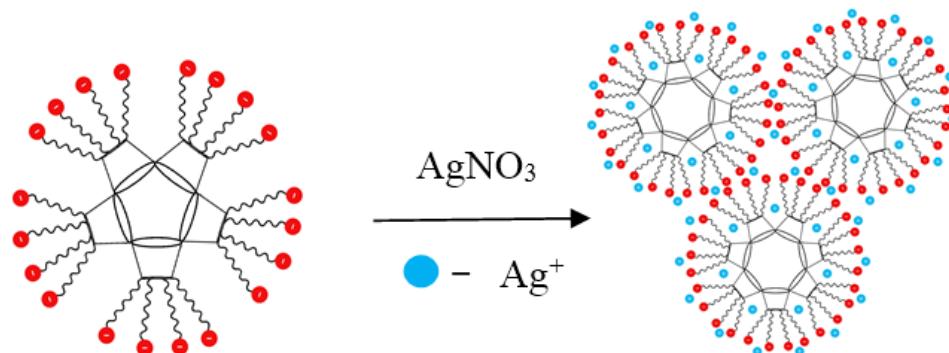


Рисунок 1. – Самосборка водного раствора п-трет-бутилтиакаликс[4]арена в присутствии  $\text{Ag}^+$ .

## ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ КАДМИЯ И ГЛЮКОЗЫ НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ПОЧВЫ

Гильмуллина А.Р., Селивановская С.Ю.

*Институт экологии и природопользования КФУ, Казань, Россия*

*gilmullinaar@mail.ru*

Почва является компонентом биосфера, выполняющим важнейшие функции, в том числе поддержание продуктивности. Быстрая индустриализация общества приводит к поступлению в почву значительных количеств загрязняющих веществ, в частности, металлов [1]. Биологическая активность почв является самым чувствительным параметром при загрязнении почвы тяжелыми металлами [2].

Целью данной работы являлась оценка воздействия кадмия на ростовые характеристики и изменение физиологического профиля микробного сообщества серой лесной почвы. Для моделирования процессов изменения в почве содержания питательных веществ и содержания токсикантов почву разделили на 4 части. В первую часть (SG) внесли глюкозу в концентрации 10 г/кг, во вторую (SCd) был добавлен кадмий в количестве 500 мг/кг, в третью (SGCd) оба соединения в идентичных концентрациях, четвертый образец (S) представлял собой почву без внесения дополнительных соединений.

Результаты настоящей работы показали, что внесение кадмия и глюкозы имело оказывало разнонаправленные эффекты. Оценка ростовых характеристики показала, что добавление глюкозы (SG) в почву уменьшило продолжительность фазы задержки роста, а внесение в почву кадмия (образец SCd) приводило к удлинению фазы задержки роста микробного сообщества. Анализ микробного сообщества почвы, в которую были одновременно внесены глюкоза и кадмий, показал, что длительность фазы задержки роста оказалась ниже, чем для почвы SG, но выше, чем для почвы SCd. При анализе сообществ методом BIOLOG® EcoPlates™ было выявлено, что по сравнению с сообществом, выделенным из почвы с глюкозой, сообщество почвы с кадмием характеризуется более низкими индексами AWCD, R и H, различия в которых увеличивались со временем инкубирования.

1. Vig K, Megharaj M, Sethunathan N, Naidu R. Bioavailability and toxicity of cadmium to microorganisms and their activities in soil: a review. *Adv. Environ. Res.*, 2003, **8(1)**, 121-135.
2. Wang F, Yao J, Si Y, Chen H, Russel M, Chen K, et al. Short-time effect of heavy metals upon microbial community activity. *J. Hazard. Mater.*, 2010, **173(1-3)**, 510-516.

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ НАТРИЕВЫХ КОБАЛЬТАТОВ $\text{Na}_x\text{CoO}_2$

Гильмутдинов И.Ф., Мухамедшин И.Р.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*Ildar.Gilmutdinov@gmail.com*

Соединения натриевых кобальтатов  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  обладают целым рядом интересных физических свойств. Для фаз с различным содержанием натрия характерны такие эффекты как сверхпроводимость, магнитное упорядочение, переход металл-диэлектрик. Благодаря высокому коэффициенту термо-ЭДС, натриевые кобальтаты перспективны для создания топливных элементов. Объяснение уникальных свойств невозможно без учета эффектов связанных с сильными электронными корреляциями. При этом результаты теоретических и экспериментальных методов исследования зачастую не согласуются. Одной из возможных причин может быть низкое качество и нестехиометрия исследованных образцов.

Нами освоен рост кристаллов натриевых кобальтатов  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  с содержанием натрия  $x=0.8$  методом зонной плавки с оптическим нагревом. Разработанный нами цифровой потенциостат позволяет контролировать изменять содержание натрия в выращенных кристаллах электрохимическим способом в широком диапазоне [1]. Для контроля содержания натрия используется метод рентгеновской дифракции. В результате мы научились получать высококачественные монофазные кристаллы, которые можно использовать для исследования физических свойств натриевых кобальтатов различными методами [2]. В докладе будут представлены результаты исследования магнитных и электротранспортных свойств  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  в температурном диапазоне от 50 мК до 300 К.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.*

1. I. R. Mukhamedshin, I. F. Gilmutdinov, M. A. Salosin, H. Alloul. *Письма в ЖЭТФ*, 2014, **99**, 542-546.
2. I. R. Mukhamedshin, A. V. Dooglav, S. A. Krivenko, H. Alloul. *Phys. Rev. B*, **90**, 115151.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ФЛУКТУАЦИЙ НА СОСТОЯНИЕ $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_8$ В БЛИЗИ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Гимазов И.И.<sup>a,b</sup>, Сахин В.О.<sup>b</sup>, Таланов Ю.И.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Казанский Федеральный университет, Казань, Россия

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

*ubvfp94@mail.ru*

Псевдощелевое состояние высокотемпературных сверхпроводниковых материалов активно изучается в настоящее время во многих лабораториях мира. Актуальность проблемы обусловлена тем, что без понимания природы псевдощели невозможно установить механизмы высокотемпературных сверхпроводниковых и продолжить улучшение критических параметров этих материалов. Особое внимание уделяется области фазовой диаграммы, граничащей со сверхпроводящей областью, где влияние флюктуаций сверхпроводящего параметра порядка оказывает большое влияние на все электронные и магнитные свойства. Обнаруженные ранее свойства флюктуаций сверхпроводящего параметра порядка выявили необходимость более глубокого их изучения разными экспериментальными методами.

В нашей работе мы используем несколько экспериментальных методов (измерение восприимчивости, микроволнового поглощения и сопротивления), сравнительный анализ позволяет делать выводы о таких свойствах флюктуаций сверхпроводящего параметра порядка, как пространственные размеры, время жизни, характер (случайный, упорядоченный, вихревой).

Объектами исследования служили монокристаллы  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  примесью ионов иттрия. Допирование иттрием позволяет менять концентрацию носителей тока (дырок). Это позволяет исследовать влияние плотности свободных зарядов на флюктуационные свойства.

Были получены температурные зависимости сопротивления магнитной восприимчивости (на постоянном токе, на частотах  $\sim 10^3$  и  $\sim 10^7$  Гц) и микроволнового поглощения на частоте  $\sim 10^{10}$  Гц. Обнаружено различие в температурах сверхпроводящего перехода, полученных разными методами. Это объясняется различием в механизмах формирования электронных и магнитных параметров кристаллов высокотемпературных сверхпроводниковых. Кроме того наблюдается поглощение вблизи критической температуры. Наличие и форма пика обусловлена флюктуаций сверхпроводящего параметра порядка. Это позволяет изучать и анализировать свойства флюктуаций, используя микроволновое поглощение.

# ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛА LiCaAlF<sub>6</sub>+ 1.5% Cr<sup>3+</sup> МЕТОДОМ ЯМР

Гладнев К.С., Егоров А.В.

*Институт Физики КФУ, Казань, Россия*

*kik2222@yandex.ru*

Активным элементом твердотельных лазеров является кристалл, активированный парамагнитной примесью. Процентное содержание парамагнитной примеси можно узнать, измерив, время спин решеточной релаксации. Существующие теоретические представления предполагают линейную зависимость скорости релаксации от концентрации парамагнитной примеси. Таким образом зная время  $T_1$  мы можем установить процентное содержание парамагнитной примеси.

Исследованный кристалл LiCaAlF<sub>6</sub> имеет структуру колквирита, параллелепипед с размерами 2.8x2.5x1.5 mm<sup>3</sup> и содержит 1.5% Cr<sup>3+</sup>. Это тригональный кристаллы с пространственной группой симметрии Р31c. Ион хрома Cr<sup>3+</sup> занимает позицию алюминия. Постоянные решетки составляют  $a = 4.996 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.636 \text{ \AA}$ . [1]

Наблюдались сигналы ЯМР от всех изотопов (кроме <sup>6</sup>Li т.к он обладает низкой естественной распространенностью и малым гиromагнитным отношением), при двух основных ориентациях магнитного поля  $H \parallel C$  и  $H \perp C$ . Экспериментальная оценка ширины линий в зависимости от ориентации во внешнем постоянном магнитном поле представлена в таблице 1.

Таблица 1.

Изотоп	Спин	Гиromагн. отношение, кГц/Э	Частота ЯМР, МГц	Ширина при $H \parallel C, \mathcal{E}$	Ширина при $H \perp C, \mathcal{E}$
<sup>7</sup> Li	3/2	1.65483	8, 25	5	4,2
<sup>19</sup> F	1/2	4.00776	12	4,05	4,61
<sup>27</sup> Al	5/2	1.11031	8,25	8,75	6,36

Уширение линий ЯМР всех сигналов полностью обусловлено диполь-дипольным магнитным взаимодействием с ядрами фтора, поскольку совпадают с теоретическими оценками. Квадрупольное расщепление отсутствует или не превышает величины дипольного уширения, обусловленного взаимодействием с ядрами фтора. Анизотропное уширение линий обусловлено анизотропией диполь-дипольного взаимодействия.

Установленно, что релаксация ядер фтора сильно зависит от частоты и обусловлена взаимодействием с парамагнитными ионами Cr<sup>3+</sup>.

Таблица 2. Зависимость времени релаксации от ориентации и частоты.

Частота, МГц	Время релаксации T <sub>1</sub> (мс) в ориентации H  c.	Время релаксации T <sub>1</sub> (мс) в ориентации H $\perp$ c.
12.0	0.53 $\pm$ 0.02	0.48 $\pm$ 0.04
23.0	1.38 $\pm$ 0.05	1.54 $\pm$ 0.04
28.0	1.82 $\pm$ 0.07	1.43 $\pm$ 0.06

Относительная погрешность измерения скорости релаксации ядер <sup>19</sup>F на частоте 23МГц в кристалле объемом 10,125 mm<sup>3</sup> может достигать 3,5%.

1. *Journal of Solid State Chemistry*, 2004, **177**, 3505-3513.

## АНАЛИЗ ПРОЦЕССА КОМПОСТИРОВАНИЯ ОТХОДОВ СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА

Глазунова Д.М., Курынцева П.А., Галицкая П.Ю.

*ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Институт экологии и природопользования, Казань, Россия*

*polinazwerewa@yandex.ru*

Рост населения планеты и деградацией почв приводит к необходимости увеличения урожайности, при этом важным направлением являются «зеленые» технологии. Пример таких технологий - использование супрессивных компостов, способных подавлять заболевания растений, увеличивать почвенное плодородие и улучшать структуру почв.

Цель данной работы – оценка возможности получения супрессивных компостов из отходов сельского хозяйства.

В качестве основного отхода смеси был использован навоз крупного рогатого скота (КРС), свежий свиной навоз (ССН) и куриный помет (КП), в качестве структурирующего агента использовали отходы зерна (З). Далее были составлены 6 смесей органических сельскохозяйственных отходов: З+КРС, З+КРС+КП, З+КРС+КП, З+КРС+ССН, З+ССН, З+КП+ССН, З+КП. Соотношение отходов в смеси определялось оптимальной влажностью компостной смеси (40-50%) и оптимальным соотношением C:N (20-30). В качестве характеристик процесса компостирования оценивали: изменение температуры, респираторной активности, содержания растворимого углерода, удобрительные свойства компостов, супрессивные свойства компостной смеси.

В процессе компостирование установлены схожие тенденции снижения температуры (с 60-55°C до 35-27°C), респираторной активности (с 250-130 мгCO<sub>2</sub>-C/кг\*сут до 100-50 мгCO<sub>2</sub>-C/кг\*сут), содержания растворимого углерода (с 63-13 мг/кг 15-3мг/кг) для всех компостных образцов. Индекс прорастания (оценка удобрительных свойств компостов) увеличивался с 0-60% до 95-180% во всех вариантах. Уровни параметров позволяют отнести полученные компосты к зрелым и стабильным. Супрессивность полученных компостов увеличивалась (с 0-30% до 45-83%) по мере созревания и стабилизации компостов и различалась для всех вариантов, что вероятно, связано с различиями в структуре их микробных сообществ. Причины различий в супрессивности требуют дополнительных исследований.

*Данная работа выполнена при поддержке ФЦП (проект № RFMEFI57814X0089).*

## РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ, НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМ С РЕАКЦИЕЙ СИНТЕЗА СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ

Голикова А.Д., Трофимова М.А., Тойкка А.М.

*Институт Химии, СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*al.golikova@gmail.com*

Знания о тепловых эффектах химических реакций необходимы для многих технических расчетов. Например, для космического моделирования запуска ракеты. Не возможно отправить ракету в космос, без предварительных термодинамических расчетов. А тепловой эффект - это и есть та самая энергия, которая должна вывести ракету на орбиту. В химической промышленности тепловые эффекты нужны для расчета количества теплоты необходимой для нагревания реактора. В энергетике с помощью теплот сгорания топлива рассчитывают выработку тепловой энергии. Только из вышеперечисленного видно, качественный и точный метод определения тепловых эффектов представляет собой важную задачу.

Критические явления являются основой многих технологических процессов, таких как экстракция в пищевой, косметической и парфюмерной промышленности. В фармацевтике и медицине критические флюиды используют для анализа содержания лекарственных препаратов и для полученияnano- и микрочастиц как носителей лекарственных форм. Таким образом, на сегодняшний день исследование подобных состояний является актуальным и имеет прикладную направленность.

Все исследование проводились на примере системы уксусная кислота – этиловый спирт – этилацетат – вода. Была разработана методика определения термических эффектов калориметрическим методом анализа, также были получены данные о химическом равновесии, найдены составы, отвечающие критическим состоянием и обладающие критической опалесценцией. Построены поверхности фазового и химического равновесия для нескольких температур, а также температурная зависимость критических кривых для системы с реакцией синтеза этилацетата. По некоторым результатам работы написана статья [1].

*Работа проводилась при поддержке РФФИ, проект 16-33-00129.*

1. Toikka M., Samarov A., Trofimova M., Golikova A., Tsvetov N., Toikka A. Solubility, liquid-liquid equilibrium and critical states for the quaternary system acetic acid-ethanol-ethyl acetate-water at 303.15K and 313.15K. *Fluid Phase Equilibria*, 2014, **373** 72-79.

## ПРИМЕНЕНИЕ ИНСТРУМЕНТОВ ЧЕРВЯЧНОГО ТИПА СО СПЛОШНЫМИ ВИНТОВЫМИ РЕЖУЩИМИ КРОМКАМИ ДЛЯ ЧИСТОВОЙ ОБРАБОТКИ ЗУБЧАТЫХ КОЛЕС

Головко А.Н.

*Набережночелнинский институт (филиал) ФГАОУ ВО КФУ, Набережные Челны, Россия*

*go.al.ni@yandex.ru*

Традиционная технология обработки зубчатых колес, применяемая в машиностроении, предусматривает использование зубофрезерования, зубошевингования, термической обработки и зубохонингования.

Для чистовой обработки зубчатых колес (после операции зубофрезерования) весьма перспективными являются инструменты червячного типа со сплошными винтовыми режущими кромками [1]. Эти инструменты имеют ряд преимуществ по сравнению с традиционными шеверами в отношении условий работы режущего клина и трудоемкости переточки.

Практически получены: конструкция инструмента червячного типа, модели инструмента червячного типа и зубчатого колеса в системе NX CAD, визуализация обработки инструментом червячного типа зубчатого колеса в системе NX CAM и, собственно, инструмент червячного типа.

Результаты производственных испытаний: использование программы для расчета конструктивных параметров инструмента червячного типа и параметров его установки относительно заготовки обрабатываемого зубчатого колеса позволило получить погрешность профиля зубьев не более 0,025 мм; шероховатость обработанной поверхности зубьев составила  $\sqrt{Ra} 0,20$ .

1. А.с. 1378187 СССР, МКИ В 23 F 19/00. Способ чистовой обработки эвольвентных профилей зубьев зубчатых колес / А.А. Михайлов, В.А. Комаров, В.И. Винокуров (СССР). – №4034071/08 ; заявл. 05.03.86 ; опубл. 07.03.93, Бюл. № 9. – 3 с. : ил.

## СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И СЕРЫ – СИНТЕЗ НОВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКИХ КОНДЕНСАТОРОВ

Горбачук В.В.<sup>a</sup>, Хадиева А.И.<sup>b</sup>, Горбатова П.А.<sup>b</sup>, Стойков И.И.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

*vladimirgorbachuk@gmail.com*

Сохранение электрической энергии в органических материалах является одной из важных задач для современной электроники. Для решения этой проблемы предложен целый ряд подходов для изготовления суперконденсаторов, одним из которых является применение пористых материалов с полупроводниковыми свойствами. Основные успехи в данном направлении достигнуты применением композитных материалов на основе сопряжённых полимеров, графена, углеродных нанотрубок, а также для ряда неорганических оксидов.

Сераорганические материалы привлекают повышенное внимание, прежде всего, в силу возможности повышения химической стабильности для литий-ионных аккумуляторов путём ковалентной сшивки с органическими молекулами. Одним из наиболее удобных «сшивающих реагентов» для серы является 1,3-дизопропилбензол, помимо данного реагента применяют соединения с кратными связями.

В рамках проведенного исследования подобраны ароматические мономеры для сополимеризации с серой в 1,2-дихлорбензole. Полученные материалы охарактеризованы комплексом физических и физико-химических методов, исследовано влияние структуры ароматических соединений на электрические свойства сополимеров с серой. Диэлектрическая проницаемость и электропроводность синтезированных материалов определены с помощью метода диэлектрической спектроскопии. Получены материалы с высокой диэлектрической проницаемостью и электрической проводимостью, характерной для полупроводников и диэлектриков.

*Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам, осуществляющим перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики №СП-3123.2016.1.*

**МОДИФИКАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ N-3-  
(ФЕНИЛАМИНОПРОПИЛ)ТРИМЕТОКСИСИЛАНОМ И ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ  
ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ ДИСПЕРСИЙ**

Горбачук В.В.<sup>a</sup>, Рамадан О.М.<sup>a</sup>, Горбатова П.А.<sup>b</sup>, Стойков И.И.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

*vladimirgorbachuk@gmail.com*

Полупроводниковые органические материалы и гибридные органо-неорганические материалы являются привлекательной альтернативой неорганическим полупроводниковым материалам. Меньшая плотность, относительная лёгкость обработки, нанесения на различные субстраты, доступность материалов по сравнению с малораспространёнными в природе элементами, используемыми в неорганических полупроводниковых материалах, являются главными причинами повышенного внимания к данной области не только со стороны фундаментальной науки, но и со стороны технологии.

Описанные сопряжённые полимеры, как правило, характеризуются низкой механической устойчивостью, малой стабильностью при циклической зарядке/разрядке конденсаторов. Нами предложено вместо мономеров для окислительной полимеризации (анилин и его производные) вводить в реакцию окислительной полимеризации модифицированный N-3-(фениламинопропил)триметоксисиланом нанопорошок диоксида кремния.

Структуры и состав продуктов окислительной полимеризации модифицированных фрагментами анилина наночастиц диоксида кремния исследованы комплексом физических и физико-химических методов. Термостабильность синтезированных материалов оценена с помощью метода совмещённой термогравиметрии/дифференциальной сканирующей калориметрии. Электрические свойства полученных продуктов изучены методом диэлектрической спектроскопии.

*Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам, осуществляющим перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики №СП-3123.2016.1.*

## ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ФЕНОТИАЗИНА: ВЛИЯНИЕ ОКИСЛИТЕЛЕЙ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ЛЮМИНИСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ

Горбачук В.В.<sup>a</sup>, Хадиева А.И.<sup>b</sup>, Горбатова П.А.<sup>b</sup>, Кадиров А.Г.<sup>c</sup>, Стойков И.И.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

<sup>c</sup> Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

*vladimirgorbachuk@gmail.com*

Синтез сопряжённых полимеров, сочетающих полупроводниковую электрическую проводимость с люминисцентными свойствами, представляет повышенный интерес для изготовления OLED дисплеев, солнечных батарей, сенсоров. Особый интерес представляет возможность варьирования структуры мономеров и условий полимеризации для получения сопряжённых полимеров с заданными электролюминисцентными свойствами.

В настоящее время сопряжённые полимеры получают методами поликонденсации и сополиконденсации бифункциональных производных ароматических соединений. Получение подобных мономеров требует дополнительных синтетических стадий, связанных с функционализацией ароматических соединений галоген-, бороганическими и другими фрагментами.

В рамках данной работы проведена окислительная полимеризация фенотиазина персульфатом аммония и нитратами ряда d-металлов ( $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Ag}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ). Структуры и состав продуктов окислительной полимеризации исследованы методами ЯМР  $^1\text{H}$  и ИК спектроскопии, МАЛДИ масс-спектрометрии. Электрические свойства соединений определены методом диэлектрической спектроскопии, люминисцентные свойства полимерных плёнок исследованы методом совмещённой флуоресцентной/просвечивающей микроскопии.

*Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам, осуществляющим перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики № СП-3123.2016.1.*

## АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ АП-КОНВЕРСИОННОЙ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ В КРИСТАЛЛЕ $\text{LiYbF}_4:\text{Ho}^{3+}$

Гориев О.Г., Казаков Б.Н., Семашко В.В.

*Физический факультет КФУ, Казань, Россия*

*goriev.o.g@gmail.com*

Форма продольных сечений и профилей люминесценции существенно зависят от положения  $\Delta z$  перетяжки лазерного луча относительно передней поверхности кристалла. Проекции продольного сечения люминесценции кристалла на направление распространения лазерного луча определены как горизонтальные профили.

Когда перетяжка находится внутри кристалла ( $\Delta z=0\div2.5$  мм), в нем формируется узкий канал вдоль лазерного луча с наиболее интенсивной люминесценцией ионов  $\text{Yb}^{3+}$  и  $\text{Ho}^{3+}$  (рисунок 1а).

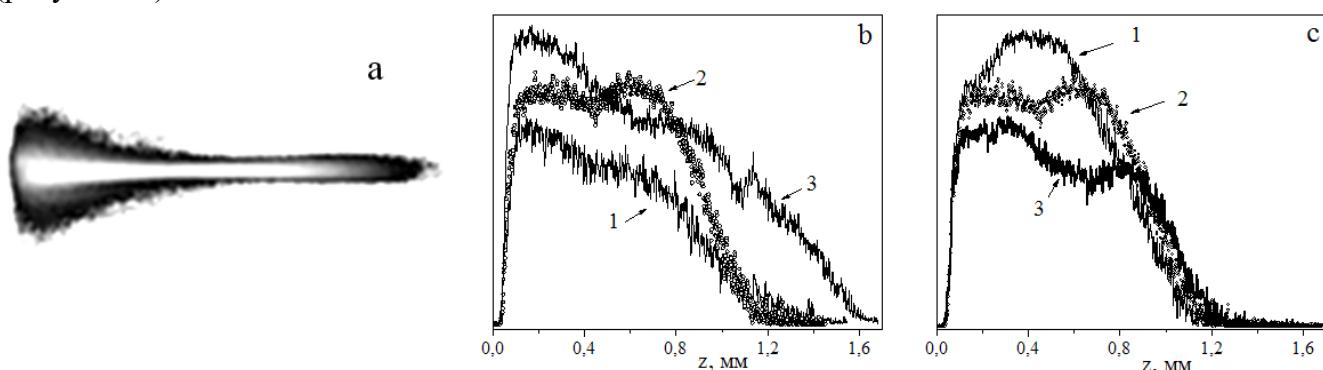


Рисунок 1. – Фотография продольного сечения R-люминесценции ионов  $\text{Ho}^{3+}$ ,  $\Delta z=1.2$  мм –(а); горизонтальные профили по оси канала люминесценции ионов  $\text{Yb}^{3+}$  (1), ионов  $\text{Ho}^{3+}$  : для R-люминесценции (2) и G-люминесценции (3),  $\Delta z=1.2$  мм – (б); горизонтальные профили по оси канала R-люминесценции ионов  $\text{Ho}^{3+}$  при  $\Delta z=1.05$  мм (1), 1.2 мм (2), 1.35 мм (3) – (с)

Обнаружено, что канал резко сужается при положении перетяжки лазерного луча в интервале  $\Delta z=1.05\div1.35$  мм. Это приводит к сильному увеличению объемной плотности энергии в канале. В результате возникает синхронизация излучения ионов  $\text{Yb}^{3+}$  с образованием мощного когерентного излучения. Это приводит населенность уровня  ${}^5\text{F}_5$  ионов  $\text{Ho}^{3+}$  к почти инверсному состоянию, которое быстро распадается.

В продольных профилях вдоль оси канала проявляются как минимум два различных механизма заселения энергетических уровней ионов  $\text{Ho}^{3+}$ , с которых происходит зеленая (G - переход  $\{{}^5\text{F}_4, {}^5\text{S}_2\}\rightarrow{}^5\text{I}_8$ ) и красная (R - переход  ${}^5\text{F}_5\rightarrow{}^5\text{I}_8$ ) люминесценция (рисунок 1б). Для красной люминесценции один из механизмов возбуждения обусловлен взаимодействием  $\text{Yb}^{3+}\rightarrow\text{Ho}^{3+}$ , а второй —  $\text{Ho}^{3+}\rightarrow\text{Ho}^{3+}$ . Эти механизмы проявляются в разных участках канала, а их вклады зависят от положения перетяжки лазерного луча внутри кристалла (рисунок 1с).

**СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ИОНОВ  $\text{PR}^{3+}$  В  
СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛАХ СОСТАВА  
 $\text{LiY}_{1-x}\text{Lu}_x\text{F}_4$**

Гориева В.Г., Кораблева С.Л., Семашко В.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*ekorre\_v@mail.ru*

**Аннотация:** при комнатной температуре нами были исследованы поляризованные спектры поглощения из возбужденных  $^1\text{D}_2$  и  $^3\text{P}_j$  состояний (ПВС)  $4f^2$ - конфигурации ионов  $\text{Pr}^{3+}$ , dopированных в смешанные кристаллы состава  $\text{LiY}_{1-x}\text{Lu}_x\text{F}_4:\text{Pr}^{3+}$ . Эти спектры лежат в УФ и видимой области. Данные исследований необходимы для оценки эффективности ступенчатого возбуждения  $4f5d$ -состояний ионов  $\text{Pr}^{3+}$  в этих кристаллах.

Широкозонные диэлектрические кристаллы, dopированные ионами празеодима, являются хорошо известными излучателями УФ и видимого диапазона спектра благодаря межконфигурационным  $4f5d \rightarrow 4f^2$  и внутренконфигурационным  $4f^2 \rightarrow 4f^2$  переходам ионов  $\text{Pr}^{3+}$  [1,2]. Эти переходы позволяют получить излучение в области от 220 до 730 нм. Лазерная генерация в УФ области может быть реализована благодаря использованию  $4f^2-4f5d$  накачки, осуществляющей либо с помощью УФ излучения гармоник серийных лазеров, работающих в видимой и ИК области, либо мощных лазеров на красителе. К сожалению, такая накачка вызывает в твердотельных активных элементах различные фотодинамические процессы (ФДП), которые приводят к деградации их оптических свойств. Одним из способов избежать или значительно уменьшить пагубное проявление ФДП является использование ап-конверсионной накачки [1]. Поиск путей реализации такой накачки имеет важную практическую значимость с точки зрения будущего использования полупроводниковых лазеров для накачки активных сред твердотельных лазеров УФ диапазона.

В настоящей работе мы исследуем возможность населения состояний  $5d$ - конфигурации ионов  $\text{Ce}^{3+}$ , dopируемых в кристаллы состава  $\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4$ , путем ступенчатого ап-конверсионного возбуждения состояний  $4f5d$ -конфигурации ионов  $\text{Pr}^{3+}$  с последующей передачей энергии возбуждения от ионов  $\text{Pr}^{3+}$  к ионам  $\text{Ce}^{3+}$ . На сегодняшний день существует две апробированные схемы возбуждения  $5d$ -состояний ионов  $\text{Ce}^{3+}$  в матрицах  $\text{Pr,Ce:LiYF}_4$  и  $\text{Pr,Ce:LiLuF}_4$ , представляющих собой двухфотонную  $^3\text{H}_4(\text{Pr}) \rightarrow ^1\text{D}_2(\text{Pr}) \rightarrow 4f5d(\text{Pr})$  или  $^3\text{H}_4(\text{Pr}) \rightarrow ^3\text{P}_j(\text{Pr}) \rightarrow 4f5d(\text{Pr})$  ступенчатую накачку  $4f5d$ -состояний ионов  $\text{Pr}^{3+}$  с последующей безызлучательной передачей энергии этих состояний на  $5d$ -состояния ионов  $\text{Ce}^{3+}$   $4f5d(\text{Pr}) \rightarrow 5d(\text{Ce})$ . Обе эти схемы базируются на поглощении из возбужденного  $^1\text{D}_2$  или  $^3\text{P}_j$  состояния ионов  $\text{Pr}^{3+}$  на состояния  $4f5d$ - конфигурации [1]. Недавно на кристаллах  $\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4$ , dopированных ионами  $\text{Pr}^{3+}$  и  $\text{Ce}^{3+}$  было получено слабое оптическое усиление в УФ области при использовании  $^3\text{H}_4(\text{Pr}) \rightarrow ^1\text{D}_2(\text{Pr}) \rightarrow 4f5d(\text{Pr}) \rightarrow 5d(\text{Ce})$  схемы накачки. В дальнейшем необходимо оптимизировать условия накачки для получения значительного оптического усиления и лазерной генерации [3]. Существует множество критериев для максимизации оптического усиления, среди которых: правильно выбранные длины волн обеих ступеней накачки  $^3\text{H}_4(\text{Pr}) \rightarrow ^1\text{D}_2(\text{Pr}) / ^3\text{P}_j(\text{Pr})$  и  $^1\text{D}_2(\text{Pr}) / ^3\text{P}_j(\text{Pr}) \rightarrow 4f5d(\text{Pr})$ , избегание фотоионизации dopируемых ионов, обеспечение высокой концентрации ионов  $\text{Ce}^{3+}$  и  $\text{Pr}^{3+}$ , плотности энергии накачки, выбор оптимального состава кристаллов  $\text{LiY}_{1-x}\text{Lu}_x\text{F}_4$  и так далее.

В этой работе мы сообщаем о результатах исследований спектров поглощения из возбужденных  $^1\text{D}_2$  и  $^3\text{P}_j$  состояний ионов  $\text{Pr}^{3+}$ , dopированных в смешанные кристаллы состава  $\text{LiY}_{1-x}\text{Lu}_x\text{F}_4:\text{Pr}^{3+}$  ( $x=0, 0.3, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 1$ ). Спектры представлены в зависимости от точек на кристалле, расположенных вдоль его роста. Информация о спектрах ПВС позволила нам определить оптимальные длины волн второй ступени накачки переходов  $^1\text{D}_2(\text{Pr}) / ^3\text{P}_j(\text{Pr}) \rightarrow 4f5d(\text{Pr})$ , обеспечивающих создание максимальной населенности на  $4f5d$

состояниях ионов  $\text{Pr}^{3+}$  и одновременно избежать фотоионизации допирируемых ионов по схемам: “ $4f5d(\text{Pr}) \rightarrow$  зона проводимости” и “ $5d(\text{Ce}) \rightarrow$  зона проводимости”.

Эта работа была частично финансирована грантом Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 15-02-05309.

1. S. Nicolas, E. Descroix, M.F. Joubert, Y. Guyot, M. Laroche, R. Moncorge, R.Y. Abdulsabirov, A.K. Naumov, V.V. Semashko, A.M. Tkachuk, M. Malinowski. *Opt. Mat.*, 2003, **22**, 139-146.
2. S.P. Chernov, L.I. Devyatkova, O.N. Ivanova, A.A. Kaminskii, V.V. Mikhailin, S.N. Rudnev, T.V. Uvarova *Phys. Status Solidi A*, 1985, **88**, K169–K173.
3. V.G. Gorieva, S.L. Koraleva, M.A. Marisov, V.V. Pavlov, V.V. Semashko *J. Laser Phys. Lett.*, 2015, **13**, 025802.

## МОДИФИКАЦИЯ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЧАСТИЦАМИ ЯНУСА

Гребенщикова Е.С.<sup>a</sup>, Шамсутдинова Р.<sup>b</sup>, Давлетбаева И.М.<sup>a,b</sup>

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

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

*grebenschikovaekaterina@gmail.com*

В настоящее время большой интерес исследователей привлекают наноразмерные частицы кремнезема, содержащие на поверхности привитые ответвления гидрофобного и гидрофильного характера. Такие ответвления благодаря их термодинамической несовместимости или направленному распределению функциональных групп по поверхности кремнезема располагаются по двум сторонам частиц. Идеализированная поверхность кремнезема является сферической. Получаемые таким образом частицы являются амфифильными и получили название Янусов в связи с аналогией с мифологическим «двуликим Янусом».

На основе тетраэтоксисилана, полиоксиэтиленгликоля, полидиметилсилоксана в присутствии диэтиленгликолята калия в качестве катализатора анионного типа синтезированы и охарактеризованы амфифильные олигомерные частицы Януса. Установлено, что частицы Януса проявляют способность понижать поверхностное натяжение их растворов толуоле. С использованием атомно-силовой микроскопии установлено, что при модификации блок-сополимеров частицы Януса располагаются на границе раздела фаз. При этом, полиоксиэтиленовая составляющая совмещается с гидрофильной составляющей блок-сополимеров, а полидиметилсилоксановая составляющая располагается на границе микрофазового разделения и создает условия для того, чтобы формировалась структура по типу ядро-оболочки.

# ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ L-ЛИЗИНА МЕТОДОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Гусев Е.В., Хафизов Л.И. Гусев Ю.А.

*Казанский(Приволжский)Федеральный Университет, Казань, Россия*

*wow.zhenia-en.35@mail.ru*

Работы [1-4] посвящены изучению неизвестного ранее явления, которое состоит в том, что в водных растворах низких концентраций (вплоть до  $10^{-20}$  М растворенного вещества), приготовленных методом последовательного серийного разбавления, образуются наноразмерные молекулярные ансамбли, получившие название “наноассоциаты”.

Концентрационные зависимости размеров наноассоциатов носят немонотонный характер, при этом размеры изменяются от нескольких десятков до нескольких сотен нанометров.

Хотя появление наноассоциатов инициируется растворенным веществом, состоят они преимущественно из упорядоченных структур воды. Обязательными условиями образования наноассоциатов в водных растворах являются действие внешних физических полей (геомагнитного поля и низкочастотных электромагнитных полей) и определенная структура растворенного вещества [2]. Установлена взаимосвязь между параметрами наноассоциатов (размер,  $\zeta$ -потенциал) и физико-химическими (удельная электропроводность, pH-метрия, поверхностное натяжение) свойствами растворов [2,3,6].

В выполненных раннее работах [3,4] измерения проводились на низких частотах ( $10^{-1}$  -  $10^{-5}$  Гц) и исследовалась зависимость удельной проводимости от концентрации раствора. Целью данной работы является исследование влияния малых концентраций  $\text{H}_2\text{O}$  бидиситилиат,  $\text{H}_2\text{O}$  симплисити, а также водные растворы поверхностью активного вещества L-Лизина с концентрациями  $10^{-2}$  и  $10^{-10}$  моль/литр, на структуру растворителя. Исследования проводятся в частотном диапазоне от 0,5 ГГц до 50 ГГц, и в диапазоне температур от +5 до +30 С с шагом 5 градусов.

Измерены диэлектрические спектры растворов  $\text{H}_2\text{O}$  бидиситилиат,  $\text{H}_2\text{O}$  симплисити, водные растворы поверхностью активного вещества вещества L-Лизина с концентрации  $10^{-2}$  и  $10^{-10}$ , рассчитаны диэлектрические параметры  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_\infty$ , также определены времена диэлектрической релаксации. Наши результаты показывают резкое изменение структуры раствора в области концентрации  $10^{-4}$  Моль/литр. Это может быть связано с тем, что молекула аминокислоты L-лизин является полярной. Поэтому добавление L-лизина в воду приводит к нарушению водородных связей и уменьшает энергию активации раствора. Увеличение концентраций L-лизина приводит к дальнейшему уменьшению  $\Delta E$  вплоть до концентрации  $10^{-4}$  моль/литр. При дальнейшем увеличении концентрации мы наблюдаем резкое возрастание  $\Delta E$ , по-видимому это связано с тем, что молекулы L-лизина при этой концентрации образуют наноассоциаты, которые в свою очередь образуют водородные связи между собой.

Данная качественная модель хорошо согласуется с результатами других работ [7].

1. Рыжкина И.С., Киселева Ю.В., Коновалов А.И. *ДАН*, 2009, **428(4)**, 487-491.
2. Рыжкина И.С., Муртазина Л.И., Коновалов А.И. *ДАН*, 2011. **440(6)**, 778-781.
3. Рыжкина И.С., Муртазина Л.И., Шерман Е.Д.и др. *ДАН*, 2011, **438(2)**, 207-211.
- 4 Рыжкина И.С., Киселева Ю.В., Тимошева А.П.и др. *ДАН*, 2012, **447(1)**, 56-62.
5. Гусев Ю.А. Основы диэлектрической спектроскопии. Казань: Изд\_во КГУ, 2008. 112 с.
6. Gefen Y., Aharonov A., Alexander S. *Phys. Rev. Lett.* 1983. **50(3)**, 77-80.
7. Коновалов А.И., Рыжкин И.С. Образование наноассоциатов – ключ к пониманию физикохимических и биологических свойств высокоразбавленных водных растворов/ а // *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2014, **59(3)**.

## ГЕНЫ УСТОЙЧИВОСТИ К АНТИБИОТИКАМ В НАВОЗАХ И ПОМЕТАХ ФЕРМ РЕСПУБЛИК ТАТАРСТАН, МАРИЙ ЭЛ И БАШКОРТОСТАН

Данилова Н.В., Галицкая П.Ю.

*Институт экологии и природопользования КФУ, Казань, Россия*

*natasha-danilova91@mail.ru*

Антибиотики широко применяют не только для профилактики и лечения сельскохозяйственных животных, но также в качестве стимуляторов роста [1]. Попав в окружающую среду, они могут вызывать развитие резистентности у микроорганизмов, что является серьезной проблемой для здравоохранения в настоящее время [2].

Целью работы являлась оценка уровня загрязнения генами устойчивости к тетрациклинам, сульфонамидам и макролидам восемнадцати образцов навозов и пометов сельскохозяйственных животных, выращенных на фермах Республики Татарстан, Марий Эл и Башкортостан. Второй целью было проанализировать наличие или отсутствие корреляции между количеством генов устойчивости к антибиотикам в образцах исследуемых навозов и пометов сельскохозяйственных животных и размером ферм.

Выявление генов устойчивости к антибиотикам тетрациклической, сульфонамидной и макролидной (эритромицин) групп проводили с помощью реакции ПЦР, используя праймеры *tet(X)*, *sulI*, *ereA* соответственно.

Результаты настоящей работы показали, что гены устойчивости к антибиотикам тетрациклической, сульфонамидной и макролидной группы являются распространенными среди навозов и пометов сельскохозяйственных животных. В четырех из восемнадцати образцов было обнаружено присутствие генов сразу к трем исследуемым антибиотикам. Гены, отвечающие за дезактивацию тетрациклических антибиотиков *tet(X)* оказались доминирующими. Сильнее всего загрязнены генами образцы куриного помета. Уровень загрязненности антибиотикорезистентными генами не зависит от масштаба содержания животных. Гены найдены как в образцах, отобранных на предприятиях массового производства, так и в малых фермах и частных домохозяйствах.

1. Wang F, Qiao M., Chen Z., Su J., Zhu Y. Antibiotic resistance genes in manure-amended soil and vegetables at harvest. *J. Hazard. Mater.*, 2015, **299**, 215-221.
2. Tang X., Lou C., Wang S., Lu Y., Liu M., Hashmi M., Liang X., Li Z., Liao Y., Qin W., Fan F., Xu J., Brookes P. Effects of long-term manure applications on the occurrence of antibiotics and antibiotic resistance genes (ARGs) in paddy soils : Evidence from four field experiments in south of China. *Soil Biol. Biochem.*, 2015, **90**, 179-187.

# СИНТЕЗ 1,5-ДИАЗА-3,7-ДИФОСФАЦИКЛООКТАНОВ С ЭТИЛПИРИДИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ И ИХ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ (І)

Даянова И., Стрельник И., Мусина Э., Карасик А.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия  
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»,  
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

*irina081194@mail.ru*

Циклические аминометилфосфины вызывают несомненный интерес у исследователей благодаря наличию двух донорных центров различной природы, заключенных в жесткую циклическую систему. Несмотря на сочетание атомов фосфора и азота, эти лиганды не выступают как гибридные, а координация переходных металлов происходит только через атомы фосфора, тем самым, образуя P,P-хелатные или P,P-мостиковые комплексы [1].

Нами были получены 1,5-диаза-3,7-дифосфациклооктаны с этилпиридильными заместителями при атомах фосфора (Схема 1).

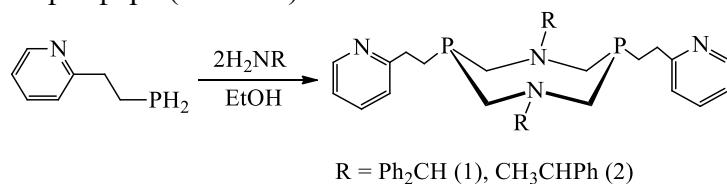


Схема 1.

Наличие гибкого этиленового спейсера обуславливает возможность координации атомов азота пиридильной группы по ионам переходных металлов. Так, нами были получены биядерные комплексы меди(I), в которых ионы меди стабилизированы образованием шестичленного хелатного металлоцикла (Схема 2).

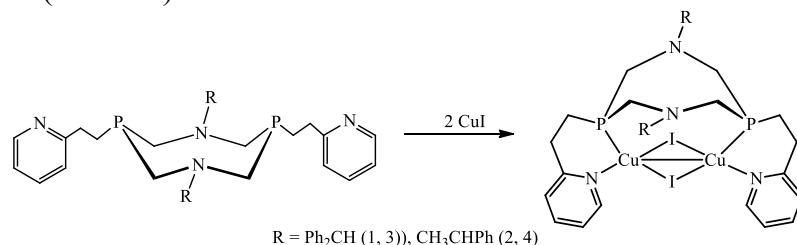


Схема 2.

Полученные комплексы проявляют люминесценцию в зеленой области спектра. Квантовые выходы люминесценции составляют 4 и 38%.

1. A. Karasik, A. Balueva, E. Musina, O. Sinyashin, *Mendeleev Commun.*, 2013, **23**, 237.

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАРКЕРОВ  
ОКИСЛИТЕЛЬНОГО СТРЕССА ДНК И РНК НА ЭЛЕКТРОДЕ С ПЛЕНКОЙ ИЗ  
ГЕКСАХЛОРОРУТЕНАТА ПЛАТИНЫ**

Демина В.Д., Шайдарова Л.Г., Гедмина А.В., Челнокова И.А., Будников Г.К.

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

*viktori6994@mail.ru*

Интенсивный и избыточный рост концентрации высокореакционных кислородных и азотных соединений является причиной изменения содержания компонентов антиоксидантной системы, что приводит к мутационным явлениям в структурах жизненно важных биомолекул, таких как дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК) и рибонуклеиновая кислота (РНК). Вопросам определения содержания маркеров окислительного стресса РНК-гуанозина и ДНК-деоксигуанозина монофосфата в биологических объектах уделяют пристальное внимание с целью диагностики и эффективности лечения ряда заболеваний. Изучена возможность вольтамперометрического определения гуанозина и деоксигуанозина монофосфата на электроде из стеклоуглерода (СУ), модифицированном одномерной неорганической пленкой из гексахлорорутената платины ( $\text{PtRuCl}_6$ ). Гуанозин и деоксигуанозин монофосфат, окисляются на немодифицированном СУ с перенапряжением в области потенциалов окисления фонового электролита. Использование пленки из  $\text{PtRuCl}_6$ , нанесенной на поверхности СУ приводит к уменьшению перенапряжения и значительному приросту тока окисления модификатора в присутствии анализаторов. Окисление рассматриваемых нуклеозида и нуклеотида происходит по гуаниновому фрагменту при  $E + 1.1$  В, в качестве каталитически активных частиц выступают оксоформы рутения (IV). Определены оптимальные условия осаждения пленки, при которых регистрируются наилучшие каталитические характеристики. На основании полученных экспериментальных результатов разработаны способы вольтамперометрического определения рассматриваемых гуанозина и деоксигуанозина монофосфата на электродах, модифицированных пленкой из  $\text{PtRuCl}_6$ . Разработанная методика вольтамперометрического определения гуанозина и деоксигуанозина монофосфата на электроде с пленкой из  $\text{PtRuCl}_6$  была апробирована для измерения содержания рассматриваемого нуклеозида и нуклеотида в урине человека.

## КОМБИНИРОВАННЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ ДОЛИ ВЗВЕСИ, ОСАЖДАЕМОЙ В ДЫХАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ ЧЕЛОВЕКА

Денисова А.А.

*КФУ, Казань, Россия*

*nasty194@mail.ru*

Влияние загрязнения воздушной среды на здоровье человека является важнейшей экологической проблемой. К одному из типов воздушных загрязнений относятся – аэрозоли, формируемые в атмосфере в результате естественных и антропогенных процессов. Аэрозольные взвеси могут оказывать значительное негативное влияние на дыхательную систему человека. Для оценки такого влияния необходимо уметь рассчитывать концентрацию взвешенных частиц, осаждаемых в дыхательных путях человека. Общее количество и масса осаждаемых частиц зависит от морфометрии дыхательных путей, условий дыхания и свойств частиц.

Наряду с оценкой доли частиц, осевших при одном вдохе необходимым, является расчет общего количества частиц, которые осадут в дыхательных путях за рабочий период. Этот показатель зависит от распределения концентраций частиц в воздушном пространстве вокруг человека и от времени, проведенного в загрязненной рабочей зоне.

Количество осевших частиц в каждой из зон дыхательных путей, за определенный период времени, может быть рассчитано по формуле [1,2]:

$$D_p = C(d_p) \cdot F_i(d_p) \cdot V \quad (1)$$

где  $D_p$  – количество осевших частиц,  $C(d_p)$  – комнатная концентрация частиц, распределенная по диаметрам частиц,  $F(d_p)$  – доля осевших частиц, распределенная по диаметрам,  $V$  – объем вдыхаемого воздуха.

Оседание взвешенных частиц в дыхательной системе человека определяется в первую очередь размерами частиц и условиями дыхания. В зависимости от размеров частицы могут при дыхании попадать в ротовую полость и проникать дальше в легкие. Проникающие частицы оседают на внутренней поверхности легких в результате диффузационного и инерционного механизмов. Для оценки доли осаждаемых частиц необходимо рассчитать течение вдыхаемой аэрозоли. В настоящей работе для расчета доли  $F(d_p)$  аэрозольных частиц, осевших в различных зонах дыхательных путей человека, использовалась свободно распространяемая программа MPPD (Multiple-Path Particle Dosimetry V2.11), разработанная Институтом медицинских наук Хамнера и Нидерландским национальным институтом здравоохранения и окружающей среды [3].

Объем вдыхаемого воздуха  $V$  рассчитывается в программе по формуле:

$$V = TV \cdot BF \cdot t \quad (2)$$

где  $V$  – объем вдыхаемого воздуха,  $TV$  – дыхательный объем (объем воздуха проходящие через легкие при одном вдохе, по умолчанию 625 мл),  $BF$  – частота дыхания (количество вздохов в минуту, по умолчанию 12 вздохов/мин),  $t$  – время экспозиции в мин.

Для расчета  $D_p$  по формуле (1) была написана программа Aerosol Particle Deposition Estimation Program (APDEP) на языке Python. В качестве основных входных данных выбираются данные о распределении частиц по размерам взвеси в зоне дыхания человека. Для расчета доли осевших частиц  $F(d_p)$  внутри программы APDEP вызывается подпрограмма MPPD. В результате формируется файл, содержащий зональные и общее распределения долей осевших частиц. Рассчитываются также масса и площадь поверхности осевших частиц.

1. K. Oravissjärvi, et al. Diesel particle composition after exhaust after-treatment of an off-road diesel engine and modeling of deposition into the human lung. *Journal of Aerosol Science*, 2014, **69**, 32-47.

2. T. Hussein et al. Indoor aerosol modeling for assessment of exposure and respiratory tract deposited dose. *Atmospheric Environment*, 2015, **106**, 402-411.
3. Интернет ресурс: Multiple-Path Particle Dosimetry Model (MPPD v 2.11). – URL: <http://ara.com/products/multiple-path-particle-dosimetry-model-mppd-v-211> (Дата обращения 02.10.15)

## РАЗРАБОТКА ИНТЕРНЕТ-ИНТЕРФЕЙСА ДЛЯ БАЗЫ ДАННЫХ ГЕОБОТАНИЧЕСКИХ ОПИСАНИЙ FLORA

Джабарова К.О.

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

*cool.kama-160692@yandex.ru*

Создание Интернет-сервисов для работы с базами геоботанических данных является актуальной задачей для разработчиков, поскольку в настоящее время нет ни одного широко известного и доступного такого сервиса. Наличие Интернета позволяет вести научное сотрудничество в области исследования и пополнения таких баз. Имеющиеся проекты, только аккумулируют информацию о наличии различных геоботанических баз в мире, однако для доступа к любой из них нужно обращаться к ее разработчикам, чтобы они сами извлекли данные из базы данных и предоставили их заинтересованным исследователям. Пополнение базы геоботанических данных через Интернет-интерфейс представляет отдельный интерес, поскольку расширяет возможности доступа к базе данных для ее создателей.

На кафедре общей экологии Института экологии и природопользования Казанского федерального университета создана в 1998 году и пополняется база флористической и геоботанической информации FLORA [1]. Она содержит информацию о видовом составе растительного покрова, эколого-ландшафтных характеристиках территорий, а также справочную информацию о видах, произрастающих на территории Республики Татарстан. База состоит из 12 следующих взаимосвязанных таблиц: точки описаний, описания, справочник видов, синонимы видов, типы ареала, эколого-ценотические группы, растительные формации, природные районы, ландшафты, справочник авторов, справочник публикаций и справочник биоморф. В данный момент база данных функционирует под управлением СУБД FoxPro 2.5, и доступ к ней возможен лишь с одного компьютера, содержащего всю информацию. Поддержка БД осуществляется специально написанным программным комплексом. В качестве источников информации служат данные натурных наблюдений (авторские описания растительного покрова и авторские сообщения о находках видов), описания, опубликованные в литературе, гербарные сборы, а также сведения об отдельных флористических находках, опубликованных в литературе.

В настоящее время в институте ведется работа по преобразованию базы данных с тем, чтобы доступ к ней был возможен с любого компьютера и любой точки России для пополнения данных и их использования. Это предполагает администрирование прав пользователей с разграничением доступа к информации, возможности её редактирования. Кроме того, предполагается создание сервиса для создания выборки данных из базы по запросу пользователя с последующей обработкой или сохранением в файл.

Предметом данной работы является создание интернет-интерфейса для базы геоботанических описаний FLORA. В ходе работы осуществлено подключение к базе данных FLORA, вывод данных в браузере с помощью интернет-интерфейса, создание дизайна и подготовка к разграничению прав пользователей.

В ходе подготовительной работы была проанализирована структура базы, произведена её загрузка в СУБД PostgreSQL, которая обеспечит работу в сети Интернет в рамках клиент-серверной модели, с изменениями под требования программной части интернет-сайта. База данных FLORA содержит полностью все необходимые выявляемые в геоботанических описаниях данные, структура данных хорошо formalизована и подготовка ее к публикации в сети Интернет не потребовала каких-либо кардинальных изменений.

Задав необходимые требования для сайта, с которым будет синхронизирована БД, нами реализовано подключения к базе на сервере и взаимодействие браузера с информацией на сервере. Для этого был выбран наиболее простой путь решения поставленной задачи – с помощью скриптового языка программирования общего назначения PHP. Он поддерживается

подавляющим большинством хостинг-провайдеров, является одним из лидеров среди языков программирования, применяемых для создания динамических веб-сайтов. Для удобства работы с базой создан соответствующий дизайн сайта по предварительно подготовленному макету. Дизайн создан на основе шаблонов Bootstrap, используя язык разметки веб-страниц HTML и язык их описания CSS.

Предметом дальнейшей разграничение прав пользователей для регулирования степени доступности информации из базы данных и их редактирования, а также внесение блока статистической обработки.

1. В.Е. Прохоров, Т.В. Рогова. Электронная флористическая база данных «ФЛОРА». – Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2010620050, 18.01.2010.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СОВМЕСТНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АМИНОКИСЛОТ В РАСТВОРЕ ИМИДАЗОЛИЕВОГО ПАВ

Дмитриев В.А., Ванин А.А., Беляева Е.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

*totsamiy5@gmail.com*

Мицеллярная жидкостная хроматография – один из перспективных методов разделения биоорганических природных соединений. В частности, было показано, что мицеллярная хроматография подходит для разделения аминокислот, углеводов, витаминов, нуклеотидов и т.д. [1,2] Один из важнейших параметров мицеллярной хроматографии – коэффициент распределения между водной фазой и псевдофазой мицеллы, поэтому моделирование систем, способных предсказать этот коэффициент, позволяет подобрать оптимальные растворитель, ПАВ, его концентрацию.

В данной работе молекулярно-динамическое моделирование водного раствора, содержащего мицеллу бромида 1-метил-3-додецилимида (C12mimBr) в присутствии аспарагината натрия и изолейцина осуществлялось в рамках программного комплекса GROMACS. Концентрация C12mimBr составляла 0.2 М (ККМ данного вещества 0.01 М), концентрации аминокислот варьировались. Моделирование осуществлялось с использованием NpT ансамбля ( $p=1$  бар,  $T=298,15$  К). Для описания катионов имидазолия были использованы параметры полноатомного силового поля CHARMM27-AA (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics), а для анионов и для аминокислот OPLS-AA (Optimized Potential for Liquid Simulations) [3].

В результате были посчитаны коэффициенты распределения для аминокислот в каждой системе. Кроме того, были выяснены области преимущественного расположения аминокислот в мицелле.

1. Sherma J., Sleckman B.P., Armstrong D.W. *Ibid*, 1983, **6(1)**, 95.
2. Armstrong D.W., Tern R.Q. *Anal Chem*, 1979, **51(13)**, 2160.
3. Tomé L.I.N., Jorge M., Gomes J.R.B., Coutinho J.A.P. Molecular Dynamics Simulation Studies of the Interactions between Ionic Liquids and Amino Acids in Aqueous Solution *J. Phys. Chem. B*. 2012, **116(6)**, 1831-1842

## РЕАЛИЗАЦИЯ CPMG ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ ПОПЕРЕЧНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ ЯДЕР

Долгоруков Г.А., Сафиуллин К.Р.

*Институт физики, КФУ, Казань, Россия*

*Sasha\_chayan@mail.ru*

Среди импульсных методов ЯМР, CP(MG) методы регистрации времени поперечной релаксации позволяют проводить измерения в большем временном диапазоне, нежели методы использующие другие последовательности импульсов, а точность измерения CPMG не чувствительна к неидеальности  $\pi$  импульсов. Сама последовательность имеет вид:  $\pi/2-\tau-(\pi-2\tau)_n$ , где  $n$  – количество  $\pi$  импульсов. Между  $\pi/2$  импульсом и  $\pi$  импульсом должен быть сдвиг по фазе на  $90^\circ$ . Через время  $\tau$  после первого  $\pi$  импульса появится сигнал спинового эха, поскольку после этого подан еще один  $\pi$  импульс, через время  $2\tau$  после первого эха появится второе, но с меньшей амплитудой, затем появится третье эхо и т.д.

Работа выполнялась с помощью ЯМР спектрометра лабораторного изготовления. Основные характеристики установки: диапазон изменения магнитного поля – до 1 Тл, диапазон частот 3 – 50 МГц, время парализации приемного тракта ЯМР спектрометра – 15 мкс. На базе данного спектрометра была реализована CPMG последовательность.

В ходе работы была реализована генерация необходимой последовательности радиочастотных импульсов и возможность ввода ее основных параметров. С помощью языка программирования C++ было организовано правильное детектирование и обработка сигнала. Для подачи электромагнитных импульсов на образец был собран колебательный контур с частотой  $f_{рез}=18,65$  МГц. В качестве образца подходящего для проверки правильности работы программы был выбран водный раствор  $Cu_2SO_4$ . Для реализации сдвига по фазе, необходимого между первым и вторым импульсом последовательности был собран пассивный фазовращатель. Эксперименты методом импульсного ЯМР были проведены на ядрах  $^1H$ . Были получены спады поперечной намагниченности ядер  $^1H$  при различных параметрах последовательности. Проведенное сравнение полученных результатов, показало преимущество и достоверность результатов при использовании CPMG последовательности.

## СОЗДАНИЕ ГИС С WEB-ПРИЛОЖЕНИЕМ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТЕОПАРАМЕТРОВ

Домнина А.М.

*К(П)ФУ, Казань, Россия*

*lissadom@yandex.ru*

Неблагоприятные метеорологические условия оказывают большое влияние на распространение загрязняющих веществ. Поэтому метеорологические прогнозы являются значимыми для эффективной работы предприятий и позволяют снизить негативные последствия от загрязнения для населения.

Объектом исследования являются метеопараметры и значения параметров загрязнения, полученные со стационарных и передвижных постов наблюдений. Целью выпускной квалификационной работы является пространственное моделирование и автоматизация построения карт распределение метеопараметров и уровней загрязнения на интернет-сайте.

В ходе выполнения работы было решено несколько задач. Во-первых, была создана web-страница, написанная на языке разметки HTML5. На странице размещена панель, которая является контейнером для полей ввода, куда пользователь вводит необходимую ему информацию для формирования файла с данными, а также две кнопки для отбора данных и построения карты.

Для того чтобы сайт был динамическим и пространственное моделирование метеопараметров происходило интерактивно, непосредственно на сайте, были связаны между собой сайт и написанные скрипты. Был создан скрипт на Javascript, который обрабатывает нажатие кнопки и отправляет информацию на питоновский сервер Tornado. Также была создана программа по отбору данных по заданным параметрам. При запуске этой программы происходит подключение к веб-серверу, формируется файл с данными по тем параметрам, которые выбрал пользователь на сайте и запускается скрипт по построению карты.

Во-вторых, был разработан скрипт-файл для автоматизации построения карты по метеопараметрам. Для этого использовалась программа Scripter, используемая при создании и редактировании скрипт-файлов. Для визуализации метеоданных используются изолинейные карты, данные интерполированы методом Кrigинга. В качестве входных данных используется файл с данными, отобранный программой по отбору данных. По завершению работы формируются изображение карты в формате PNG, которое в дальнейшем отображается на сайте.

На данный момент времени веб-приложение доступно только на локальном сервере. В дальнейшем возможна его доработка и размещение на посещаемом рабочем сайте.

## СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ МИНИМАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

Скворцова А.А.<sup>a</sup>, Драцкая А.И.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Московский авиационный институт (НИУ), Москва, Россия

<sup>b</sup> Муниципальное бюджетное образовательное учреждение «Гимназия №5», город Королёв (микрорайон Юбилейный), Московская область, Россия

saa2509@mail.ru , dratskaya.albina@yandex.ru

Решение задачи о лёгкой и прочной конструкции можно найти в природном явлении мыльных пузырей [1]. Поверхность мыльного пузыря имеет минимальную площадь, поэтому оболочка очень лёгкая. Однако поверхность мыльного пузыря не имеет контура, натянута сама на себя. Если мыльную плёнку натянуть на контурную рамку, то получится пример минимальной поверхности. Такие поверхности не всегда имеют минимальную площадь. Классический пример – два кольца с натянутой на них мыльной плёнкой в форме катеноида. В этом примере есть два контура, которые не соединены друг с другом. Цель работы заключается в создании лёгкой силовой конструкции кубической формы на едином контуре. Нужно так составить стержни и оболочки, чтобы на них можно было создать уже не силовую лёгкую конструкцию в форме куба. Такая сложная задача решается очень просто с помощью минимальных поверхностей в виде мыльных плёнок. Простой и тяжёлой конструкцией будет кубическая оболочка. Пусть длина ребра куба равна  $a$ . Тогда шесть граней куба будут иметь площадь  $6a^2$ . Для поиска минимальной поверхности надо изготовить кубический контур из тонкой проволоки и опустить его в мыльный раствор. Получится плёнка из восьми сходящихся в центре треугольников с общей площадью приблизительно  $3,4a^2$ , то есть почти в два раза легче. На основе этой плёночной структуры построена бумажная модель лёгкой кубической композитной структуры перспективного материала. Лёгкую кубическую структуру можно изготовить не только на основе плёнок, но и на основе стержней. Куб имеет двенадцать ребёр общей длиной  $12a$ . Пять рёбер можно убрать, при этом кубическая структура сохранится, но общая длина рёбер будет  $7a$ . Если построить кубическую структуру на основе рёбер минимальной поверхности, то их длина равна приблизительно  $6,8a$ , то есть меньше, чем в предыдущем случае. Более сложные контуры, на которые натянуты мыльные плёнки, позволяют предсказать самые лёгкие структуры композитных материалов без решения трудных математических задач [2]. В этих структурах основой является не куб, а другие геометрические фигуры.

1. Физический энциклопедический словарь. Гл. ред. А.М.Прохоров. М.: Советская энциклопедия, 1983. 928 с.
2. Драцкая А.И. Минимальные поверхности. Электронный ресурс: <https://youtu.be/4i38ltYQ0cw>

## РАЗРАБОТКА ИННОВАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОСТРУКТУРНОГО ФОСФОРИТА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОДУКТИВНОСТИ ЖИВОТНЫХ И УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ИХ ПРОДУКЦИИ

Ежков Д.В.<sup>a</sup>, Ежкова А.М.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия

<sup>b</sup> ФГБНУ Татарский НИИ агрохимии и почвоведения, Казань, Россия

*ezkov\_denis@mail.ru*

Целью работы стало получение наноструктурного фосфорита и изучение его влияния на метаболизм и продуктивность цыплят-бройлеров, химический состав и калорийность мяса.

Из природного агроминерала фосфорит Сюндюковского месторождения Республики Татарстан методом ультразвукового диспергирования изготовлен наноструктурный фосфорит с размером частиц 60,0-120,0 нм, исследованы потенциальные способы введения в организм и установлены безопасные дозы применения в виде кормовой добавки [1].

Введение в состав рациона цыплят-бройлеров КФХ «МАРС» Зеленодольского района Республики Татарстан наноструктурного фосфорита в дозе 0,2% к сухому веществу обусловило повышение сохранности поголовья цыплят на 5,0%, улучшение морфо-биохимического состава крови по комплексу показателей на 1,3-22,3%, увеличение живой массы бройлеров на 19,4% в сравнении с контрольными аналогами.

Установлено увеличение убойного выхода потрошенной тушки опытных бройлеров на 0,9%. Наноструктурный фосфорит обусловил снижение содержания влаги в мясе на 4,2 %. При этом отмечали увеличение минеральных веществ на 6,7 %, жира – на 0,7 %, белка – на 2,7 %, калорийность повысилась на 0,9 % в сравнении с контрольными показателями.

В белом мясе цыплят-бройлеров, получавших в кормлении наноструктурный фосфорит, снизилось содержание солей кадмия на 35,0 %, свинца – на 22,6 % в сравнении с контрольными аналогами. Мясо цыплят-бройлеров, полученное при введении в их рацион наноструктурного фосфорита, соответствовало комплексу показателей СанПиН 2.3.2.2340-08 «Гигиенические требования безопасности и пищевой ценности пищевых продуктов».

1. А.П. Герасимов, Д.В. Ежков, А.Х. Яппаров, А.М. Ежкова. Ученые записки КГАВМ имени Н.Э. Баумана, 2015, 223, 42-46.

## ИЗГОТОВЛЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНОГО САПРОПЕЛЯ И РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ ДЛЯ СОРБЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ОРГАНИЗМЕ ЖИВОТНЫХ

Ежкова Д.В.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

*er\_rer@mail.ru*

Целью работы стало изготовление наноструктурного сапропеля, изучение сорбционных свойств в организме животных и разработка технологии его применения для получения качественной, экологически безопасной продукции животноводства.

Из термо-, механоактивированного сапропеля месторождения озеро Белое Тукаевского района Республики Татарстан методом ультразвукового диспергирования изготовлен наноструктурный сапропель с размером частиц 45,0-180,0 нм. Согласно литературных данных, наночастицы имеют повышенную активность и проявляют большую эффективность действия, чем макроаналоги [1].

В опытах использовали нелинейных белых мышей из вивария ФГБУ «Татарская межрегиональная ветеринарная лаборатория», г. Казань. Объектом исследований стали печень, почки и бедренные мышцы. Применение в течение 30 суток наноструктурного сапропеля в виде кормовой добавки мышам в дозах 0,6; 1,8 и 3,0% к сухому веществу рациона обусловило у экспериментально затравленных животных снижение кадмия на 14,1-21,5%, никеля – на 18,3-29,7 и свинца – на 15,2-22,4% в сравнении с контролем. Наибольшие сорбционные свойства проявились при дозе 3,0%. Сравнительный анализ сорбционного действия макроаналога – сапропеля в оптимальной дозе 3,0%, выявил снижение содержания кадмия на 8,5%, никеля – на 11,2 %, свинца – на 6,8% к контролю.

Применение наноструктурного сапропеля цыплятам-бройлерам в условиях научно-производственного опыта в КФХ «МАРС» Зеленодольского района Республики Татарстан в дозах 0,6; 1,2 и 1,8% к сухому веществу рациона обусловило увеличение прироста живой массы на 15,3-28,9% и снижение содержания солей кадмия и свинца в мясе на 8,3-12,6%.

1. Т.Ю. Мотина, А.Х. Яппаров, А.М. Ежкова, В.О. Ежков, И.А. Яппаров. Ученые записки КГАВМ имени Н.Э. Баумана, 2015, **223**, 121-124.

## СИНТЕЗ ПРЕКУРСОРОВ АМИНОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА

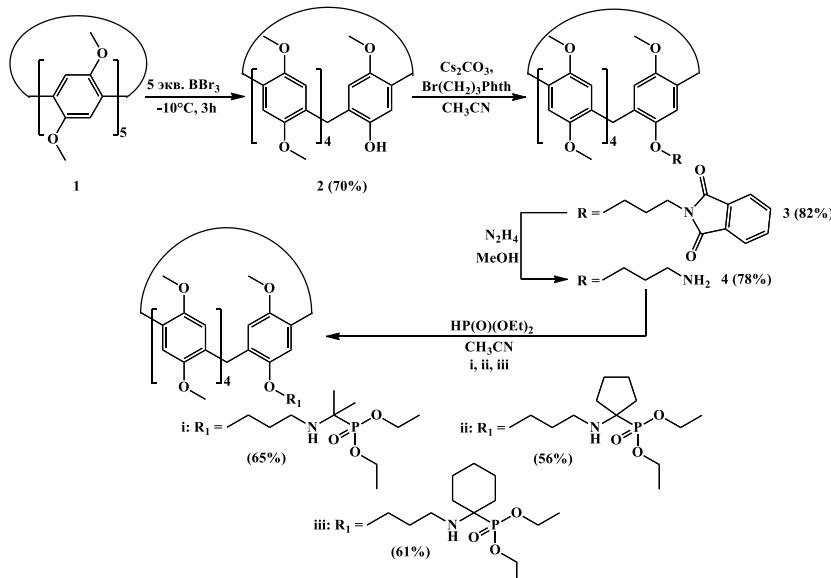
Гилязева А.И., Назарова А.А., Стойков И.И.

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

*ivan.stoikov@mail.ru*

Соединения, имеющие в своём составе амино- и фосфорильные группы представляют интерес для создания рецепторов, способных связывать биологически значимые молекулы. Аминофосфонаты и аминофосфоновые кислоты хорошо известны как структурные аналоги аминокислот. Объединение макроциклической платформы пиллар[5]арена и  $\alpha$ -аминофосфонатных фрагментов позволит создать новые селективные рецепторы для разделения и очистки органических кислот. Удобным способом получения таких соединений является реакция Кабачника-Филдса.

В данной работе был предложен новый подход к синтезу монозамещённого пиллар[5]арена, содержащего фталимидный фрагмент. Было показано влияние растворителя на скорость протекания вышеназванной реакции, в ходе которой был получен ряд новых монофункционализированных пиллар[5]аренов, содержащих аминный и  $\alpha$ -аминофосфоантные фрагменты.



Структура синтезированных производных была доказана комплексом физических методов ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК спектроскопией и масс-спектрометрией.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-03-02877).*

## НОВЫЕ ОПАСНОСТИ В ЗАСОРЕНИИ КОСМОСА

Жигалова А.И.

*Муниципальное бюджетное образовательное учреждение «Гимназия №5», город Королёв  
(микрорайон Юбилейный), Московская область, Россия*

*aelita99@list.ru*

При изучении засорения околоземного космического пространства обычно определяют количество космического мусора, а потом вычисляют среднюю пространственную плотность [1]. Однако космический мусор распределён на орbitах неравномерно [2]. Особенности орбитального движения космических объектов усиливают неравномерность распределения космического мусора вокруг Земли. Из-за этих особенностей возможны две сингулярности плотности космического мусора в околоземном пространстве [3,4]. Во-первых, может появиться, даже уже появилось, кольцо космического мусора, подобное кольцу Сатурна. Это результат засорения экваториальных орбит, прежде всего, геостационарных. Международные организации уже с трудом находят места для новых спутников связи на геостационарных орбитах. Во-вторых, это полярные шапки космического мусора, подобные марсианским полярным ледникам. Эти опасные области засорения пока себя сильно не проявляют, потому что являются следствием засорения полярных орбит, на которых спутников пока не очень много. Но при засорении полярных орбит эти две области над полюсами Земли будут сильно препятствовать движению космических аппаратов по полярным орбитам. Промежуточные орбиты, между экваториальными и полярными, не так критичны с позиции засорения, но вызывают всё большее опасение у международных сообществ.

1. Жигалова А.И. Модели распределения космического мусора вокруг Земли // Материалы XXVI Международной конференции "Применение инновационных технологий в образовании" 24-25 июня 2015 г. - ИТО-Троицк-Москва / Ред. группа Алексеев М.Ю. и др. - С.414-415. - <http://www.ito.mosedu.ru/files/materials.pdf>
2. Жигалова А.И. Опасность засорения экваториальных и полярных орбит // 9-й Всероссийский форум студентов аспирантов и молодых учёных «Наука и инновации в технических университетах» - Санкт-Петербургский государственный политехнический университет (НИУ), 27-30 октября 2015. - 264 с. – С.129-131. - Диплом за лучший секционный доклад. - <http://www.ysc.spbstu.ru/forum2015/Forum2015.pdf>
3. Жигалова А.И. Газодинамическая модель плотности космического мусора // 58-я Научная конференция МФТИ с международным участием, 23-28 ноября 2015. – Факультет аэромеханики и летательной техники (ФАЛТ), г. Жуковский Московской области. Доклад №1040. – С.60. – Диплом победителя. - <http://conf58.mipt.ru/static/prog.pdf>
4. Жигалова А.И. Опасность засорения экваториальных и полярных орбит // XI Международная научно-практическая конференция «Пилотируемые полёты в космос». – Москва, Звёздный городок, Центр полигонов космонавтов им. Ю.А.Гагарина, 10-12 ноября 2015 г. – С.43. - [http://www.msf2015starcity.com/wp-content/uploads/2015/01/Programma-11-MNPK\\_2015-28.101.pdf](http://www.msf2015starcity.com/wp-content/uploads/2015/01/Programma-11-MNPK_2015-28.101.pdf)

## ВЫДЕЛЕНИЕ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ КОМПОНЕНТ ИЗ ДАННЫХ ПО ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Заикин А.А.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань, Россия*

*Kaskrin@gmail.com*

Рассматривается задача выделения экспоненциальных компонент из временного ряда, построенного по данным ЯМР-спектроскопии различных образцов пород. Основная модель состоит в том, что исследуемый временной ряд представляет собой сумму убывающих экспоненциальных компонент с неизвестными амплитудой и временем релаксации, а также белого шума, искажающего сигнал. Количество экспоненциальных компонент также неизвестно, и должно быть оценено. Сложность прибавляет то, что задача является плохо обусловленной, то есть даже значительное возмущение параметров экспоненциальных компонент слабо сказывается на данных.

В качестве меры близости полученного решения используется сумма квадратов отклонений модельной кривой от исходного временного ряда.

Для решения поставленной задачи потребовались некоторые допущения. Именно, предполагается, что амплитуда компонент больше некоторой константы, время релаксации различных компонент различается не менее, чем на некоторую константу, а само количество компонент ограничено некоторым числом, зависящим от размера данных.

Большой объем данных, а также плохая обусловленность задачи не позволяют применять метод градиентного спуска и прочие стандартные методы оптимизации без сколько-нибудь хорошего начального приближения. Алгоритм построения начального приближения стандартный: из временного ряда по очереди находятся и исключаются экспоненциальные компоненты. Замечательность работы состоит в том, что показано, что этот метод сходится.

Была написана программа на языке R, соответствующая разработанному алгоритму. Работа программы была проверена на сгенерированных данных при различных значениях.

## ВОЗМУЩЕНИЕ ТРЕУГОЛЬНЫХ СИГНАЛОВ ГАРМОНИКАМИ РЯДА ФУРЬЕ

Зайцев А.А., Бирюкова К.С.

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),  
Москва, Россия*

*Bon-ne@mail.ru*

Работа посвящена устойчивости треугольных сигналов возмущениями по различным гармоникам ряда Фурье. Нашей задачей является исследование практической реализации пилообразного напряжения. На практике пилообразное напряжение можно получить в виде суммы гармонических колебаний, реализуемых, например в LC-контуре или в RC-контуре. Пилообразный сигнал был разложен в ряд Фурье. После разложения сигнала в качестве возмущения к исходному пилообразному сигналу последовательно добавляли по одной гармонике в виде соответствующего члена ряда Фурье. Целью было определение влияния внешних воздействий на невозмущённый сигнал по суммирующим гармоникам. Анализ показывает, что первая гармоника наиболее критична к возмущающему внешнему воздействию. Фактически она превращает треугольный сигнал в усечённый синусоидальный, однако не воздействует на вертикальный спад пилообразного напряжения. Номер гармоники определяет число полуволн, который в идеальном случае должен представлять прямолинейный наклонный отрезок. Возникает задача определения номера гармоники, при котором прямолинейный фронт возрастания сигнала практически не будет нарушаться в геометрическом смысле. Для этого последовательно было проведено моделирование воздействия на пилообразное напряжение возмущений по 1-й, 10-й и т.д. После проведения моделирования различных возмущений был сделан вывод, что возмущающее действие гармоники с номером 10 ощущается визуально, но тоже не очень сильное. На практике полученный результат означает, что нет смысла аппроксимировать пилообразный сигнал рядом Фурье с более чем 100 членами. Реально для приближённой реализации пилообразного сигнала достаточно 10-50 членов ряда Фурье.

1. Зайцев А.А Гармоники ряда Фурье// Материалы 8-го Всероссийского форума студентов и аспирантов «Наука и инновации в технических университетах». СПб 2014.
2. Зайцев А.А. Возмущение треугольных сигналов гармониками ряда Фурье. Московская молодёжная научно-практическая конференция «Инновации в авиации и космонавтике – 2015».

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ЭПОКСИАНГИДРИДНОГО СВЯЗУЮЩЕГО ДЛЯ СТЕКЛОПЛАСТИКОВ.

Залялова Г.М., Хамидуллин О.Л.

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

*gelyusya.zalyalova@mail.ru*

Свойства полимерных композиционных материалов зависят от множества факторов, среди которых полноценность отверждения матрицы является одним из наиболее значимых. Поэтому получение в процессе отверждения матрицы с заданными свойствами является актуальной задачей. В настоящее время существуют множество способов проанализировать поведения связующего в процессе его отверждения. Наиболее широко применяемыми процедурами определения кинетических параметров реакции является подбор модели и безмодельный анализ [1].

Кинетическая модель строилась в специализированном ПО Thermokinetics3 (NETZSCH). Входные данные для моделирования были получены на приборе DSC 204 F1. Анализ нарастания вязкости проводился на динамическом механическом анализаторе DMA Q800.

Предварительный анализ кинетики отверждения систем показал, что энергии систем на основе промышленного катализатора 2МИ, несколько выше, чем на основе нового катализатора Ф15, который был синтезирован нами ранее [2]. При изучении времен жизни систем было обнаружено, что система на основе катализатора Ф15, проявляет большую активность при повышенных температурах, а при пониженных наоборот обладает высокими временами жизни. Данный факт положительно сказывается на технологичности применения данного катализатора. Исследования времен жизни позволило подобрать первую стадию отверждения таким образом, чтобы избежать внутренних напряжений. Была построена модель реакции отверждения связующего. Было смоделировано поведение связующего в процессе отверждения по выбранному режиму. Построенная модель позволила определить достаточное время отверждения на втором этапе. Анализ теплофизических характеристик отверженного композита показал достоверность прогнозирования. Проводились механические испытания композитных образцов на сжатие. Композитные образцы, отверженные по выбранному режиму, показали значение прочности на сжатие равное 160 МПа, модуля упругости 35 ГПа и температуры стеклования 124°C.

1. R.B. Prime, C. Michalski, C.M. Neag Kinetic Analysis of a Fast Reacting Thermoset System. *Thermochimica Acta*, 2005, **429**, 213.
2. L.R. Amirova, A.R. Burilov, L.M. Amirova, I. Bauer, W.D. Habicher Kinetics and mechanistic investigation of epoxy-anhydride compositions cured with quaternary phosphonium salts as accelerators. *Journal of Polymer Science Part A : Polymer Chemistry*, 2016, **54**, 1088.

## СООТНЕСЕНИЕ СИГНАЛОВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ БЫЧЬЕГО ИНСУЛИНА ПО ДАННЫМ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ

Згадзай Ю.О., Ефимов С.В., Клочков В.В.

Институт физики К(П)ФУ, Казань, Россия

*yurchubuk@yandex.ru*

В природе существует несколько природных разновидностей гормона инсулина, а также разработано большое число мутантных форм, которые активно используются в фармакологии в настоящее время. Все эти виды различаются по биохимическим свойствам и по их биологической активности. Человеческий инсулин является незаменимым лекарством для больных сахарным диабетом, однако его действие прекращается довольно быстро, поэтому необходимо исследовать другие разновидности инсулинов с целью создания новых лекарственных препаратов. Для осуществления данной задачи необходимо знать структуру и динамику соединения в растворе, в условиях, приближенным к человеческим. Наилучшим методом для этих целей является спектроскопия ЯМР высокого разрешения.

В качестве объекта исследования был выбран бычий инсулин. Для соотнесения сигналов использовались двумерные гомоядерные эксперименты TOCSY, NOESY, а также гетероядерные спектры HSQC. Спектры были зарегистрированы на спектрометре BRUKER Avance III 700; температура образца составляла 20 и 35°C для устранения перекрытия сигналов. Построение структуры осуществлялось с помощью программы XPLOR по данным из ЯЭО (NOESY) экспериментов.

Используя спектры было произведено соотнесение сигналов в спектрах NOESY и TOCSY при различных температурах. В спектрах ЯЭО наблюдаются кросс-пики не только между протонами NH– $\text{H}\alpha$  соседних групп, но также через 2 или 3 аминокислоты, что является признаком формирования спиральной структуры [1]. Таким образом было установлено наличие 3 спиралей: двух в А-цепи с 3 по 7 и с 12 по 18 остатки, и в Б-цепи с 8 по 18 остаток. Также из анализа распределения химических сдвигов было сделано предположение о наличии  $\beta$ -складки в Б-цепи с 24 по 27 остаток. Данный факт может означать наличие олигомеров в растворе.

Для подтверждения данного факта был зарегистрирован спектр DOSY, по данным которого были вычислены время жизни и характерные размеры молекулы. Коэффициент диффузии для инсулина составил  $D_{bi} = 9,7 * 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ , а для ДСС –  $D_{DSS} = 4,47 * 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$ . Такое значение коэффициентов диффузии позволяет предполагать наличие олигомерных форм, однако полученные размеры не дают четкой информации об их наличии. Для точного установления олигомерных форм были зарегистрированы спектры NOESY при различной концентрации белка. Изменение концентрации вызывало изменение коэффициента диффузии, что в совокупности с другими данными является дополнительным подтверждением олигомеризации инсулина.

1. N.B. Olsen Investigations of Structure and Dynamics of Insulin Mutants using NMR Spectroscopy : дис. ... канд. физ.-мат. Наук. Roskilde University, 1996. 63 р.
2. W. Bocian et al NMR Structure of Biosynthetic Engineered Human Insulin Monomer B31<sup>Lys</sup>-B32<sup>Arg</sup> in Water/Acetonitrile Solution. Comparison with the Solution Structure of Native Human Insulin Monomer. *Biopol.*, 2008, **89**, 320-330.

## МОРФОЛОГИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА

Зиннатуллин А.Л., Гумаров А.И., Вахитов И.Р., Янилкин И.В., Харинцев С.С., Юсупов Р.В.

*Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

*almaz.zinnatullin@gmail.com*

Синтез однослойной аллотропной модификации углерода – графена – и изучение его свойств [1] породили значительный интерес к двумерным материалам. Такие материалы обладают уникальными свойствами, недостижимыми или даже недопустимыми для их объемных аналогов. Среди двумерных материалов ученые выделяют семейство дихалькогенидов переходных металлов (ДХПМ). Эти соединения с общей формулой  $MX_2$ , где  $M$  – металл переходной группы (Mo, W, Nb...) и  $X$  – элемент из группы халькогенов (S, Se, Te...), представляют собой слоистые кристаллы, где слои сцеплены между собой силами Ван-дер-Ваальса. Каждый монослой представляет собой "сендвич", в котором атомы переходного металла находятся между атомами халькогена. Эти соединения уникальны тем, что в виде монослоя являются прямозонными полупроводниками, в то время как их объемные аналоги являются непрямозонными. Предполагается, что эти материалы найдут активное применение в таких областях науки, как спинtronика, валлейтроника, вольтаика и т. д. Поэтому чрезвычайно важными оказываются разработка воспроизведимого метода синтеза сверхтонких пленок ДХПМ и изучение свойств таких материалов. Дисульфид молибдена ( $MoS_2$ ) является наиболее изучаемым соединением из ДХПМ [2].

В данной работе представлены результаты синтеза и исследований сверхтонкой пленки дисульфида молибдена на подложке из плавленого кварца. Образец был получен сульфидацией предварительно осажденной методом молекуллярно-лучевой эпитаксии пленки молибдена толщиной 4 нм. Элементный и фазовый состав были изучены методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, а также были исследованы спектры пропускания и фотоиндуцированного поглощения изучаемых образцов.

1. K.S. Novoselov et al, *Science*, 2004, **306**, 666-669.
2. R.Ganatra, Q. Zhang, *ACS Nano*, 2014, **8**, 4074-4099.

## КОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ СО СТИРОЛОМ В ПРИСУТСТВИИ ПОЛИМЕРНОГО АГЕНТА ОБРАТИМОЙ ПЕРЕДАЧИ ЦЕПИ

Зотова О.С., Куликов Е.Е., Лудин Д.В., Дукова С.В.

*Нижегородский государственный университет  
им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*oksana\_zotova@myrambler.ru*

В настоящее время наибольший интерес для химии полимеров представляет разработка новых методов синтеза амфифильных сополимеров различной структуры, способных к самоорганизации на поверхности. Амфифильные сополимеры нашли широкое применение в молекулярной биологии, медицинской диагностике, радиоиммунотерапии и процессах тонкой химии. Наиболее эффективным, простым и универсальным приемом радикальной полимеризации, позволяющим синтезировать полимеры различного строения, в том числе и амфифильные, с заданной молекулярной массой и узким молекулярно-массовым распределением, является псевдоживая радикальная полимеризация по механизму обратимой передачи цепи (ОПЦ). Целью данной работы являлось изучение контролируемого синтеза стирола с акриловой кислотой в присутствии полимерного агента обратимой передачи цепи – полистиролбензилдитиобензоата, а также изучение кинетики смачивания и процессов самоорганизации макромолекул полученных амфифильных сополимеров в монослоях Ленгмюра. Показано, что при сополимеризации акриловой кислоты со стиролом в присутствии полимерного ОПЦ агента наблюдаются типичные признаки контролируемой радикальной полимеризации – отсутствие гель-эффекта, линейные зависимости среднечисловой молекулярной массы от конверсии, низкие параметры полидисперсности. Была получена кривая состава сополимера и определены относительные активности мономеров, которые показывают, что активность акриловой кислоты значительно выше активности стирола. Была изучена самоорганизация синтезированных амфифильных сополимеров на границе раздела вода-воздух. Доказана способность полученных сополимеров к образованию устойчивый монослоев на границе вода-воздух.

## МЕТОДИКА ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССА ДЕГРАДАЦИИ ЖЕЛЕЗОБЕТОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВЛАГИ

Ибрагимова А.А., Каюмов Р.А.

*Институт строительства, КГАСУ, Казань, Россия  
Строительный факультет, Казань, Россия*

*aigul-ibragimova92@mail.ru*

В докладе представлена методика описания процесса деградации железобетонных конструкций в условиях агрессивной среды. При наличии перепада влажности происходит фильтрации влаги через бетон, что влечет за собой его выщелачивание снижение прочности. Определение закономерностей влияния температуры и влажности на свойства материала дает возможность оценки долговечности бетона.

- Закон диффузии влаги через бетонную стенку примем в виде:

$$\lambda \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} = \frac{\partial W}{\partial t}, \quad W = W(x, t) \quad (1)$$

Здесь  $W$  – влажность бетона (в %);  $\lambda$ - коэффициент диффузии (в  $\text{см}^2/\text{сут}$ );  $x$ -координата по толщине колонны (в см);  $t$ - момент времени (в сут).

- Задачу выщелачивания гашеной извести опишем с помощью уравнения Фика:

$$D(W) \cdot \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} = \frac{\partial Q}{\partial t}, \quad Q = Q(x, t) \quad (2)$$

Здесь  $Q$ – уровень выщелачивания, который примем в виде отношения массы потерянной гашеной извести к максимально возможной ее выщелоченной массе, множитель  $D(W)$ - это коэффициент выщелачивания, зависящий от влажности бетона.

- Тогда предельную нагрузку для колонны определим по формуле:

$$P^* = P_b^* + P_a^* = \int_{A_b} R_b(Q) \cdot dA + R_s \cdot A_s \quad (3)$$

Здесь  $A_b$  И  $A_s$  – соответственно площадь поперечного сечения бетонного элемента и арматуры ( $\text{см}^2$ ),  $R_b(Q)$  и  $R_s$  - соответственно расчетное сопротивление бетона сжатию и арматуры( $\text{кг}/\text{см}^2$ ). Задачи (1)-(2) решаются численно методом конечных разностей. Приводятся зависимости  $W$ ,  $Q$  от времени и по толщине колонны. Получена также зависимость предельной нагрузки  $P^*$  от времени.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 15-08-06018 и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект №1660 государственного задания в сфере научной деятельности по Заданию № 2014/58 за 2016*

## УПРАВЛЕНИЕ ПЕРЕВОЗКАМИ ПРОМЫШЛЕННЫХ ГРУЗОВ ПОСРЕДСТВОМ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Иванова Е.Д., Ушкова Т.В.

*Набережночелнинский институт КФУ, Набережные Челны, Россия*

*psihonaff@mail.ru*

В настоящее время изготавливается большое количество различной пищевой промышленности, которую в свою очередь необходимо распределить по пунктам выдачи в кратчайшие сроки. Во избежание потери клиентов магазин должен быть своевременно обеспечен товарами, кроме того большинство пищевых продуктов являются скоропортящимися. Всё чаще возникают проблемы своевременной доставки грузов: водитель или попадает в пробку, или застревает из-за геометрии дорожной сети, или же выбранный маршрут становится труднопроходимым в связи с погодными условиями.

Решением данных проблем в области планирования маршрутов доставки промышленных грузов может являться разработка имитационной модели города. Имитационное моделирование позволяет учесть все многообразие транспортных ситуаций и их стохастическое проявление, что делает этот способ моделирования наиболее реалистичным.

На начальном этапе для определения оптимальных маршрутов была построена матрица корреспонденций. Данные матрицы являются важнейшей информацией, которая характеризует распределение транспортных потоков на территории города. В качестве параметров модели были взяты: интенсивность движения на участках, время затраченное на проезд данного участка и затраты на ГСМ. Главным критерием оптимизации является минимизация времени доставки товаров до пунктов выдачи. С помощью оптимизационного аппарата VISUM была создана новая матрица корреспонденции, после анализа которой, были получены оптимальные маршруты. На рисунке 1 представлен полученный оптимальный маршрут доставки товара в пункты приема магазинов Челны - Хлеб.



Рисунок 1. – Полученный маршрут доставки товара в магазины Челны – Хлеб.

На основе полученных оптимальных маршрутов посредством построения матрицы корреспонденции была построена имитационная модель с использованием программного продукта PTV VISSIM. При построении имитационной модели учитывается геометрия дорог, настраивается возможность проходимости транспорта по определенному участку дорожной сети. Кроме того, учитываются погодные условия, т.е. данные факторы будут влиять на поведение имитационного движения потока на различных участках сети.

## ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ФОСФОРИЛИРОВАНИЯ НЕПРЕДЕЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Ильин А.В., Фатхутдинов А.Р., Салин А.В.

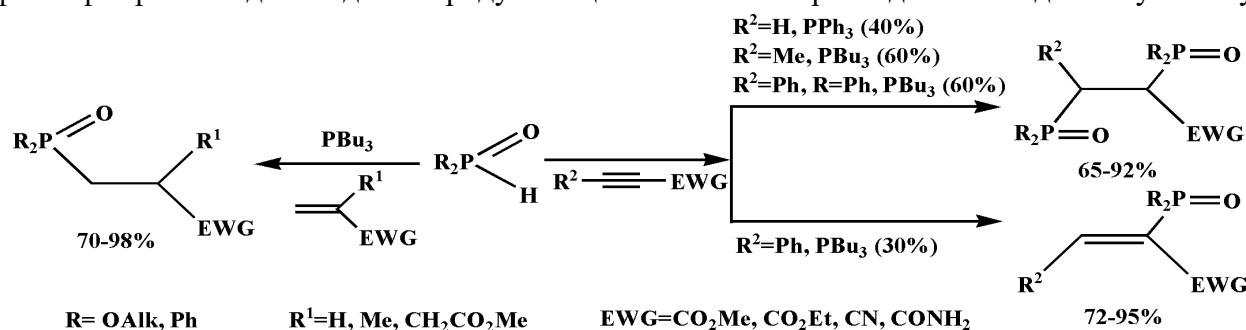
*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

*Antonilin.1989@mail.ru*

Фосфин-катализируемые реакции в настоящее время находят все большее применение в синтетической химии. В данной работе изучено фосфин-катализируемое присоединение гидрофосфорильных соединений по кратным связям активированных алkenов и алкинов. В результате исследования был получен ряд соединений с новой связью фосфор-углерод.

В настоящей работе были изучены реакции диалкилфосфитов, фосфонитов и вторичных фосфиноксидов с различными активированными алкенами, катализируемые третичными фосфинами. Показано, что каталитическая активность третичных фосфинов значительно превышает таковую для нуклеофильных третичных аминов, таких как DABCO и DBU. Данные реакции протекают в ацетонитриле при комнатной температуре и приводят к продуктам присоединения с высокими выходами. Оптимизированы условия проведения реакций, изучено влияние заместителей при атоме фосфора и кратной связи активированного алкена. Установлено, что реакция является толерантной к наличию длинноцепочечных алкильных групп в гидрофосфорильном соединении.

При использовании в качестве непредельного субстрата этилового эфира фенилпропиоловой кислоты в присутствии трибутилфосфина были получены продукты  $\alpha$ -присоединения гидрофосфорильных соединений по  $C\equiv C$  связи, свидетельствуя об изменении направления присоединения по сравнению с классическими реакциями Михаэля. В реакции с дифенилфосфиноксидом выделен продукт вицинального бисприсоединения к данному алкину.



При проведении реакций диэтилфосфита с метилпропиолатом и метилтетролатом в присутствии третичных фосфинов оказалось, что независимо от молярного соотношения реагентов основным продуктом является продукт вицинального присоединения двух молекул диалкилфосфита. Механизмы процессов обсуждаются в докладе.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 15-33-20067 а).*

**АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДОФАМИНА  
НА ПЛАНАРНОМ УГЛЕРОДНОМ ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ  
СИСТЕМОЙ ЗОЛОТО-КОБАЛЬТ, В УСЛОВИЯХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО  
ИНЖЕКЦИОННОГО АНАЛИЗА**

Ильина М.А., Челнокова И.А., Лексина Ю.А., Шайдарова Л.Г.

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

*Degteva\_marina@rambler.ru*

Разработка быстрых и простых методов определения концентраций дофамина (ДА) представляет несомненный интерес. Содержание ДА в биологических жидкостях необходимо контролировать при диагностике различных заболеваний. Так, например, по содержанию ДА в крови диагностируют и лечат такие заболевания как болезнь Паркинсона и шизофрения. Для экспресс-детектирования органических соединений часто используют различные электрохимические детекторы. ДА электрохимически активен, но определение этого катехоламина на немодифицированных углеродных электродах затруднено в связи его низкой концентрацией в биологических жидкостях. Использование химически модифицированных электродов (ХМЭ) с каталитическим откликом позволяет улучшить чувствительность и селективность вольтамперометрического определения органических соединений в стационарных условиях и их амперометрического детектирования в проточных условиях.

Изучена электрокатализическая активность бинарной системы золото-cobальт, осажденной на поверхности планарного углеродного электрода (Au-Co-ПЭ), при окислении ДА в стационарном режиме и в условиях последовательного инжекционного анализа (SIA).

Установлена каталитическая активность бинарной системы Au-Co по отношению к ДА. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшение перенапряжения окисления субстратов на ХМЭ по сравнению с немодифицированным электродом.

Показана возможность использования электрода Au-Co-ПЭ в качестве амперометрического детектора в условиях SIA. Изучено влияние гидродинамических и электрохимических параметров проточной системы на величину аналитического сигнала. На основе полученных данных установлены рабочие условия регистрации SIA-сигнала на ХМЭ. Линейная зависимость SIA-сигнала от концентрации ДА наблюдается в интервале от  $1 \times 10^{-9}$  до  $1 \times 10^{-3}$  М. Следует отметить высокую сходимость результатов анализа в проточной системе ( $S_r < 2.0\%$ ).

## ПРЯМОУГОЛЬНАЯ ПЛАСТИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОПЕРЕЧНОЙ НАГРУЗКИ

Исаева В.В., Кузнецов С.А.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань, Россия*

*skoal@kpfu.ru*

В работе получено решение задачи о напряжённо-деформированном состоянии прямоугольной пластины под действием поперечной нагрузки. На основе теории Кирхгофа-Лява с использованием аппарата теории обобщённых функций предварительно получено точное аналитическое решение в рядах Фурье о прогибах шарнирно опёртой пластины под действием произвольно расположенной сосредоточенной силы. Это решение используется для получения функции прогибов пластины, находящейся под действием поперечной нагрузки распределённой произвольным образом по площадкам любых форм и положений, в том числе многосвязным. Преимущество использованного подхода заключается в том, что для нового закона распределения нагрузки не требуется снова решать сложную краевую задачу, процесс построения решения сводится к простому вычислению (аналитическому или численному) двойного определённого интеграла по области приложения нагрузки. Сходимость рядов Фурье исследована численно. Приведены результаты решения некоторых конкретных задач в виде графиков и таблиц. В частных случаях показано совпадение результатов с известными в литературе [1].

1. И.А. Биргер, Я.Г. Пановко. Прочность. Устойчивость. Колебания. Справочник в 3-х томах. Том 1. М.: Машиностроение, 1968, 832 с.

## СВЯЗЬ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ И ВЫСОТЫ БАРЬЕРА ВРАЩЕНИЯ

Исламов Д.Р.<sup>a</sup>, Штырлин В.Г.<sup>a</sup>, Федягин И.В.<sup>b</sup>, Лысенко К.А.<sup>b</sup>, Катаева О.Н.<sup>a</sup>, Серов Н.Ю.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова РАН, Москва, Россия

*daut1989@mail.ru*

Исследованы кристаллические структуры комплексов с переносом заряда коронен – F<sub>4</sub>TCNQ 2:1 (**I**) и коронен – F<sub>4</sub>TCNQ – MeCN 1:1:1 (**II**) при температурах от 100 до 293 К. Анализ тепловых колебаний позволил выявить доминирование динамической природы разупорядоченности коронена. Следует отметить, что анизотропия тепловых колебаний атомов углерода коронена значительно более выражена в соединении **I**, чем в **II** (рис. 1).

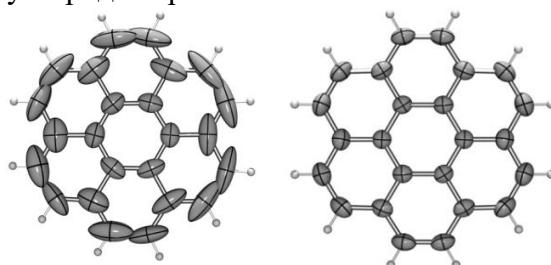


Рисунок 1. – ORTEP-диаграмма молекул коронена при 293 К в соединениях **I** и **II**.

Оценка высоты барьера вращения с помощью TLS анализа показала, что несмотря на схожие межмолекулярные взаимодействия коронена, величины барьеров вращения коронена в соединениях **I** и **II** сильно различаются, составляя соответственно 8.3 и 65 кДж/моль при 293 К. Установить зависимость барьера вращения от силы межмолекулярных взаимодействий не удалось. Как следует из таблицы 1, где представлены данные по высоте барьера вращения коронена относительно оси симметрии шестого порядка, выделяются три случая по расположению

коронена: 1) в общем положении; 2) в частном положении без разупорядочивания симметрией; 3) в частном положении с разупорядочиванием симметрией. Из таблицы 1 видно, что барьер вращения при расположении коронена в случаях 1 и 3 ниже, чем в случае 2. Такая же закономерность обнаруживается для бензола и цикlopентадиенильного кольца в металлоценах.

Таблица 1. – Избранные параметры кристаллов, содержащих коронен.

Кристалл	Группа симметрии	Z' коронена	Положение на эл. симметрии	Высота барьера вращения, кДж/моль	Случай
<b>I</b>					
Коронен – TCNQ 3:1 [1]	C2/c	1	–	8.3-14	1
Коронен – [Ni] 2.5:1 [1]	P-1	1.5	–	13.7	1
Коронен	P-1	2.5	–	7	1
	P2 <sub>1</sub> /n	0.5	<i>I</i>	27	2
<b>II</b>	P2 <sub>1</sub> /n	0.5	<i>I</i>	65-77	2
Коронен – F <sub>4</sub> TCNQ 1:1 [2]	P-1	0.5	<i>I</i>	30	2
Коронен – TCNQ 1:1 [3]	P2 <sub>1</sub> /c	0.5	<i>I</i>	17	2
Коронен – Me <sub>2</sub> TCNQ [2]	P2 <sub>1</sub> /n	0.5	<i>I</i>	24	2
Коронен – (MeO) <sub>2</sub> TCNQ [2]	P-1	0.5	<i>I</i>	23	2
Коронен – Mo <sub>6</sub> Cl <sub>14</sub> <sup>2-</sup> [4]	Pm-3m	1/8	4	15	3

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

- Yoshida, Y. et al. *Chem. - Eur. J.*, 2013, **19**, 12313-12324.
- Yoshida, Y. et al. *Cryst. Growth Des.*, 2015, **15**, 1389-1394.
- Chi, X. et al. *Chem. Mater.* 2004, **16**, 5751-5755.
- Yoshida, Y. et al. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2014, **24**, 3871-3878.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ БАЗИРОВАНИЯ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Казаргельдинов Р.Р.

*Набережночелнинский институт Казанского (Приволжского) федерального университета, Набережные Челны, Россия*

*ramilrk@mail.ru*

Развитие техники связано с непрерывным повышением требований к точности машин, включая ее сохранение под нагрузкой и во времени. Повышение точности станков увеличивает их производительность благодаря возможности уменьшения числа рабочих проходов, оптимизации режимов обработки, уменьшения трудоемкости окончательных операций. Повысить эффективность подготовки производства возможно за счет прогнозирования точности обработки. Однако существующие методики проектирования инструмента и оснастки основаны на идеализированных моделях, что не позволяет учитывать фактическое состояние модулей технологической системы.

Математическая модель базирования модулей технологической системы заключается в определении положения систем координат всех модулей, входящих в цепь в единой системе координат. Для этого необходимо последовательно встраивать один модуль в другой с пересчетом координат точек в общую систему координат [1].

Чтобы определить отклонения модулей технологической системы, необходимо проанализировать структуру модуля и механизм их базирования. На каждом модуле выделяются установочная, направляющая и упорная базы, состоящие из массива точек и триангуляционных сеток граней. Контакт точек и граней модулей позволит выполнить моделирование процесса их базирования. Это позволит на этапе подготовки производства планировать точность обработки как это показано в [2] только на более глубоком уровне.

1. Кондрашов А.Г., Сафаров Д.Т. Прогнозирование точности при обработке резанием. *Известия высших учебных заведений. Машиностроение*, 2014, **12(657)**, 6369.
2. Чемборисов Н.А., Кондрашов А.Г. Компьютерная модель процесса обработки торцов зубьев червячной одновитковой фрезой. *СТИН*, 2008, **5**, 11-13.

## ОЦЕНКА ТОКСИЧНОСТИ ГИДРОХЛОРИД ПОЛИАЛЛИЛАМИНА НА ЭУКАРИОТИЧЕСКИЕ КЛЕТКИ

Камалиева Р.Ф., Тарасова Е.Ю., Рожина Э.В., Фахруллин Р.Ф.

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

*kamalieva1988@list.ru*

Инкапсулирование различных субстратов с применением методики layer-by-layer актуально, в том числе для доставки лекарств [Ghost, 2006]. Гидрохлорид полияллиамина (PAH (poly(allylamine hydrochloride) Mw 70 kDa) представляет собой катионный полиэлектролит, полученный полимеризацией аллиламина. Согласно литературным данным этот полиэлектролит часто используется в сочетании с анионным полиэлектролитом PSS поли(стирол сульфонат натрия) для образования пленки из разноименно заряженных элементов [Antipov, 2003]. В наших исследованиях основное внимание уделяется оценке биосовместности и генотоксичности полиэлектролита PAH для клеток человека.

Культура клеток А549 adenокарциномы легких человека были культивированы в модифицированной среде ДМЕМ (Sigma-aldrich), дополненной с добавлением 10% инактивированной нагреванием фетальной бычьей сыворотки (FBS) (Sigma), 100 ед/мл пенициллина и 100 мкг/мл стрептомицина (Sigma). Клетки поддерживали при 37 °C в увлажненной атмосфере 95% воздуха и 5% CO<sub>2</sub>.

В работе были использованы колориметрические методы определения жизнеспособности эукариотических клеток карциномы легкого человека А549: мтт-тест, восстановление ресазурина и т.д.. Размеры и дзета потенциал клеток после покрытия PAH Sigma-aldrich (Сент-Луис, Миссури, США) определяли на фотонном корреляционном спектрометре динамического рассеяния света ZetaSizer Nano (фирмы «Malvern», Великобритания).

Наши результаты показали, что полияллиамин гидрохлорид не оказывает токсического эффекта на клетки человека в исследованном диапазоне концентраций от 5,0 до 20,0 мкг на 10<sup>-5</sup> клеток.

1. A. Antipov, D. Shchukin, Y. Fedutik, A. Petrov, G. Sukhorukov, H. Moehwald. Carbonate microparticles for hollow polyelectrolyte capsules fabrication/ *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*. 2003. 175–183.
2. S.K. Ghost Functional Coatings: by Polymer Microencapsulation. Willey-VCH Verlag GmbH & CoKGaA: Weinheim. 2006. 378 p.

## ПРЕДОРГАНИЗАЦИЯ ИОНОВ Со(II) НА ПЛАТФОРМЕ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОВ

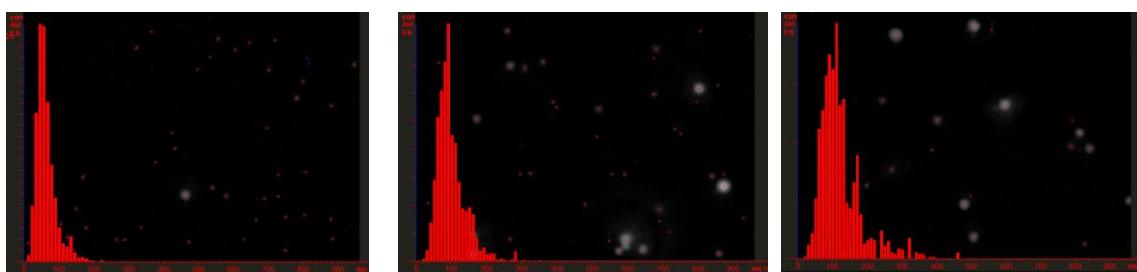
Камбулова С.С., Медведева О.И., Улахович Н.А., Евтюгин В.Г., Кутырева М.П.

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

*Sofya12k@mail.ru*

Возможность получения нанокристаллов кобальта контролируемой формы с узким распределением по размеру может значительно стимулировать развитие магнитных сенсоров и ряда других медицинских диагностических средств.

Первой стадией синтеза наночастиц металлов является стадия предорганизации ионов металла на поверхности стабилизирующей матрицы. Методом насыщения было исследовано комплексообразование в системах ГРПО – Со(II) при варьировании генерации полимера от G=2 до G=4. По данным ИК-спектроскопии во всех системах предорганизация ионов Со(II) происходит за счет координационных взаимодействий с донорным атомом кислорода гидроксильных и карбонильных групп платформы ГРПО. Во всех системах комплексообразование протекает ступенчато с формированием трех основных форм при соотношениях 1:4, 1:10 и 1:15 для ГРПО H20 –Со(II), 1:3, 1:13 и 1:18 в системе ГРПО H30 – Со(II) и 1:18, 1:25, 1:35, 1:57 для ГРПО H40 –Со(II). Методом анализа траекторий движений (NTA) изучены комплексные формы, образующиеся в системах ГРПО H20 – $\text{Co}^{2+}$ , ГРПО H30 –  $\text{Co}^{2+}$  и ГРПО H40 – $\text{Co}^{2+}$ .



Диаграммы распределения частиц в системах ГРПО H20 –Со(II) (1:4), ГРПО H30 – Со(II) (1:18) и ГРПО H40 –Со(II) (1:18) в воде ( $i=15$ )

Установлено, что в системе ГРПО H20 – $\text{Co}^{2+}$  с изменением соотношения от 1:4 до 1:15 наблюдается увеличение гидродинамического диаметра от 60 нм до 100 нм. В системе ГРПО H30 – $\text{Co}^{2+}$  при переходе от 1:3 к 1:18 наблюдается уменьшение гидродинамического диаметра от 100 нм до 85 нм. В системе ГРПО H40 – $\text{Co}^{2+}$  для всех комплексных форм средний гидродинамический диаметр находится в области 95 нм.

## ОПЕРАЦИИ БИГОВКИ И СКЛАДЫВАНИЯ КАРТОНА

Каримова Г.Г.

*КНИТУ им. А. Н. Туполева, Казань, Россия*

*kgg\_1@mail.ru*

Для хранения и транспортировки готового продукта к пункту назначения необходима надежная и экономичная упаковка. Картон является одним из наиболее широко используемых материалов в упаковочной промышленности, поскольку он обладает рядом преимуществ: экологичностью, экономичностью и может быть легко преобразован из плоской формы в коробку. Такие коробки могут быть очень жесткими и выдерживать значительные нагрузки, а достигается это за счет складывания плоской заготовки по заданным линиям. Для облегчения процесса складывания, плоская заготовка прежде, чем быть преобразованной в свой конечный вид, бигуется. Биговка позволяет точно сформировать плоский лист в жесткую трехмерную структуру благодаря расслоению в структуре материала, что снижает ее жесткость при изгибе и способствует более легкому складыванию в конечную форму. В результате получившиеся биги обеспечивают складывание готового изделия вдоль заданной линии без ущерба для прочности. Моделирование процесса складывания является ключевым для проектирования и возможности моделирования процесса упаковки.

## ЯКР АРСЕНИДА МЕДИ (Cu<sub>3</sub>As)

Дуглав А.В, Катков В.И.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия  
Радиофизический факультет КФУ, Казань, Россия*

*vlakotkov@mail.ru*

В работе [1] было показано, что арсенид меди Cu<sub>3</sub>As помимо металлических свойств, проявляет также свойства ионного проводника. Измеренная в работе [1] температурная зависимость электрического сопротивления в диапазоне 50 – 300 К оказалась линейной, что характерно для металлов. Однако на линейной зависимости сопротивления от температуры в диапазоне 200-220 К наблюдалась “ступенька”, происхождение которой авторы не объяснили, хотя и предположили, что она связана с возникновением подвижности ионов.

В настоящей работе предпринята попытка выяснить, действительно ли подвижность ионов, входящих в состав домейкита, имеет отношение к “ступенчатой” особенности в температурной зависимости сопротивления. Методом импульсного ЯМР были получены сигналы спинового эха <sup>63</sup>Cu в интервале температур от 77 до 300 К. Узкая линия ЯКР меди дала возможность получить спектр, используя Фурье-преобразование спинового эха. Полученные спектры были аппроксимированы лоренцевой функцией. В итоге были получены зависимости частоты ЯКР от температуры и полуширины линии от температуры. Квадрупольная частота меди понижается с увеличением температуры во всем исследованном диапазоне температур, такое поведение укладывается в рамки теории Байера. В пределах погрешности измерения никаких аномалий в области температур 200-220 К не наблюдается. Однако наблюдалось аномальное поведение ширины линии ЯКР точно в том же диапазоне температур, что и “ступенька” в температурной зависимости сопротивления. Подскок в ширине линии в диапазоне 190-210 К мы связываем с увеличением амплитуды низкочастотных колебаний соседних ионов, предшествующем их скачкообразному движению, что приводит к почти статическому увеличению разброса ГЭП на ядрах меди и, следовательно, к увеличению ширины линии ЯКР. Почему появление подвижности ионов приводит именно к появлению “ступеньки” в сопротивлении, а не проявляется каким-либо другим образом, мы пока объяснить не можем.

1. Begayev B.B., et al. Electronic structure and lattice dynamics of domeykite Cu<sub>3</sub>As according to nuclear quadrupolar resonance of <sup>75</sup>As and <sup>63</sup>, <sup>65</sup>Cu. *Applied Magnetic Resonance*, 2002, **22(4)**, 577-588.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМОВКИ С ЦЕЛЬЮ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ КОНТАКТНОГО ТРЕНИЯ НА ПРОЦЕСС ЛИСТОВОЙ ШТАМПОВКИ

Кашапова Л.Р., Панкратов Д.Л.

*Набережночелнинский филиал КФУ, Набережные Челны, Россия*

*pishite.lile@gmail.com*

Влияние коэффициента трения между поверхностью заготовки и рабочими частями инструмента было исследовано с помощью компьютерного моделирования в программе AUTOFORM на примере операции формовки выступа под амортизаторы в лонжеронах грузовых автомобилей. [1] Его значение меняется в зависимости от различных факторов: типа операции, материала инструмента и заготовки, от наличия или отсутствия смазки и т.д. [2, 3] Модель для расчетов представлена на рисунке 1.

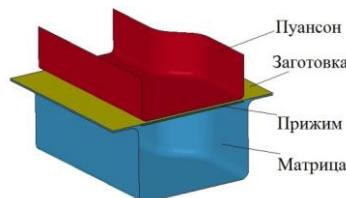


Рисунок 1. – Модель для расчетов в программе AUTOFORM.

Фрагмент результатов моделирования и зоны пластичности программы AUTOFORM представлены на рисунке 2.

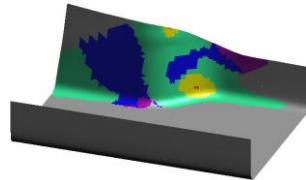


Рисунок 2. – Результаты моделирования при коэффициентах трения в системах:  
пуансон – заготовка  $\mu_{pz}=1,0$  и матрица-заготовка  $\mu_{mz}=1,0$

Согласно полученным в результате моделирования данным были сделаны выводы о прямой зависимости утонения от коэффициента трения, т.е. чем больше коэффициент трения, тем больше утонение, а так же о незначительном влиянии коэффициента трения в данном технологическом процессе на его надежность.

1. Кашапова Л.Р., Панкратов Д.Л., Шибаков В.Г. Методика автоматизированной оценки надежности технологического процесса листовой штамповки на этапе его проектирования. *Фундаментальные исследования*, 2014, **8(7)**, 1533-1538.
2. Ковалев В.Г., Ковалев С.В. Технология листовой штамповки. М.: КНОРУС, 2010, 224 с.
3. Романовский В.П. Справочник по холодной штамповке. 6-е изд., перераб. и доп. Спб.: Машиностроение, 1979. 520 с.

## СИНТЕЗ ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО ПОРОШКА КАРБИДА КРЕМНИЯ. ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО СВОЙСТВ И ХАРАКТЕРИСТИК

Квашина Т.С., Крутский Ю.Л., Чушенков В.И.

*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

*k.tatiana3105@gmail.com*

Неметаллические тугоплавкие соединения находят широкое применение в промышленности из-за высокой твёрдости, теплопроводности и химической инертности. Одним из наиболее важных представителей соединений данного класса является карбид кремния. Он существует в двух кристаллических модификациях: гексагональной (высокотемпературной) и кубической (низкотемпературной).

До недавнего времени карбид кремния с кубической решёткой имел сравнительно небольшое коммерческое использование, однако, в настоящее время в связи с использованием его в качестве гетерогенных катализаторов интерес к нему увеличивается.

В качестве углеродного материала в реакции карботермического восстановления был выбран нановолокнистый углерод (НВУ), характеризующийся высоким значением удельной поверхности ( $\sim 200 \text{ м}^2/\text{г}$ ). Ранее НВУ для синтеза тугоплавких соединений практически не использовался.

Синтез проводился в индукционной печи тигельного типа в среде аргона в течение 20 минут при температуре 1800°C. Экспериментальная убыль массы незначительно превышала расчётную, что связано, по-видимому, с улетучиванием моноокиси кремния из реакционной зоны. В результате получился практически чистый однофазный продукт, карбид кремния низкотемпературной модификации, с небольшим содержанием примесей.

По результатам рastровой электронной микроскопии удалось установить, что частицы полученного порошка агрегированы, имеют форму, близкую к шарообразной. Размеры частиц находятся на уровне 0,4-0,5 мкм. Седиментационный анализ показал, что частицы полученного карбида кремния имеют широкий диапазон дисперсности, что характерно для материалов, полученных по химическим реакциям, а средний размер частиц составил 7,97 мкм.

Результаты исследования текстурных характеристик карбида кремния показывают, что при использовании НВУ удельная поверхность достигает  $19,5 \text{ м}^2/\text{г}$ , удельный объём пор равен  $7,32 \cdot 10^{-2} \text{ см}^3/\text{г}$ , а средний диаметр пор – 15 нм.

**МЕТОДИКА РАСЧЕТА НАГРУЗКИ НА ОТОПЛЕНИЕ ПО СРЕДНЕМЕСЯЧНЫМ  
ТЕМПЕРАТУРАМ НАРУЖНОГО ВОЗДУХА И ТЕПЛОВОЙ НАГРУЗКИ НА ГОРЯЧЕЕ  
ВОДОСНАБЖЕНИЕ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ МНОГОКВАРТИРНЫХ ЖИЛЫХ  
ЗДАНИЙ**

Зиганшин А.Ф., Галимянов И.Д., Кожешкурт О.Н.

*Набережночелнинский институт (филиал) Казанского федерального университета,  
г. Набережные Челны, Россия*

*Oleg3335@ yandex.ru*

Для экономного использования топлива весьма важное значение имеет выбор начала и конца отопительного сезона. Начало и конец отопительного сезона для жилых и общественных зданий обычно регламентируются местными органами власти.

Действующими в нашей стране строительными нормами и правилами продолжительность отопительного периода определяется по числу дней с устойчивой среднесуточной температурой +8 °C и ниже. Эту наружную температуру обычно считают началом и концом отопительного периода  $t_{нк} = 8$  °C. Однако эксплуатационные наблюдения показывают, что нельзя оставлять жилые и общественные здания без отопления в течение продолжительного времени при наружной температуре ниже +10 - +12 °C, так как это приводит к заметному снижению внутренней температуры в помещении и неблагоприятно отражается на самочувствии населения.

Средняя месячная температура наружного воздуха по []:

Таблица 1. – Средняя месячная температура, °C, наружного воздуха.

Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Июль	Август	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Год
-13,9	-13,1	-6,6	3,8	12,4	17,4	19,5	17,5	11,2	3,2	-4,4	-11,1	3

По формуле (1) и таблице 1 определим среднемесячные тепловые нагрузки на нагрев инфильтрующегося воздуха за отопительный период:

$$Q_{II,сenn.} = 0,28 \cdot 3 \cdot 478,8 \cdot 1,2041 \cdot 1 \cdot (20 - 11,2) \cdot 0,8 = 3409,33(Bm) \quad (1)$$

Таблица 2. – Среднемесячные тепловые нагрузки на отопление.

Месяц	Среднемесячные тепловые нагрузки на теплопотери теплопередачей через наружные ограждения		Среднемесячные тепловые нагрузки на нагрев инфильтрующегося воздуха		Среднемесячные тепловые нагрузки на отопление	
	Вт	ккал/ч	Вт	ккал/ч	Вт	ккал/ч
Сентябрь	30976,31	26639,6266	3409,33	2932,0238	34385,64	29571,65

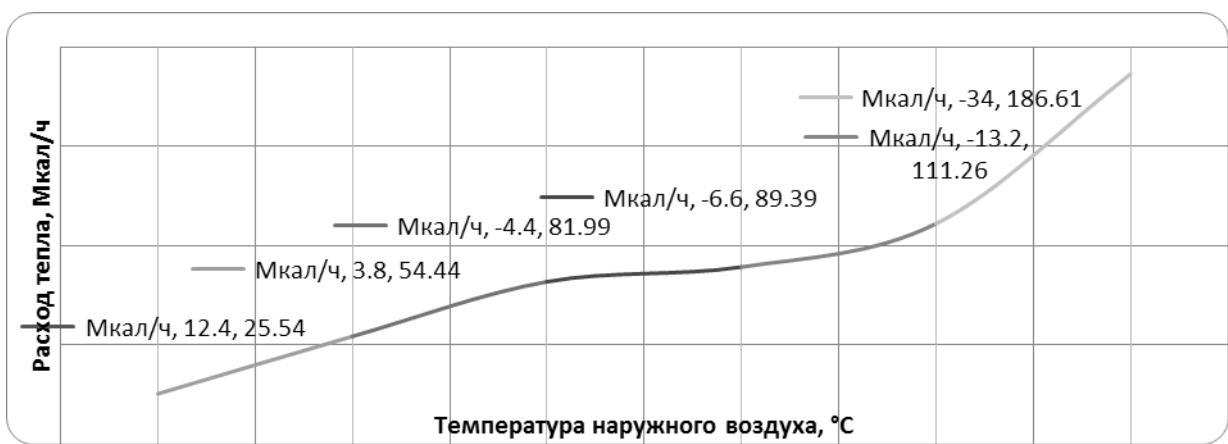


Рисунок 1. – График зависимости расхода тепла на отопление от температуры наружного воздуха.

Горячее водоснабжение относится к круглогодовой нагрузке. Горячее водоснабжение имеет весьма неравномерный характер, как в течение суток, так и в течение недели. Наибольшая нагрузка горячего водоснабжения в жилых домах имеет место, как правило, в предвыходные дни и в выходные дни — в субботу и в воскресенье.

Средненедельная тепловая нагрузка бытового горячего водоснабжения жилых зданий определяется по [6] по формуле:

$$Q_{cp, ned} = \frac{1,3 \cdot m \cdot a \cdot (55 - t_x) \cdot c_b}{n_c}, \quad (2)$$

где:

$a$  - норма расхода горячей воды, на 1 чел. в сутки (по [3] норматив потребления горячей воды на 1 чел. в месяц:  $3,916 \text{ м}^3$ ;

$m$  - количество жильцов;

$c$  =  $4190 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$  - теплоемкость воды;

$t_x$  - температура холодной воды (среднегодовая температура холодной воды по Набережночелнинской ТЭЦ:  $7,68^\circ\text{C}$ );

$n_c$  - расчетная длительность подачи теплоты на горячее водоснабжение (при круглосуточной подаче  $n_c=24 \cdot 3600=86400(c)$ ;

коэффициент 1,3 учитывает тепловые потери трубопроводами систем горячего водоснабжения (с полотенцесушителями и с неизолированными стояками).

Определим средненедельную тепловую нагрузку:

$$Q_{cp, ned} = \frac{1,3 \cdot 177 \cdot (3916/30) \cdot (55 - 7,68) \cdot 4190 \cdot 0,86}{86400} = 59303,07(\text{ккал/ч}) \quad (3)$$

Температура горячей воды в местах водоразбора должна поддерживаться в следующих пределах:

- в открытых системах теплоснабжения и в системах местного горячего водоснабжения не ниже  $55$  и не выше  $80^\circ\text{C}$ ;
- в закрытых системах теплоснабжения не ниже  $50$  и не выше  $75^\circ\text{C}$ .

1. Пырков В.В. Гидравлическое регулирование систем отопления и охлаждения. К.: ДанфоссТОВ, 2010. 304 с.;
2. Невский В.В. Применение средств автоматизации Danfoss в тепловых пунктах систем централизованного теплоснабжения зданий. М.: ЗАО Данфосс, 2005. 80 с.;
3. Невский В.В. Применение средств автоматизации «Данфосс» в системах водяного отопления многоэтажных зданий. М.: ЗАО Данфосс, 2007. 36 с.;
4. Зайцев О.Н. Проектирование систем водяного отопления. К.: ГЕРЦ, 2008. 200 с.;
5. Чайковский Г.П. Отопление и вентиляция здания. Х.: ДВГУПС, 2003. 71с.
6. Михеев, М.А. Основы теплопередачи. Т.1. 2-е изд., перераб. М.: Гос. энерг. изд-во, 1949. 396 с.
7. СНиП 41-01-2003. Нормы проектирования. Отопление, вентиляция и кондиционирование.
8. СНиП 2.08.01-89\*. Нормы проектирования. Жилые здания.
- 9 СНиП II-3-79\*\*. Нормы проектирования. Строительная теплотехника.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ПРОТЕИНОВ НА АНТИОКСИДАНТНЫЕ СВОЙСТВА ЧАЯ

Козлова Е.В., Зиятдинова Г.К.

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

*Kozlova.Ekaterina1992@mail.ru*

Чай является одним из основных экзогенных источников фенольных антиоксидантов (АО) в рационе человека. Его биологическая активность в заметной мере зависит от происхождения, присутствия тех или иных макрокомпонентов, а также биохимических процессов, протекающих в живом организме. Так, взаимодействие с протеинами приводит к изменению антиоксидантных свойств фенольных соединений, а, следовательно, и самого чая. Разработка новых способов оценки взаимодействий фенольных АО с протеинами представляет интерес. Для решения этой задачи можно использовать вольтамперометрию, поскольку фенольные АО достаточно легко окисляются на электродах, в частности, на стеклоуглеродном электроде, модифицированном углеродными нанотрубками и электрополимеризованным кверцетином (ПК/МУНТ/СУЭ).

Электрополимеризацию кверцетина проводили из 1 mM раствора циклированием потенциала в щелочной среде. Поверхность электродов охарактеризована методами сканирующей электронной микроскопии и электрохимического импеданса.

В качестве модельных соединений были выбраны фенольные АО чая (катехин и эпигаллокатехин галлат) и молочные протеины (казеин, бычий сывороточный альбумин и  $\beta$ -лактоглобулин). Катехины чая окисляются на поверхности ПК/МУНТ/СУЭ в условиях дифференциальной импульсной вольтамперометрии. Площадь под кривой окисления пропорциональна концентрации анализаторов. Для оценки влияния протеинов использовали смеси катехинов с протеинами, которые готовили по объемным соотношениям. В присутствии протеинов наблюдается уменьшение площади под кривой окисления катехинов, что свидетельствует об уменьшении доли свободных катехинов в смеси за счет связывания с протеинами. Разработанный подход применен для оценки влияния молочных протеинов на антиоксидантные свойства чая, которые выражали через параметр антиоксидантная емкость (АОЕ).

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 16-03-00507-а).*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ PG-5 В РАСТВОРЕ С МИЦЕЛЛАМИ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Колосова О.А., Усачёв К.С., Клочков В.В.

*Институт физики, КФУ, Казань, Россия*

*kolosova.olga11@gmail.com*

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) высокого разрешения одна из наиболее информативных методик для определения пространственной структуры и динамики биомолекул в растворе. В данной работе с помощью спектроскопии ЯМР нами была определена структура протегрина 5 (PG-5) - антимикробного пептида, который способен образовывать олигомеры, вызывающие лизис клеток путем образования трансмембранных пор (Рис.1).



Рисунок 1. – Аминокислотная последовательность PG-5.

Целью данной работы является определение пространственной структуры PG-5 в растворе в комплексе с системами, имитирующими поверхность клеточной мембраны (мицеллы додецилфосфохоллина, ДФХ) и нахождение общих закономерностей формирования трансмембранных пор. Установлено, что исследуемый пептид в растворе с мицеллами ДФХ образует  $\beta$ -складку (Рис.2А), также показана возможность димеризации и дальнейшей олигомеризации PG-5 (Рис.2В) и предположена модель о поэтапном образовании трансмембранный поры [1].

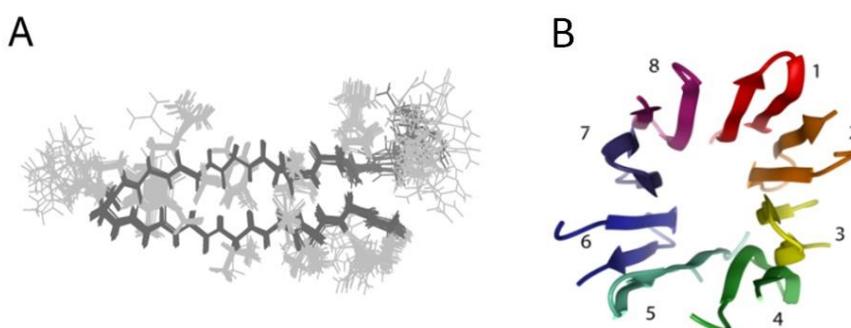


Рисунок 2. – А) Ансамбль из 20 структур с минимальной энергией для мономера PG-5; В) Олигомер PG-5.

1. K.S. Usachev, O.A. Kolosova, E.A. Klochkova, A.R. Yulmetov, A.V. Aganov, V.V. Klochkov  
Oligomerization of the antimicrobial peptide Protegrin-5 in a membrane-mimicking environment. Structural studies by high-resolution NMR spectroscopy., *Eur Biophys J Biophys.*, 2016. DOI 10.1007/s00249-016-1167-5.

## ВНУТРИСФЕРНОЕ ГИДРОФОСФОРИЛИРОВАНИЕ 1-ОКСО-, 1-ТИО- И 1-АЗА-1,3-ДИЕНОВ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТАЛЛОВ 6 ГРУППЫ С ПОЛИДЕНТАТНЫМИ АЗОТСОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ

Колпакова Е.В., Васильев Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

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

*argironet@gmail.com*

В процессе работы над разработкой метода каталитического региоселективного присоединения фосфитов к гетеродиенам и получения функционализированных винилфосфонатов, мы предположили, что переход от координационного узла M(CO)<sub>x</sub> который был использован ранее, к ядру, стабилизированному хелатирующим лигандом, позволит избавиться от диспропорционирования характерного для гомолигандных карбонильных комплексов.

С этой целью нами было изучено несколько типов азотсодержащих хелатирующих лигандов: тридентатные 1,3,5-триорганил-1,3,5-триазациклогексановые лиганды, называемых также триазинанами, являющимися наименьшими по размеру представителями класса триазамакроциклических лигандов, также тридентатный, но более липофильный трис(пиррол-α-метил)амин, аналог пиразолилборатных лигандов, и бидентатный азотсодержащий лиганд – о-фенантролин, к достоинствам которого можно отнести его дешевизну и доступность, а также значительное количество исследований, посвященных координационной химии этого лиганда с катионными комплексами переходных металлов.

Исследуемые лиганды были вовлечены нами в координационную сферу гексакарбонильных комплексов хрома, молибдена и вольфрама. Проведено теоретическое исследование энергетических, электронных и геометрических свойств полученных комплексов.

В координационную сферу исследуемых комплексов были вовлечены сопряженные оксо-, тиоксо- и азадиены. Полученные продукты охарактеризованы физическими методами. Изучено внутрисферное гидрофосфорилирование гетеродиенов в составе полученных металлоорганических соединений; в мягких условиях диалкилфосфит атакует кратную связь углерод-гетероатом.

## БИОЛОГИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ Ni, ВЫЯВЛЕННЫЕ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ НА ПРОРОСТКАХ ПШЕНИЦЫ *TRITICUM VULGARE*

Короткова А.М.

*ФГБОУ ВО Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия*

*anastasiapory@mail.ru*

Анализ морфо-физиологических показателей проростков *Triticum vulgare* после двухсуточного воздействия наночастицы (НЧ) Ni° в концентрации от 0,0125 до 1 М выявил некоторые изменения. В частности, наблюдалось снижение прорастания семян относительно контроля в 1,3-16,5 раз большее, чем в контроле. В дозах 0,025 и 0,1 М НЧ приводили к достоверному уменьшению длины листа (в 2,6 и 2,5 раза) и корня (в 2,5 и 4,8 раза) относительно контрольных образцов, причем количество латеральных корней снижалось до  $3,4 \pm 1,02$  шт. против  $4,6 \pm 0,11$  шт. в контроле. Некоторые изменения отмечались и на уровне пигментной системы: общий уровень хлорофиллов снижался до 18,5%, особенно хлорофилл b (до 45,5-68% при воздействии 0,05-1 М). Кроме этого, мы обнаружили небольшой окислительно-восстановительный дисбаланс. Это проявлялось в снижении активности антиоксидантных ферментов - супероксиддисмутазы и каталазы в корнях на 24% и 35%, накоплении малонового диальдегида на 17%, отдельном накоплении активных форм кислорода: H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (3,8-12,8%), OH-радикалов (<3%) и O<sub>2</sub><sup>-</sup> (52-68%).

Что касается цито- и генотоксических свойств, то наличие в среде НЧ Ni° приводило к снижению жизнеспособности только после 24 ч воздействия, особенно при концентрации 0,05 и 0,1 М (на 23-27% и 31-42%). При этом, происходило небольшое увеличение доли низкомолекулярных фрагментов ДНК массой менее 3000 н.п. после 24 и 48 часов инкубации на 34,8 и 38% по сравнению с контролем *in vitro*. В свою очередь, в *in vivo* условиях увеличение фрагментов было менее 50% (13,5-32,7%), но деградация хроматина несла апоптотическую «лестницеобразную» форму, что подтвердились микроскопически двойным окрашиванием этидия бромидом и акридиновым оранжевым и двукратным увеличением каспазы 3-подобной активности (на 66 % выше контроля).

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ $^{31}\text{P}$ ЯМР СПЕКТРОВ ФОСФОЛИПИДОВ В ПРИСУТСТВИИ КУРКУМИНА

Котенков С.А., Гнездилов О.И., Филиппов А.В.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*kotenkov.sergey@gmail.com*

Куркумин - натуральный полифенол, получаемый из приправы куркумы, используется в азиатской традиционной медицине. Он обладает противораковыми, антиоксидантными, противовоспалительными свойствами. Предположительно, такой широкий спектр фармакологических свойств куркумина вызван его способностью взаимодействовать с клеточной мембраной, делая ее более упорядоченной и устойчивой к патогенным условиям.

В работе представлены результаты исследования температурной зависимости  $^{31}\text{P}$  ЯМР спектров везикул, образованных димиристоилфосфатидилхолином (ДМФХ) и дипальмитоилфосфатидилхолином (ДПФХ), в присутствии 20 моль% куркумина в диапазоне температур 15-40  $^{\circ}\text{C}$  для ДМФХ и 25-50  $^{\circ}\text{C}$  для ДПФХ. Измерения образцов проводились на ЯМР спектрометре BRUKER AVANCE III 400 на ядрах  $^{31}\text{P}$  с частотой возбуждения 162,03 МГц и количеством накоплений 512 сканов. Использовалась стандартная последовательность Bruker CP с подавлением сигнала  $^1\text{H}$ .

Результаты исследования показывают сужение примерно на 40 м.д. анизотропии химического сдвига  $^{31}\text{P}$  ЯМР спектров и изменение формы спектра при увеличении температуры для обоих типов липидов. Изменения анизотропии химического сдвига  $^{31}\text{P}$  ЯМР спектров фосфолипидов могут быть связаны с изменением скорости вращения липида вокруг своей оси и изменением её ориентации относительно магнитного поля [1]. В присутствии куркумина также наблюдается изменения анизотропии химического сдвига  $^{31}\text{P}$  ЯМР спектров, однако эти изменения менее выражены, чем для образцов без куркумина. Скорее всего это связано со взаимодействием куркумина с головной частью липида, что приводит к снижению подвижности фосфолипидов.

1. N.-P. Benetis et al. Static CP  $^{31}\text{P}$  NMR multilamellar bilayer broadlines in the absence and presence of the bioactive dipeptide b-Ala-Tyr or Glu, *Chemical Physics*, 2005, **314**, 57-72.

## КОНТАКТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СО ШТАМПОМ ПЛАСТИНЫ СРЕДНЕЙ ТОЛЩИНЫ, ЛЕЖАЩЕЙ НА УПРУГОМ ОСНОВАНИИ

Краснов С.В., Кузнецов С.А., Моренко Я.В., Сметанина Е.В.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань, Россия*

*skoal@kpfu.ru*

Настоящая работа является продолжением исследований контактного взаимодействия пластин с жёсткими телами [1-5], проводимых в последние годы С.А. Кузнецовым с коллегами и учениками. На основе математически корректной постановки контактных задач теории пластин и оболочек с учётом деформаций поперечного обжатия в зоне контакта решена контактная задача для пластины средней толщины, лежащей на упругом основании Винклера и взаимодействующей с плоским штампом. Условие контакта, сформулированное в виде равенства перемещений штампа перемещениям верхней границы пластины, является интегральным уравнением Фредгольма второго рода относительно неизвестного контактного давления. Функция влияния – ядро интегрального уравнения – получено авторами на основе уточнённой теории оболочек с учётом деформаций поперечного сдвига с использованием аппарата теории обобщённых функций для трёх различных вариантов граничных условий: свободные края, жёстко защемлённые, шарнирно опёртые. Интегральное уравнение контактной задачи решено методом сведения его к краевой задаче, разработанным в Казанском университете проф. Ю.П. Артюхиным. Получено точное аналитическое представление для распределения контактных напряжений по области контакта. Дан анализ влияния размеров штампа, толщины пластины, жёсткости основания и краевых условий на распределение контактных напряжений.

1. Д.Л. Егоров, С.А. Кузнецов. Контактное взаимодействие круглых пластин на упругом основании со штампами различных форм. *Научно-технический вестник Поволжья*, 2011, **5**, 32-35.
2. Ю.Г. Коноплев, С.А. Кузнецов, А.А. Саченков, М.А. Токасова. Исследование контактного взаимодействия прямоугольной пластины с жесткой накладкой при гармонических колебаниях, Учён. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки, 2011, **153(4)**, 98-111.
3. А.Н. Шишова, С.А. Кузнецов. Контактное взаимодействие пластины с жестким штампом при неизвестной области контакта. *Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук*, 2013, **8**, 25-30
4. Д.Л. Егоров, С.А. Кузнецов. Численно-аналитическое решение задачи контактного взаимодействия круглой пластины и штампов различных форм. *Вестник Казанского технологического университета*, 2013, **11**, 36-39
5. С.А. Кузнецов, Г.Г. Зиганшина, Э.Р. Лотфуллина, О.В. Старожилова, А.Н. Хусаинова. Влияние граничных условий на распределение контактных напряжений при взаимодействии пластин с жесткими телами. Супервычисления и математическое моделирование: Труды XV Международной конф. под ред. Р.М. Шагалиева. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2015, 279-282.

## МЕНТАЛЬНАЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОСТЬ КАК ВНУТРЕННЕПСИХОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ЛИЧНОСТИ В 21 ВЕКЕ

Кротова И.В.

*Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

*baly-inna@yandex.ru*

В современном мире условия информационного общества предполагают постоянные манипуляции, а это всегда воздействие в интересах манипулятора с целью изменения поведения и мышления объекта, вопреки его собственным интересам. Так что, тот самый «объект» - «современный человек» должен суметь придать своей умственной деятельности независимый характер, проявить себя и свою личность в своих интересах в своей инновационной деятельности. Главной характеристикой при этом нами определяется ментальная самостоятельность, и проявить *ментальную самостоятельность*, значит использовать свой разум независимо от манипуляций из вне. Чтобы развить это качество человек должен опираться на *законы оптимума* в своей жизнедеятельности и действовать не только эффективно, но и с минимальной затратой энергии. Такой оптимальный способ взаимодействия подвластен, согласно концепции Н.М. Пейсахова, субъекту самоуправления. «Оптимальный – самый эффективный и экономичный способ существования психики человека. Достигается за счет психического самоуправления и саморегуляции» [3]. И, если человек находит оптимум взаимодействия, то он является уже не объектом воздействия, а субъектом самоуправления, обладателем ментальной самостоятельности, способный справиться с обществом-манипулятором.

Таким образом, ментальная самостоятельность, как внутреннепсихологический потенциал личности, проявляется в статусе субъекта самоуправления, когда информация перерабатывается осознанно через последовательное выполнение умственных действий (Н.М. Пейсахов), и именно, как «внешнее через внутреннее» (Рубинштейн С.Л.), и, далее, обогащенное «внутреннее» может решать задачи не только по переработке информации, но и по выдаче инновационного результата (Я.А. Пономарев).

Вот что в идеале должен проделать человек, чтобы актуализировать весь свой психологический потенциал, чтобы идти по пути развития в информационном обществе 21 века.

1. Кротова И.В. Самодетерминация становления субъекта научно-творческой деятельности. ISBN-NR 978-3-8433-1865-5. 174с., Издательский дом LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co. KG, Germany.
2. Кротова И.В. Психологические аспекты инновационного поведения субъекта профессиональной деятельности // Личность профессионала в современном мире. Отв. ред. Л.Г. Дикая, А.Л. Журавлев. - М.: Изд-во «Институт психологии РАН», 2014. - 942с. (с.256-273)(Труды Института психологии РАН).
3. Пейсахов Н.М., М.Н. Шевцов. Практическая психология (научные основы). Учебное пособие. Издательство Казанского университета, 1991. – 116 с.
4. Krotova I.V. The study of psychological characteristics as indicators of the degree of personal protection in conditions of the information and economic environment // Global Journal on Advances in Pure&Applied Sciences (Academic World Education&Research Center) Vol 2 (2014) 132-136.

**СИНТЕЗ НОВЫХ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ *П-ТРЕТЬ-*  
БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, СОДЕРЖАЩИХ ПЕРВИЧНУЮ АМИНОГРУППУ НА  
НИЖНЕМ ОБОДЕ МАКРОЦИКЛА**

Кузнецова Д.И., Шибаева К.С., Назарова А.А., Стойков И.И.

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

*alleoks@mail.ru*

Одним из важных направлений супрамолекулярной химии является дизайн новых синтетических молекул, способных распознавать различные, в том числе биологические, объекты. Для их создания в последние несколько десятилетий в качестве макроциклической платформы успешно используются (тиа)каликсарены.

В свою очередь аминофосфоновые кислоты и их эфиры уже давно привлекают ученых благодаря широкому спектру биологической активности - они выступают в роли ингибиторов ферментов, антибактериальных, противораковых агентов. Являясь полифункциональными соединениями, они обладают хорошими комплексообразующими свойствами, что позволяет создавать на их основе эффективные экстрагенты, транспортные агенты, рецепторы на различные виды субстратов.

Известно, что рецепторные способности аминофосфоновых кислот определяют входящие в их состав фосфорильная и аминная функции. Использование платформы тиакаликсаренов позволяет разделить эти две функциональные группы в пространстве, что может привести к интересным свойствам новых структур.

Целью данной работы была разработка синтеза новых фосфорсодержащих производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, нижний обод которого был модифицирован одновременно фосфонатной и аминогруппами.

Структура всех полученных макроциклов подтверждена комплексом физических методов - ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$  и ИК спектроскопией, масс-спектрометрией, а состав - элементным анализом.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-03-02877).*

## СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ИЗОБОРНИЛАКРИЛАТА И МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ В УСЛОВИЯХ ОБРАТИМОЙ ПЕРЕДАЧИ ЦЕПИ В ПРИСУТСТВИИ БЕНЗИЛДИТИОБЕНЗОАТА

Куликов Е.Е., Лудин Д.В., Зотова О.С., Зайцев С.Д., Дукова С.В.

*Химический факультет ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*kulikoff.eug@yandex.ru*

Постоянно развивающиеся технологии требуют создания материалов с широким спектром функциональных свойств. В последние годы особое внимание уделяется исследованиям в области свободнорадикальных процессов, обладающих чертами “живой” полимеризации. Данные методики позволяют получать узкодисперсные полимеры заданной молекулярной массы, которые в дальнейшем способны участвовать в реакциях роста цепи. Одной из таких методик является полимеризация, протекающая в условиях обратимой передачи цепи по механизму присоединения–фрагментации (RAFT). Несомненными преимуществами указанного метода являются его применимость к широкому кругу мономеров, полимеризующихся по радикальному механизму, простота в исполнении, а также проведение процесса в условиях, мало отличающихся от проведения радикальной полимеризации в классическом варианте.

Целью данного исследования являлся синтез методом радикальной полимеризации по механизму RAFT градиентных и блок-сополимеров изоборнилакрилата (ИБА) и метакриловой кислоты (МАК) и исследование их молекулярно-массовых характеристик. Было установлено, что использование бензилдитиобензоата (БТБ) в качестве агента обратимой передачи цепи позволяет проводить сополимеризацию указанной мономерной пары в контролируемом режиме, т. е. по мере протекания процесса полимеризации наблюдается линейное увеличение среднечисловой молекулярной массы от конверсии, отсутствие гель-эффекта, выделенные из реакционной смеси полимеры обладают низкими значениями параметров полидисперсности. Использование полимерного RAFT агента на основе ИБА или МАК позволяет получать мульти-блок-сополимеры путем прибавления новой порции мономера, содержащего радикальный инициатор к полимерному RAFT агенту. RAFT сополимеризация ИБА и МАК является прямым методом получения узкодисперсных сополимеров амфильтальной природы с различным составом и микроструктурой цепи. Узкое ММР таких сополимеров играет важную роль в системах транспортировки лекарственных препаратов.

## ПОДСИСТЕМА ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В СППР «КОСМОС»

Куренных А.Е., Судаков В.А.

*ФГБОУ ВО Московский авиационный институт (НИУ), Москва, Россия*

*Alex71321@yandex.ru*

Целью представленной работы является интеграция системы имитационного моделирования «СИМ C#» и системы поддержки принятия решений (СППР) «Космос», разработанных на кафедре 302 МАИ и в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН [1-3].

СППР «Космос» использовалась для определения приоритетности заявок на космические эксперименты при формировании программ научно-прикладных исследований проводимых на российском сегменте МКС. Актуальной задачей является имитационное моделирование различных вариантов программ космических экспериментов. Подобные задачи характеризуются десятками критериев, поэтому требуется применение современных методов многокритериального анализа альтернатив заложенных в СППР «Космос».

Наряду с использованием имитационного моделирования как такового предлагается возможность рационализации самих моделей. Эта часть важна для процесса принятия решений: недостаточно одного лишь проекта системы и ее имитационной модели, экономически выгодно рационализировать эту модель – подобрать ее параметры, на основе существующих ограничений, таким образом, чтобы обеспечить наилучшие оценки характеристик процесса функционирования системы [4].

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 16-01-00571-а.*

1. Осипов В.П., Судаков В.А., Хахулин Г.Ф. Информационные технологии формирования этапной программы научно-прикладных исследований на российском сегменте Международной космической станции. *Вестник компьютерных и информационных технологий*, 2012, **12**, 24-28.
2. Хахулин Г.Ф. Основы конструирования имитационных моделей, М: НПК Поток, 2002.
3. Осипов В.П., Репченков Р.О., Судаков В.А. Методическое и программное обеспечение автоматизации формирования программ космических экспериментов на РС МКС. IX Конференция молодых ученых «Фундаментальные и прикладные космические исследования». Москва. ИКИ РАН. 2012.
4. Куренных А.Е. Подсистема имитационного моделирования в автоматизированной системе поддержки принятия решений «Космос». Выпускная квалификационная работа. Москва, МАИ 2016.

## РАЗРАБОТКА БИОПРЕПАРАТА ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ СУПРЕССИВНЫХ СВОЙСТВ КОМПОСТОВ ИЗ ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

Шарифзянов А.А., Курынцева П.А., Галицкая П.Ю.

*ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Институт экологии и природопользования, Казань, Россия*

*polinazwerewa@yandex.ru*

Основная задача сельского хозяйства – получение максимального количества продовольственных товаров. В связи с этим защита растений от патогенных организмов является важной составляющей повышения урожайности сельскохозяйственных культур. Альтернатива часто используемым ядохимикатам – биопрепараты, способные снизить рост и развитие фитопатогенов. Биопрепараты – штаммы микроорганизмов, а также вещества, полученные в результате микробиологического синтеза, которые применяют при инокуляции семян растений и совместно с органическими удобрениями в качестве добавок.

Целью работы стало разработать биопрепарат, интенсифицирующий процесс компостирования органических отходов и позволяющий получить компост, обладающий супрессивными свойствами.

Для создания биопрепарата были выбраны такие микроорганизмы, как *Trichoderma asperellum T34*, *Streptomyces sp.*, *Pseudomonas putida PCL* и *Pseudomonas fluorescens WCS*, обладающие супрессивными свойствами с разным механизмом действия. При оценке антагонистических свойств штаммов *T. asperellum T34*, *Streptomyces sp.*, *P. putida PCL* и *P. fluorescens WCS*, было установлено что, штаммы не оказывают негативного влияния друг на друга. На следующем этапе было проведено компостирование смеси органических отходов с внесением биопрепарата и без. Внесение биопрепарата привело к большему снижению содержания растворимого углерода, а соответственно интенсификации процесса компостирования. Индекс прорастания, оцененный с использованием семян овса (*Avena sativa*), компостных смесей достоверно не отличался на 90 сутки процесса, что говорит о незавершенности компостирования. Внесение в компостную смесь биопрепарата приводит увеличению супрессивности оцененной в модельной системе «*Fusarium oxysporum* – томат», процент здоровых растений томата составил 73% для варианта без внесения биопрепарата и 87,5% для варианта с внесением биопрепарата.

*Данная работа выполнена при поддержке ФЦП (проект № RFMEFI57814X0089).*

## НОВЫЕ СЕРОСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 5-БОРНИЛОКСИ- И 5-МЕНТИЛОКСИ-2(5H)-ФУРАНОНА

Латыпова Л.З., Фаизова Р.Г., Хабибрахманова А.М., Сибгатуллина Р.Р., Михайлова И.А.,  
Курбангалиева А.Р.

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

*llatypov@kpfu.ru*

Данная работа посвящена разработке методов синтеза оптически чистых серосодержащих производных 2(5H)-фуранона, который представляет собой важный класс пятичленных гетероциклических соединений и привлекает большое внимание исследователей благодаря их нахождению в природе, огромной биологической значимости и богатому синтетическому потенциалу. С целью получения индивидуальных стереоизомеров в качестве хиральных индукторов, вводимых в молекулу 2(5H)-фуранона, были использованы *l*-ментол и *l*-борнеол, которые являются биологически активными соединениями и обладают обезболивающим, противовоспалительным, антимикробным и антибактериальным действием.

В реакциях 3,4-дигалоген-5-гидрокси-2(5H)-фуранонов с *l*-борнеолом и *l*-ментолом, проводимых при нагревании в бензole в условиях кислотного катализа, были получены соответствующие 5-борнилокси- и 5-ментилоксипроизводные в виде смесей диастереомеров, которые разделяли методом дробной кристаллизации из гексана [1, 2]. Выделенные стереоизомеры далее были вовлечены в реакции с ароматическими тиолами в присутствии триэтиламина, что привело к образованию новых 4-арилтио-2(5H)-фуранонов. Далее тиоэфиры 2(5H)-фуранона были окислены до соответствующих сульфонильных производных. Строение новых оптически чистых тиоэфиров и сульфонов 5-борнилокси- и 5-ментилокси-2(5H)-фуранонов охарактеризовано методами ИК и ЯМР спектроскопии и данными РСА.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 15-14-00046)*

1. D. Fenske, K. Merzweiler. *Z. Naturforsch.*, 1989, **44b**, 879-883.
2. Q.H. Chen, B. Huang. *Chin. Chem. Let.*, 1993, **4**, 675-678.

## ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОИСРОВЫМИ РАЗРЯДАМИ

Лебедева В.О.

*Муниципальное бюджетное образовательное учреждение «Гимназия №5», город Королёв  
(микрорайон Юбилейный), Московская область, Россия*

*Lvalery14@mail.ru*

Электроискровой разряд – это неустановившийся быстротечный электрический разряд [1]. Продолжительность искрового разряда составляет единицы микросекунд. Искровой разряд происходит между катодом и анодом, если напряжённость электростатического поля достигает значения электрического пробоя. Для сухого воздуха напряжённость пробоя принята равной 3 МВ/м. Стимерная теория искрового разряда объясняет движение заряженных частиц по узким каналам ионизированного газа по кратчайшему расстоянию между электродами. Можно ли управлять направлением движения быстротечного электроискрового разряда? Один из способов управления искровым разрядом предложен Г.К.Лихтенбергом в 1777 году [2]. Этот способ применялся учёным исключительно для наблюдения образования стимеров. Этот способ связан со стелющимся электроискровым разрядом [1]. Стелившийся разряд образуется на границе твёрдого диэлектрика. Цель работы заключается в управлении движением искрового разряда с помощью твёрдых диэлектрических материалов специальной формы. Работа началась с изучения явления раздвоения дуги искрового разряда [3]. Продолжение работы заключалось в целенаправленном движении стелившегося искрового разряда по твёрдому диэлектрику. Правильность результатов была проверена на отладочном диэлектрике с прямым двугранным углом. Искровой разряд двигался перпендикулярно ребру при большом удалении от основания, а приближаясь к основанию -параллельно ребру и по основанию. На поверхностях сложной формы разряд движется по геодезическим линиям. Практическое применение результатов исследования заключается в создании электроискрового скальпеля для медицины. Работой также заинтересовались специалисты в области защиты зданий и сооружений от молний. Работа вызвала интерес у машиностроителей для исследования деталей сложной формы в зубчатых передачах, для определения кратчайших линий зацепления зубьев. Благотворительный фонд «Образование+» выделил средства для создания более мощных установок с длиной стимеров 10-20 см на основе вакуумных ламп ГУ-50 и ГУ-81М.

1. Физический энциклопедический словарь. Гл. ред. А.М.Прохоров. М.: Советская энциклопедия, 1983. 928 с.
2. Храмов Ю.А. Лихтенбергер Георг Кристоф (Lichtenberg Georg Christoph). Физики: Биографический справочник. Под ред. А.И.Ахиезера (в переводе). Изд. 2-е, испр. и дополн. М.: Наука, 1983. 400 с.
3. Баракова М.А. Раздвоение токоведущего канала в дуговом разряде / 2-я Всероссийская Интернет-конференция «Границы науки – 2 (2013)». – Казанский (Приволжский) федеральный университет. – Электронный ресурс: <http://grani2.kznsience.ru/participants/sekcija4/BarakovaMA/>

## АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ L-ДОФЫ И ТИРОЗИНА НА ДВОЙНОМ ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ ЗОЛОТО-КОБАЛЬТ, В УСЛОВИЯХ ПРОТОЧНО-ИНЖЕКЦИОННОГО АНАЛИЗА

Лексина Ю.А., Ильина М.А., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

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

*Degteva\_marina@rambler.ru*

Анализ в потоке жидкости является одним из распространенных способов автоматизации процесса. Среди электрохимических детекторов наиболее распространеными являются амперометрические детекторы, которые отличаются высокой чувствительностью при относительно низкой стоимости оборудования. Недостатком электрохимического детектирования в потоке является низкая селективность. Для решения этой проблемы стали использовать многоэлектродные системы, например, с двумя рабочими электродами.

Представлял интерес изучить возможность одновременного определения L-дофы и тирозина (Тир) с помощью планарного двойного электрода, модифицированного бинарной системой золото-cobальт (Au-Co-ДПЭ), в условиях проточно-инжекционного анализа (ПИА). Отношение концентраций L-дофы и тирозина является специфическим маркером развития меланомы.

Установлена каталитическая активность бинарной системы Au-Co по отношению к L-дофе и Тир. Каталитический эффект проявляется в многократном приросте тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшении перенапряжения окисления субстратов. Разница потенциалов пиков окисления L-дофы и Тир на Au-Co-ДПЭ составляет 450 мВ.

Разработанный электрод был использован в качестве амперометрического детектора в условиях ПИА. Использование Au-Co-ДПЭ позволяет одновременно регистрировать сигналы окисления Тир и L-дофы при двух различных потенциалах. Изучено влияние гидродинамических и электрохимических параметров проточной системы на величину аналитического сигнала, на основе которых установлены рабочие условия регистрации ПИА-сигнала на Au-Co-ДПЭ. Линейная зависимость ПИА-сигнала от концентрации L-дофы и Тир наблюдается в интервалах от  $5 \times 10^{-8}$  до  $5 \times 10^{-5}$  М и от  $1 \times 10^{-9}$  до  $5 \times 10^{-5}$  М соответственно. Следует отметить высокую сходимость результатов анализа в проточной системе ( $S_r < 2.0\%$ ) и производительность (до 360 проб/ч).

## ПРИМЕНЕНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ КРИСТАЛЛОВ $\text{LiYF}_4$

Лучкин А.Г., Семашко В.В., Хакки А., Рахимов Н.Ф.

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

*AGLuchkin@kpfu.ru*

Низкотемпературная плазма в оптическом приборостроении применяется для очистки поверхности изделий, нанесения и ассистирования при нанесении тонкопленочных функциональных покрытий [1,2]. Низкотемпературную плазму, благодаря относительно низкой энергии ионов, можно применить и для модификации поверхностных слоев некоторых кристаллов, например,  $\text{LiYF}_4$ , который используется в лазерных системах [3]. Существует проблема уменьшения шероховатости поверхности данного кристалла, которую можно решить, уменьшив микротвердость его поверхностного слоя.

Для решения данной проблемы кристалл  $\text{LiYF}_4$  поместили в гелиевую низкотемпературную плазму, в которой присутствовал кислород в виде водяного пара, подвергнув поверхностный слой бомбардировке ионами для изменения структуры слоя и активации химических и диффузационных процессов.

Обработка низкотемпературной плазмой кристалла в течение 15 и 60 минут привела к тому, что его микротвердость уменьшилась на 37,2 и 65,5% соответственно. Изменение микротвердости кристалла  $\text{LiYF}_4$  может быть связано с тем, что в результате разогрева поверхности кристалла и плазмохимических реакций фтор выходит из структуры материала, а на его место проникает кислород. В результате обменных и диффузационных процессов образуется более рыхлая структура, что приводит к снижению микротвердости модифицированного слоя. В результате применения низкотемпературной плазмы микротвердость поверхностного слоя кристалла  $\text{LiYF}_4$  уменьшилась больше чем в 2 раза, и появилась возможность повысить качество полирования.

1. Справочник оптика технолога / под ред. М.А. Окатова. 2 изд. перераб. и доп. СПб.: Политехника, 2004. 679 с.
2. Galyautdinov R.T., Kashapov N.F., Luchkin G.S. *Applied physics*. 2005. **6**. 88-93.
3. Semashko, V.V. et. al Laser performance of in-band pumped Er :  $\text{LiYF}_4$  and Er :  $\text{LiLuF}_4$  crystals. *Quantum Electronics*, 2016, **46**, 95-99.

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ  
БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ С РЕАКЦИЕЙ СИНТЕЗА  
ЭТИЛОЛЕАТА**

Тойкка М.А., Ляхов Д.М.И.

*ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»,  
Санкт-Петербург, Россия*

*m.toikka@spbu.ru*

Тенденции развития современных технологий в последние годы предполагают использование «чистой» энергии (биодизельное топливо), получаемой из возобновляемых источников. Биодизельное топливо обладает рядом преимуществ над ископаемыми источниками энергии: изготавливается из возобновляемого сырья, не токсично, биологически разлагаемо и обладает лучшей смазывающей способностью [1]. В основе процесса синтеза биодизельного топлива лежат реакции этерификации жирных кислот этиловым (метиловым) спиртом в присутствии гомогенного кислотного или щелочного катализатора. Специфика совершенствования процесса получения биодизельного топлива в первую очередь связана с крайне ограниченной экспериментальной базой данных о физико-химических и термодинамических свойствах эфиров жирных кислот. Подобные знания являются основой любого химико-технологического процесса [2]. Экспериментальные данные, описывающие процесс достижения химического равновесия, в основном представлены системами, состоящими из уксусной кислоты и спиртов C1–C4. Эти результаты не могут служить надежным источником данных в приложении к процессу получения биодизельного топлива. Для ряда органических кислот с длиной алкильного заместителя C10–C12 имеются только единичные литературные сведения [3]. В качестве основных компонентов модельной системы нами были выбраны этиловый спирт и олеиновая кислота. В работе представлена схема синтеза этиолеата, а также приведены новые данные о химически равновесных составах указанной системы.

*Работа выполнена при поддержке Стипендии Президента РФ (СП-2140.2016.1).*

1. M.L. Savaliya, B.D. Dhorajiya, and B.Z. Dholakiya. *Sep. Purif. Rev.*, 2014, **44** (1), 28-40.
2. Н.Н. Лебедев. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. 1975, 588.
3. F. Omota, A.C. Dimian, and A. Bliek. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, **58**(14), 3159-3174.

## ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ МАКРОИНИЦИATORA, 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И ПОЛИЭДРАЛЬНОГО ОКТАГЛИЦИДИЛ- СИЛСЕСКВИОКСАНА

Мазильников А.И.<sup>a</sup>, Джаббаров И.<sup>b</sup>, Зарипов И.И.<sup>b</sup>, Давлетбаева И.М.<sup>a,b</sup>

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

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

*mazillove001@gmail.com*

Путем полиприсоединения 2,4-толуилендизоцианата к макроинициатору, представляющему собой калий-замещенный блок-сополимер оксидов пропилена и этилена, и Gl-POSS в качестве полифункционального узла ветвления, получены органо-неорганические полимеры блочной структуры. Установлено, что в основе надмолекулярной организации полимеров и возникновения в их объеме нанопор лежит способность блоков полизоцианатов ацетальной природы (O-полизоцианаты) и Gl-POSS создавать каркасные структуры.

Показано, что варьирование содержания Gl-POSS позволяет нарушать регулярность построения надмолекулярной структуры. Так, в полимерах, содержащих Gl-POSS в интервале 0,5-2% и 10-15%, каркасные фрагменты чередуются с гибкоцепной составляющей, которая формирует собственную микрофазу вне зоны сегрегации доменов жестких сегментов и Gl-POSS.

Показано, что особенности надмолекулярной организации органо-неорганических полимеров блочной структуры являются причиной достижения больших значений проницаемости аммиака в сочетании с высокой идеальной селективностью в отношении неполярных газов (He, N<sub>2</sub> и Ar).

## О КОЛЛЕКТИВНЫХ СПИНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ В КУПРАТНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ С ЭЛЕКТРОННЫМ ДОПИРОВАНИЕМ

Малахов М.А., Еремин М.В.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*MiAMalakhov@kpfu.ru*

Исследования спектра коллективных спиновых возбуждений в купратных ВТСП в центре внимания современных исследований. Они могут быть ответственны за механизм высокотемпературной сверхпроводимости. В нашей работе предложена аналитическая формула для расчета динамической спиновой восприимчивости электронно-допированных купратов с учетом трехцентровых членов [1]. Результаты нашего расчета мнимой части восприимчивости воспроизводят основные особенности неупругого рассеяния нейтронов (INS) и рентгеновских лучей (RIXS) [2-6]. Показано, что высокочастотное поведение дисперсии коллективных спиновых возбуждений главным образом определяется значениями параметров зоны проводимости и практически не зависит от обменной связи спинов меди. В формировании спинового отклика в области  $Q = (\pi, \pi)$  определяющую играют параметры спиновой и сверхпроводящей щелей, а также корреляционные эффекты, связанные с трехцентровыми членами.

В данном сообщении мы показываем, каким образом данные как по RIXS, так и по INS электронно допированных купратов могут быть объяснены в аналитическом методе расчета, позволяющих рассчитать не только значения частот, но и спектральные веса (интенсивности), причем как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях.

1. М.В. Еремин, М.А. Малахов *Письма в ЖЭТФ* 2016, **104**, 13-16.
2. Braicovich L., van den Brink J., Bisogni V., et al. *Phys. Rev. Lett.* 2010, **104**, 077002.
3. M. Le Tacon, G. Ghiringhelli, J. Chaloupka et al. *NATURE PHYSICS*, 2011, **7**, 725.
4. M.P.M. Dean, G. Dellea, R. S. Springell et al *Nat. Mater.* 2013, **12**, 1019.
5. M. Guarise, B. Dalla Piazza, H. Berger et al. *Nature Communications*, 2014, **5** 5760.
6. W.S. Lee, J.J. Lee, E.A. Nowadnick, et al *Nature Physics* 2014, **10**, 883.

## ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

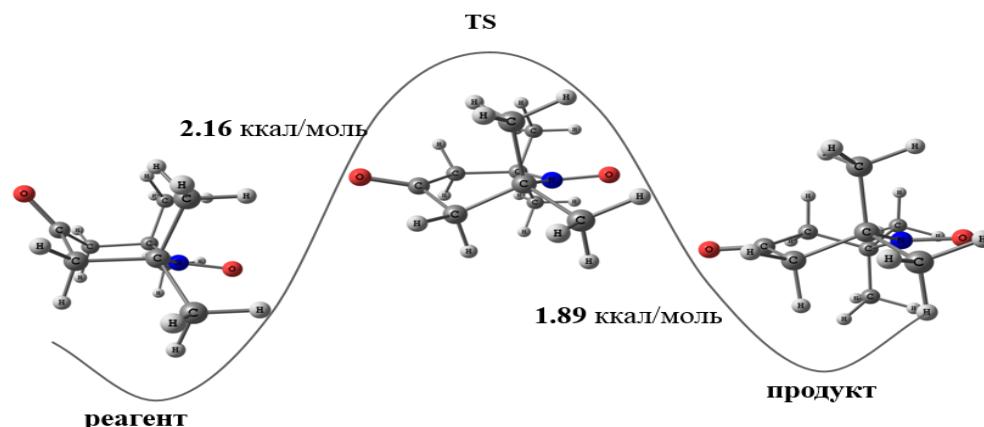
Маматова А.А.

*Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия*

*mamatovaalinka@mail.ru*

В циклических соединениях помимо торсийных и ван-дер-ваальсовых напряжений существует еще один вид напряжения, связанный с тем, гетероцикл не всегда является плоским, и в нем будут наблюдаться отклонения внутренних валентных углов от тетраэдрического. Это приводит к тому, что для шестичленных гетероциклических соединений характерно наличие различных конформаций: кресло, твист, ванна.

Нами изучались нитроксильные радикалы, так называемые спиновые метки, содержащие шестичленные гетероциклы. Методом функционала плотности с использованием программного пакета ORCA были получены структуры всех конформаций спиновых меток, найдены переходные состояния между различными конформациями.



Наши расчёты показали, что на поверхности потенциальной энергии нитроксильных радикалов удается локализовать только две из трех возможных конформаций: «кресло» и «твист». При этом энергетически выгодной конформацией является «кресло». Так как экспериментальные данные по нитроксильным радикалам были получены при комнатной температуре, то можно предположить, что в изучаемой среде могут находиться в состоянии равновесия несколько конформаций. Для этого были найдены переходные состояния и определен потенциальный барьер (~ 2.16 ккал/моль), который предполагает такую возможность.

## НАСТРОЙКА КИНЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАНКА ДЛЯ СИМУЛЯЦИИ В МОДУЛЕ NX CAM

Мансуров Т.Н.

*Набережночелнинский институт (филиал) федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет». Набережные Челны, Россия*

*timur9m@mail.ru*

Система NX CAM позволяет производить симуляцию отработки управляющих программ с применением трехмерных моделей станков с ЧПУ. Это позволяет выявить ошибки программирования, проверить и устранить столкновения узлов станка, инструмент, приспособления и заготовки. Для реализации симуляции необходимо кроме наличия самой трехмерной модели станка, выполнить ее настройку. Один из способов такой настройки рассмотрен в данной статье.

Первоначально нужно подготовить папку с моделью станка, в которой находится: CSE драйвер, трехмерная модель станка и постпроцессор для него. При этом в папке модели станка должна быть не просто его сборка, а настроенная определенным образом.

Для создания кинематической модели открываем сборку станка, переключаемся на генератор модели станка, переходим во вкладку навигатор станка. Первым делом добавляем компонент станины, а затем, относительно него добавляются все остальные компоненты. Все подвижные компоненты должны иметь оси, по которым они будут перемещаться. При добавлении оси компонента, задается направление перемещения, тип перемещения, и пределы перемещений. Кроме основных компонентов станка, можно добавить и дополнительные, такие как карманы для инструментов, и позиция для заготовки, детали и приспособления. Они нужны для того, чтобы при добавлении станка в обработку нужные элементы сразу размещались в нужных местах на станке. Все параметры кинематической модели станка при необходимости всегда можно изменить.

Затем нужно скопировать папку с нашим станком, в папку программы, где хранятся все станки. После этого создаем в папке станка .dat файл, где прописываем путь к файлам постпроцессора и драйвера станка. Чтобы программа увидела наш станок необходимо создать запись в файле фазы данных станка, где указывается название, и путь к модели станка.

Теперь можно произвести симуляцию.. Если все сделано верно, то при запуске симуляции станка все его элементы будут корректно перемещаться.

Таким образом можно создать и добавить собственный станок в программу NX CAM для дальнейшей симуляции обработки.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМОДИФФУЗИИ В ГЦК-КРИСТАЛЛЕ ПРИ ГЕНЕРИРОВАНИИ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Маркидонов А.В.

*ФГБОУ ВПО «Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева», филиал КузГТУ в г.Новокузнецке, Россия*

*markidonov\_artem@mail.ru*

Целью данной работы является определение вклада ударных волн в процесс самодиффузии. Исследование проводилось по методу молекулярной динамики с помощью программы [1] на расчетном блоке, моделирующем кристаллит никеля. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома.

Компьютерные эксперименты показали, что прохождение по расчетному блоку ударной волны активизирует процесс самодиффузии, причиной которого являются пары Френкеля, зарождающиеся во фронте волны. К росту коэффициента самодиффузии приводит не только повышение стартовой температуры расчетного блока, но также и увеличение скорости волны. При этом существует скоростной интервал, на котором наблюдается аномальное снижение значения коэффициента диффузии. Причина этому следующая. Увеличение скорости волны приводит к образованию уже не одиночных, а множественных межузельных атомов, которые представляют собой краудионные комплексы. Данные образования являются более подвижными, чем одиночные межузельные атомы, и имеют больший радиус спонтанной рекомбинации. Поэтому после прохождения фронта волны краудионные комплексы рекомбинируют с вакансиями. Последующее увеличение скорости волн приводит к удалению краудионных комплексов от вакансий, «связь» между ними утрачивается, и рекомбинация не наблюдается. Поэтому коэффициент самодиффузии начинает расти. Отметим, что при высоких скоростях волн рассчитанные значения коэффициента самодиффузии приближаются к показателям самодиффузии в жидком никеле.

1. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.

## ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРЕДВИЖНОЙ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ЛАБОРАТОРИИ, ОСНАЩЕННОЙ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИМ КОМПЛЕКСОМ, В СФЕРЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ

Маслов Н.В.<sup>a,b</sup>, Сафиуллина Х.М.<sup>a</sup>, Евгеньев М.И.<sup>b</sup>, Ахунов А.А.<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

<sup>c</sup> Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. Туполева, Казань, Россия

*maslov.n.v@bk.ru*

Масс-спектрометрия, как метод аналитических измерений, требует довольно сложного оборудования, а также методического и метрологического обеспечения. Этот высокочувствительный метод обладает хорошей наглядностью и информативностью, а также позволяет достигать высокой точности, что способствует его широкому распространению в различных сферах деятельности, в том числе и в экологии.

Центральная специализированная инспекция аналитического контроля Министерства экологии и природных ресурсов РТ в рамках реализации природоохранных функций проводит эколого-аналитический контроль различных объектов окружающей среды.

Новая передвижная лаборатория на базе автомобиля «Форд-транзит», произведенной ОАО "ЛИГА" совместно с ЗАО СКБ «Хроматэк», оборудована хроматографом с модернизированной масс-спектрометрической системой. Для определения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе, содержание которых очень мало, установленный хромато-масс-спектрометр оснащен специальной системой пробоотбора и пробоподготовки и позволяет проводить не только качественное (более 250 тысяч органических соединений по библиотеке масс-спектров NIST 14), но и одновременное количественное определение около 50 загрязняющих веществ в анализируемой пробе (по МУК 4.1.618-96, МУК 4.1.2594-10). Отбор проб проводится путем прокачивания анализируемого воздуха через сорбционные трубки с помощью установленного переносного аспиратора (по ГОСТ Р ИСО 16017-1-2007).

Мероприятия по контролю за состоянием атмосферного воздуха проводятся совместно со специалистами Управления Федеральной службы по надзору в сфере природопользования по Республике Татарстан.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРООРГАНИЗМОВ, УСТОЙЧИВЫХ К БЕЛОМУ ФОСФОРУ

Миндубаев А.З.<sup>a</sup>, Волошина А.Д.<sup>a</sup>, Кулик Н.В.<sup>a</sup>, Валидов Ш.З.<sup>b</sup>, Бабынин Э.В.<sup>b</sup>, Яхваров Д.Г.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия

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

*mindubaev@iopc.ru; mindubaev-az@yandex.ru*

Нами впервые произведены посевы микроорганизмов на культуральные среды, содержащие белый фосфор в качестве единственного источника фосфора. На данных средах микроорганизмы росли и не испытывали фосфорное голодание. Это первый в мире пример включения белого фосфора в биосферный круговорот элемента фосфора. Самая высокая концентрация соответствует превышению ПДК белого фосфора в сточных водах в 5000 раз, а в водах хозяйствственно-бытового назначения – в сто миллионов раз [1]!

Для генетической идентификации гриба, метаболизирующего белый фосфор и отнесенного к виду *Aspergillus niger*, была определена нуклеотидная последовательность его регионов ITS1 и ITS2. Сравнение полученной последовательности с последовательностями базы данных GenBank с помощью системы BLAST, выявила 99% гомологию с ITS1 и ITS2 регионами описанных штаммов *A. niger*, что позволяет идентифицировать данный микроорганизм, как новый штамм *A. niger*. Ему мы присвоили номер *A. niger* AM1. Нуклеотидная последовательность штамма опубликована в базе данных GenBank, где ей присвоен номер KT805426 [2].

Проведена оценка генотоксичности белого фосфора при помощи теста Эймса, которая показала ее отсутствие. Белый фосфор не является мутагеном. Посев *A. niger* AM1 в среду, содержащую сразу два источника фосфора (фосфат и белый фосфор) продемонстрировал, что Р<sub>4</sub> не проявляет токсические свойства по отношению к этому микроорганизму. В присутствии белого фосфора он растет с такой же скоростью, как в его отсутствии. Это единственный пример отсутствия токсичности белого фосфора для живого организма.

1. Миндубаев А.З., Волошина А.Д., Горбачук Е.В. и др. Сборник тезисов Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Биомедицина, материалы и технологии XXI века», г. Казань, 25-28 ноября 2015 г. С.482.
2. Миндубаев А.З., Волошина А.Д., Горбачук Е.В., и др. *Бутлеровские сообщения*. 2015, **44(12)**. 1-28.

## СИНТЕЗ И КООРДИНИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ N1,N1'-(ЭТАН-1,2-ДИИЛ)ДИБЕНЗИЛ-1,2-ДИАМИНА

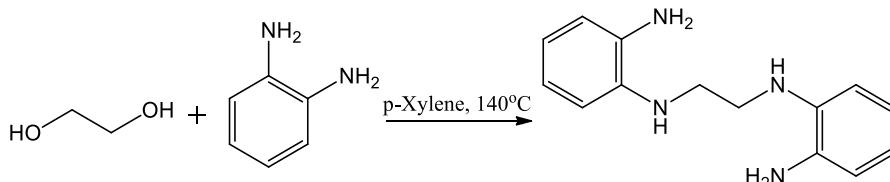
Мирзаянов И.И., Курамшин А.И., Колпакова Е.В., Галкин В.И.

*Химический институт им. А. М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия*

*ildar4016@mail.ru*

Ранее рядом из нас [1] было изучено гидрофосфорилирование 1-гетеро-1,3-диенов в координационной сфере триазинантиакарбонильных комплексов металлов группы хрома. Преимуществами применения азотсодержащих полидентатных лигандов в координационной химии переходных металлов, в частности – металлов 6 группы, является их более простой и менее опасный по сравнению с изолобальными фосфинами подход к их синтезу, а также более широкие возможности для применения в синтезе координационных полимеров переходных металлов.

Для расширения круга лигандов, используемых нами в получении металлоорганических и фосфаметаллоорганических производных металлов группы хрома, нами синтезирован N1,N1'-(этан-1,2-диил)дibenзил-1,2-диамин, представляющий собой потенциально тетрадентатный лиганд (далее – лиганд), строение и состав которого подтверждены с помощью физических методов исследования и масс-спектрометрии.



Лиганд был вовлечен в реакции с гексакарбонилхромом и гексакарбонилмолибденом. По результатам ИК-спектроскопии продуктов можно говорить о полном замещении CO-групп в комплексе хрома. В ИК-спектре молибденового комплекса наблюдается уширение полосы колебаний CO, а также возникновении еще одной полосы в области 1900  $\text{cm}^{-1}$ , что может свидетельствовать о наличии мостиковой группы CO и образовании координационного полимера.

1. A.I. Kuramshin, E.V. Kolpakova, V.I. Galkin. Inner-sphere Hydrophosphorylation of 1-aza-1,3-dienes / Book of Abstracts of 21st International Conference on Phosphorus Chemistry, Kazan, 5-10 June, 2016. P.278.

## АДСОРБЦИЯ БЫЧЬЕГО СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА НА МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПЛЕНКИ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

Монакова К.М.

*Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*kilkao.o@gmail.com*

Образование макропористых трехмерных структур (скаффолдов) основывается на биосовместимых полимерах и используется в доставке лекарств и тканевой инженерии, которая является актуальной проблемой современного биомедицинского материаловедения [1]. Такие скаффолды должны сожержать специфичные биофункциональные группы на своей поверхности для клеточной адгезии и дифференциации. В данном исследовании мы предлагаем использование полимеров с “молекулярными отпечатками” – специфичными полостями в структуре, сформированными методом молекулярного импринтинга и пригодными к молекулярному распознаванию, как подход к модификации скаффолдов из полимолочной кислоты [2]. Как показали последние исследования в данной области, использование макропористых криогелей как систем для молекулярного импринтинга является крайне перспективным [3,4].

Таким образом, целью данного исследования являлось создание гидрогелевого покрытия на поверхности пленок из полимолочной кислоты и импринтирование в данный слой молекул модельного белка. Для этого пленки полимолочной кислоты были модифицированы полиакриламидным гелем с белком бычьим сывороточным альбумином (БСА) и помещены в раствор БСА для изучение адсорбции. Поверхность пленок была изучена методами СЭМ, были изучены контактные углы смачивания, проведены исследования процессов адсорбции и десорбции. Эксперименты показали, что белок БСА склонен к образованию нескольких слоев на поверхности пленок из полимолочной кислоты без модификации, причем со временем происходит насыщение поверхностного слоя, а белок легко десорбируется. Поверхность же пленок, модифицированных полиакриламидным гелем, не насыщается и десорбции не происходит за счет большого количества пор в поверхностном слое, которые идерживают белок.

1. G. Vasapollo, R. Del Sole, L. Mergola, M.R. Lazzoi, A. Scardino, S. Scorrano, G. MeleInt. *J. of Mol. Sc.*, 2011, **12**, 5908-5945.
2. V. Korzhikov, S. Roeker, E. Vlakh, C. Kasper, T. Tennikova. *Biocon. Chem.*, 2008, **19**, 617-625.
3. S. Asliyuce, L. Uzun, R. Say, A. Denizli. *React. & F. Pol.*, 2013, **73**, 813-820.
4. G. Ertürk, N. Bereli. A. Tümer, R. Say, A. Denizli. *J. of Mol. Recog.*, 2013, **26**, 633-642.

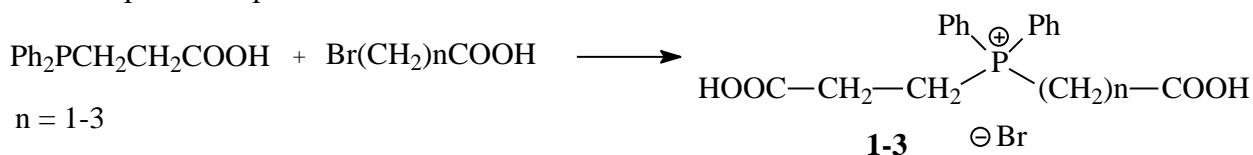
## 3-(ДИФЕНИЛФОСФИНО)ПРОПИОНОВАЯ КИСЛОТА В РЕАКЦИЯХ С ω-МОНОБРОМКАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ

Морозов М.В., Миннуллин Р.Р. Бахтиярова Ю.В.

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

*morozov240995@mail.ru*

Реакции 3-(дифенилфосфино)пропионовой кислоты с рядом монобромкарбоновых кислот протекают при нагревании в среде ацетонитрила, с образованием кристаллических продуктов. При хранении со временем дикарбоксилатная фосфониевая соль достаточно стабильна, однако возможно декарбоксилирование.



Строение фосфонивых солей **1-3** подтверждено комплексом физико-химических методов: ИК, ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$ . Состав продуктов доказан элементным анализом.

Таблица 1. – Характеристика фосфабетаинов **1-3**.

№	n	ИК, $\nu \text{ см}^{-1}$ , COOH	ЯМР $^{31}\text{P}$ , м.д.п.	Тпл., $^\circ\text{C}$
1	1	1720	25.3	212
2	2	1740	29.9	180
3	3	1720	30.2	119

Без нагревания данная реакция приводит к образованию двух продуктов, один из которых является фосфиноксидом, другой фосфониевой солью, соотношение 1:4. Разделить данные соединения не удалось, т.к. они имеют схожую растворимость в органических растворителях и воде.

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

## МОРФОЛОГИЯ ПЛЕНОК ДИПЕТИДА L-ГЛИЦИЛ-L-ГЛИЦИН ДО И ПОСЛЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПАРАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Морозова А.С.<sup>a</sup>, Зиганшина С.А.<sup>b</sup>, Бухараев А.А.<sup>a,b</sup>, Зиганшин М.А.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Казанский физико-технический институт  
им. Е.К. Завойского Казанского центра РАН, Казань, Россия

*morozova\_anna\_s@mail.ru*

Биосовместимые материалы на основе короткоценных пептидов (олигопептидов) активно исследуются вследствие возможности их применения в различных технологиях. Главной особенностью олигопептидов, является их способность к самоорганизации с образованием разнообразных структур: наночастиц, нановолокон, наностержней, нанопроводов, наносфер и дендритных объектов. Такие наноструктуры используются в сенсорных системах, а также для создания супергидрофобных поверхностей.

В настоящей работе методом атомно-силовой микроскопии исследована самоорганизация дипептида L-глицил-L-глицин (GG) в пленке различной толщины под действием паров органических соединений (спирты, азотсодержащие и хлорпроизводные соединения) и воды. Исследования проводили на микроскопе Solver P47Pro (НТ-МДТ, Россия) с помощью стандартных кантилеверов NSG11.

Установлено, что толщина пленки глицил-глицина является важным фактором, определяющим возможность формирования на ее поверхности различных структур. Слоистые кристаллы были получены при насыщении пленки дипептида парами спиртов и азот-содержащих органических соединений.

Подложка оказывает значительное влияние на морфологию начальной пленки дипептида. В случае гидрофобного пирографита на поверхности формируется аморфная пленка дипептида. Для гидроильной слюды наблюдается самоорганизация дипептида с образованием пирамидальных структур. Кроме того уже для тонкой пленки, нанесенной на поверхность слюды, под действием паров некоторых органических соединений наблюдается зародышеобразование кристаллических структур по сравнению с ВОПГ. Полученные результаты могут быть полезными для разработки методики управляемой самоорганизации короткоцепных олигопептидов под действием парообразных соединений.

# ДИЗАЙН ХРОМОФОРНЫХ НИТРОТИАКАЛИКСАРЕНОВ И ИХ АГРЕГАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ ВОДА-ВОЗДУХ И В РАСТВОРЕ

**Муравьев А.А.<sup>a</sup>, Князева М.В.<sup>b</sup>, Сафиуллин Р.А.<sup>c</sup>, Шокуров А.В.<sup>d</sup>, Селектор С.Л.<sup>d</sup>, Соловьева С.Е.<sup>a,b</sup>, Антипин И.С.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова КНЦ РАН, Казань, Россия

<sup>b</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

<sup>c</sup> Лаборатория трансмиссионной электронной микроскопии КНИТУ, Казань, Россия

<sup>d</sup> ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

*antonm@iopc.ru*

Создание эффективных нелинейно-оптически активных (НЛО) материалов тесно связано с формированием ориентированных ультратонких пленок на основе мультидипольных хромофорных молекул. Каликсареновые макроциклы способны формировать такие системы с одинаковой ориентацией диполей, но на сегодняшний день работы по исследованию НЛО свойств ориентированных многослойных пленок каликсаренов в литературе отсутствуют.

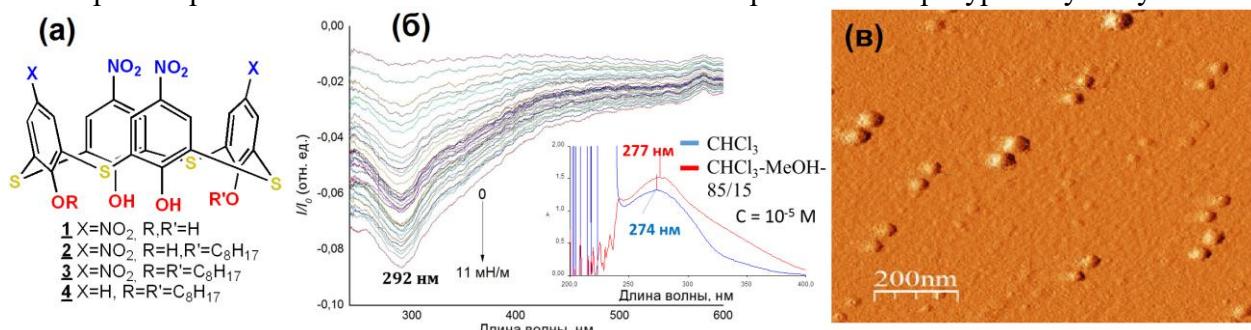


Рисунок 1. – (а) Хромофорные тиакаликс[4]арены 1–4; (б) УФ-спектр тиакаликс[4]арена 3 на границе раздела вода–воздух при изменении поверхностного давления (вставка – УФ спектр соединения 3 в  $\text{CHCl}_3$  и  $\text{CHCl}_3\text{:MeOH} = 85:15$ ); (в) АСМ изображение агрегатов 3 на Au подложке.

В данной работе были синтезированы хромофоры **1–4** в конфигурации конус с различным числом нитро- и октильных групп при использовании реакций Мицуобу и нитрования (рисунок 1а). Методами ДСР и АСМ показано, что тиакаликсарен **3** образует агрегаты в хлороформе, а также на границе раздела фаз вода–воздух с возможным образованием *J*-агрегатов при сжатии водной субфазы (батохромный сдвиг полосы поглощения), что не позволяет получать воспроизводимые монослои Ленгмюра (рисунок 1б,в). Однако при разбавлении раствора метанолом (до 15% (об.)) были получены воспроизводимые монослои Ленгмюра и агрегатов в растворе не наблюдалось.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-5778.2016.3.*

## РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ПРОПРАНОЛОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХИРАЛЬНОГО ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО «ЭЛЕКТРОННОГО ЯЗЫКА»

Мурзина К.А., Хаблединова А.И., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.

*Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*

*ZilbergRA@yandex.ru , aigulik17@mail.ru*

Понятие энантиомерии играет важную роль в фармацевтике, поскольку разные энантиомеры лекарственных веществ, как правило, имеют различную биологическую активность. Так, например, S-пропранолол обладает в 100 раз большим сродством к β-рецепторам, чем R-форма. Таким образом, необходимо изучать лекарственные препараты и биологически активные соединения с учетом их оптической активности, что позволит значительно повысить их фармакологическое действие и снизить токсичность.

В настоящей работе изучены возможности вольтамперометрической сенсорной системы типа «электронный язык» на основе угольно-пастового электрода, модифицированном урацилом, применительно к задачам распознавания препаратов пропранолола, содержащих различные энантиомеры. Хотя потенциалы пиков энантиомеров и форма вольтамперограмм отличаются друг от друга, по ним невозможно однозначно распознать стереоизомеры пропранолола и оценить их концентрацию в рацемической смеси и лекарственных средствах. С целью повышения возможностей предложенной сенсорной системы для решения задач надежного распознавания энантиомеров пропранолола использовали хемометрический метод дискриминантного анализа PLS-DA, который позволил однозначно распознать их в лекарственных средствах. Объясненная дисперсия по первым двум главным компонентам составляет 98%, что свидетельствует о хорошей чувствительности и специфичности сенсорной системы при идентификации энантиомеров пропранолола.

Предложенный «электронный язык» можно применять также для экспрессной оценки состава и качества энантиомерных и рацемических препаратов пропранолола, потери активности основных компонентов при неправильном хранении и транспортировке, истечении срока годности, наличия примесей.

*Работа выполнена при поддержке РНФ: грант № 16-13-10257*

## ДИНАМИКИ ВТОРИЧНОГО НАКОПЛЕНИЯ ГУМУСА В РАЗНОВОЗРАСТНЫХ ЗАЛЕЖНЫХ ПОЧВАХ

Мухамедьярова А.Т.

*Казанский федеральный университет, институт экологии и природопользования, кафедра почвоведения, Казань, Россия*

*mukhamedyarova-95@mail.ru*

Накопление в атмосфере парниковых газов и связанные с этим изменения климата воспринимаются в настоящее время как одно из глобальных проблем современного человечества. Одним из методов решения данной проблемы считается перевод пахотных земель низкого плодородия в залежи, что обеспечивает секвестрацию атмосферного углерода за счет вторичного накопления гумуса под залежной растительностью. По результатам исследований И.Н. Кургановой с соавторами (2008 г.) наиболее подходящей для аппроксимации динамики вторичного накопления гумуса с возрастом залежей является логарифмический закон, т.е. максимальное накопление гумуса характерно для начальных стадий формирования залежей. Однако, оценка накопления гумуса под залежной растительностью имеет определенные трудности связанные как с вертикальной анизотропией накопления гумуса (даже в пределах старопахотного горизонта), так и с сильной горизонтальной вариабельностью. Следовательно, для надежной оценки динамики накопления гумуса под разновозрастными залежами необходимо правильное сочетание различных методов отбора почвенных проб и методов статистической обработки полученных результатов.

Изучали два сопряженных разновозрастных залежных участка, приуроченные к одному элементу рельефа, расположенные в Камско-Устьинском районе Республики Татарстан. Почвы – светло-серые лесные на делювиальных суглинках. Молодая залежь в первый этап исследования, проводившийся в 2010 г., имела возраст 2 года и находилась в пионерной стадии зарастания. Залежь 75-80 летнего возраста (2010 г.) возраста была представлена стабильным разнотравно-злаковым луговым фитоценозом, подвергавшимся ранее систематическому сенокошению и не имеющим признаков зарастания древесными растениями. Тогда на изучаемых залежных почвах были заложены 2 систематические гексагональные систематические решетки, из узлов которых были отобраны специальным буром послойные (через 10 см) образцы на глубину до 35 см. В образцах определяли содержание гумуса в трехкратной повторности. Для оценки динамики накопления гумуса в 2015 году был проведен отбор почвенных образцов по той же схеме. В случае молодой залежи удалось найти на местности все точки отбора проб исследований проведенных в 2010 г. и все новые точки отбора проб были строго привязаны к старым. В случае залежи, возрастом около 80 лет точки отбора проб 2010 г. успели сильно засти, и пробоотбор пришлось провести по результатам GPS-навигации, допуская смещение точек пробоотбора на 2-3 м за счет ошибки GPS-навигации. Для оценки значимости разницы в содержании гумуса между залежами 2 года (2010 г.) и 7 лет (2015 г.) использовали парный t-тест, который показал статистически значимое накопление гумуса, которое произошло за 5 лет. Во втором случае пришлось использовать t-тест независимых выборок, который показал, что нельзя игнорировать нулевую гипотезу. Однако, в этом случае возникала опасность совершить ошибку второго рода, т.е. игнорировать альтернативную гипотезу о существовании разницы в содержании гумуса. Следовательно, для данного залежного участка было необходимо использование более мощного статистического аппарата. Было проведено интерполирование пространственных данных с помощью метода обратных взвешенных расстояний (IDW). Было показано, что пространственный анализ позволяет получить более глубокую и надежную информацию о неоднородности накопления гумуса под разновозрастными залежными почвами.

*Автор выражает благодарность доц. К.Г. Гиниятуллину за помощь в подготовке тезиса.*

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ГУМИНОВЫХ ПРЕПАРАТОВ ТИПА «ГУМАТ» НА ВСХОЖЕСТЬ, РАЗВИТИЕ И КАЧЕСТВЕННЫЙ СОСТАВ НЕКОТОРЫХ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ТЕСТ-КУЛЬТУР.

Мухаметзянова Д.А., Валеева А.А.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, институт экологии и  
природопользования, Казань, Россия*

*diana.1122@yandex.ru, valeyabc@mail.ru*

Гуминовые препараты (ГП) являются комплексными биологически активными веществами, представляющими собой водорастворимые соли гуминовых кислот. В оптимальных дозах их применение заметно стимулирует прорастание семян, увеличивает длину и биомассу проростков, улучшает дыхание и питание растений, усиливает ферментативную активность и сокращает поступление в растения тяжелых металлов и радионуклидов [1]. В условиях обилия и разнообразия ГП, предлагаемых для применения в сельском хозяйстве и охране окружающей среды, особую актуальность приобретает всестороннее изучение их свойств с целью оценка их эффективности и безопасности для растений [2]. Целью исследования была оценка активности 6 различных видов гуминовых препаратов типа «Гумат» в лабораторных условиях на всхожесть, рост, развитие и качественный состав тест-культур в начальной стадии онтогенеза.

По результатам исследования лучшая всхожесть пшеницы наблюдается при использовании гуминового препарата Гумат 80 Натрия. Совместное применение гуминовых препаратов Гумат 80 Натрия, Гумат +7 Калия и Гумат ГК БИО с предварительной обработкой семян 0,1% раствором Гумата +7 Калия до посадки стимулирует рост пшеницы. Без предварительной обработки семян 0,1% раствором Гумата +7 Калия лучшие результаты показали варианты, где использовали препараты Гумат+7 Калия и Гумат+7 зерновой-масличный.

1. О.С. Якименко, В.А. Терехова Гуминовые препараты и оценка их биологической активности для целей сертификации. *Почвоведение*, 2011, **11**, 1334-1343.
2. Изосимов, А.А. Физико-химические свойства, биологическая активность и детоксицирующая способность гуминовых препаратов, отличающихся генезисом органического сырья: ... канд.биол.наук: 03.02.08. Москва, 2016, 148с.

## ОЦЕНКА СМАЧИВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ОКСИДНЫХ СПЕКАЮЩИХ ДОБАВОК ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПЛОТНОЙ КЕРАМИКИ ИЗ SiC

Назаров Е.Е., Вартанян М.А., Макаров Н.А., Яровая О.В.

*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

*mariavartanyan@mail.ru*

Применение оксидных спекающих добавок при разработке энергоэффективных методов получения плотных керамических материалов на основе карбида кремния требует выполнения анализа совместимости оксидных компонентов с карбидом кремния до высоких температур (свыше 2000 К), в том числе – изучения смачивания карбида кремния оксидными расплавами.

Поверхностные явления в расплавах достаточно подробно изучены с одной стороны, для металлов и сплавов с преимущественно металлической связью [1], а с другой – для тугоплавких неметаллических систем с высокой степенью ионности [2]; данные о гетерофазном взаимодействии в системах с разноименным типом связи скучны. При решении поставленной задачи в качестве конденсированных фаз (твердой и жидкой) рассматривали карбид кремния SiC и расплав оксидов соответственно. Третьей фазой являлся газ (воздух), содержащий насыщенные пары оксидов, либо содержание насыщенных паров оксидов не учитывали. С учетом теоретических и экспериментальных данных об особенностях взаимодействия карбида кремния с оксидами [3, 4], рассматривали оксиды CaO, MgO, SrO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и оксиды группы Ln<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (на примере Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub>).

Оценочный расчет величины равновесных краевых углов при температуре 2173 К свидетельствует о том, что наименьшее их значение имеют тройные эвтектические композиции на основе указанных оксидов, в частности CaO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (порядка 55,9 и 60° соответственно). Такие расплавы эффективно смачивают поверхность карбида кремния, что дает возможность применять данные эвтектические композиции в качестве добавок, образующих при обжиге жидкую fazу.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках проектной части Госзадания, соглашение № 11.2056.2014/К.*

1. С.И. Попель. М.: Металлургия, 1994, 440 с.
2. А.А. Аппен. М.-Л.: Химия, 1970, 352 с.
3. Ю.С. Нагорнов. *Ж. техн. физики*, 2015, **85**, 5, 71-80.
4. B.N. Oshcherin. *Phys. Stat. Sol. A*, 1976, **34**, K181-K186.

## ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ МОНОЗАМЕЩЁННОГО ПИЛЛАР[5]АРЕНА ЭТИЛЕНХЛОРФОСФИТОМ

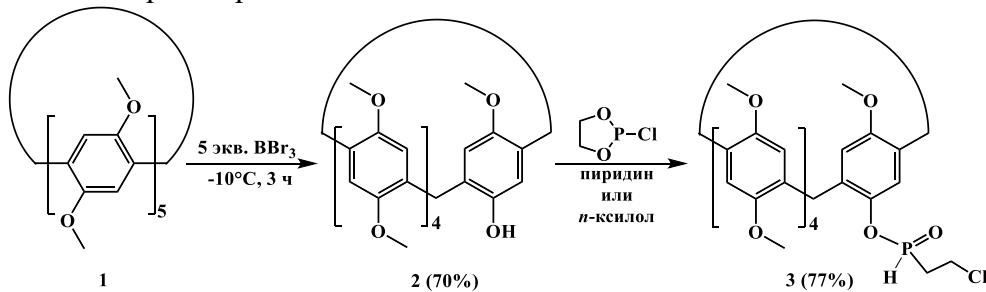
Назарова А.А., Махмутова Л.И., Стойков И.И.

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

*ivan.stoikov@mail.ru*

Системы, содержащие несколько атомов трёхвалентного фосфора, хорошо известны в координационной химии и металлокомплексном катализе. Объединение таких фрагментов с макроциклическими платформами приводит к возможности связывания переходных металлов и проявлению рецепторных свойств по отношению к анионам. В качестве платформы для синтеза соединений такого рода весьма привлекательным представляется новый класс *n*-циклофанов – пиллар[*n*]арены.

Нами было изучено взаимодействие между моногидроксипиллар[5]ареном и этиленхлорфосфитом в двух различных растворителях – пиридине и *n*-ксилоле. Было показано, что реакция в пиридине протекает при комнатной температуре в течение 12 часов с образованием продукта **3**, в то время как в *n*-ксилоле при комнатной температуре образуется смесь продуктов, образование же целевого продукта происходит только при проведении реакции при температуре кипения растворителя.



Таким образом, в рамках проведенной работы был получен новый монофункционализированный пиллар[5]арен, содержащий фрагмент 2-хлорэтилфосфористой кислоты. Структура синтезированного производного была доказана комплексом физических методов ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ , ИК спектроскопией и элементным анализом.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.*

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЕНЗО[*d*]-1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-8-ОНОВ С НЕКОТОРЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ, СОДЕРЖАЩИМИ АКТИВИРОВАННУЮ СВЯЗЬ С=O

Насырова А.И.<sup>a</sup>, Ивкова Г.А.<sup>a</sup>, Миронов В.Ф.<sup>a,b</sup>, Бурнаева Л.М.<sup>a</sup>

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

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

Gulnara.Ivkova@kpfu.ru

Нами проведено фосфорилирование метанола 2-хлорантранилфосфитом (1). Строение синтезированного 2-метокси-3-фенилбензо[*d*]-1,3,2-оксазафосфорин-8-она (2) подтверждено данными спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$  а также рентгеноструктурным анализом (рисунок 1).

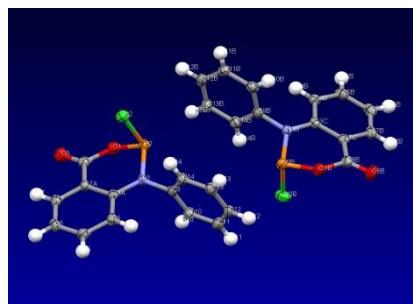
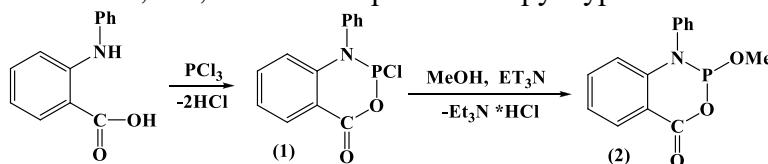
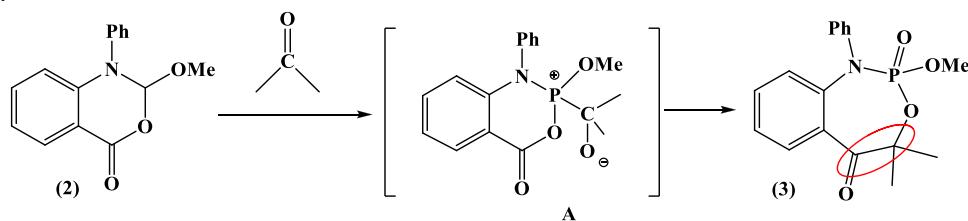


Рисунок 1. – РСА соединения (2).

Исследованы реакции антраксилфосфита (2) с диэтиловым эфиром мезоксалевой кислоты, перфтордиацетилом и метиловым эфиром трифтормировиноградной кислоты. Значительным результатом наших исследований считаем процессы образование новой С-С связи и расширения исходного гетероцикла. Строение продуктов установлено с привлечением методов спектроскопии ЯМР, ИКС, масс-спектрометрии и РСА. Обсуждается возможный маршрут взаимодействия.



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

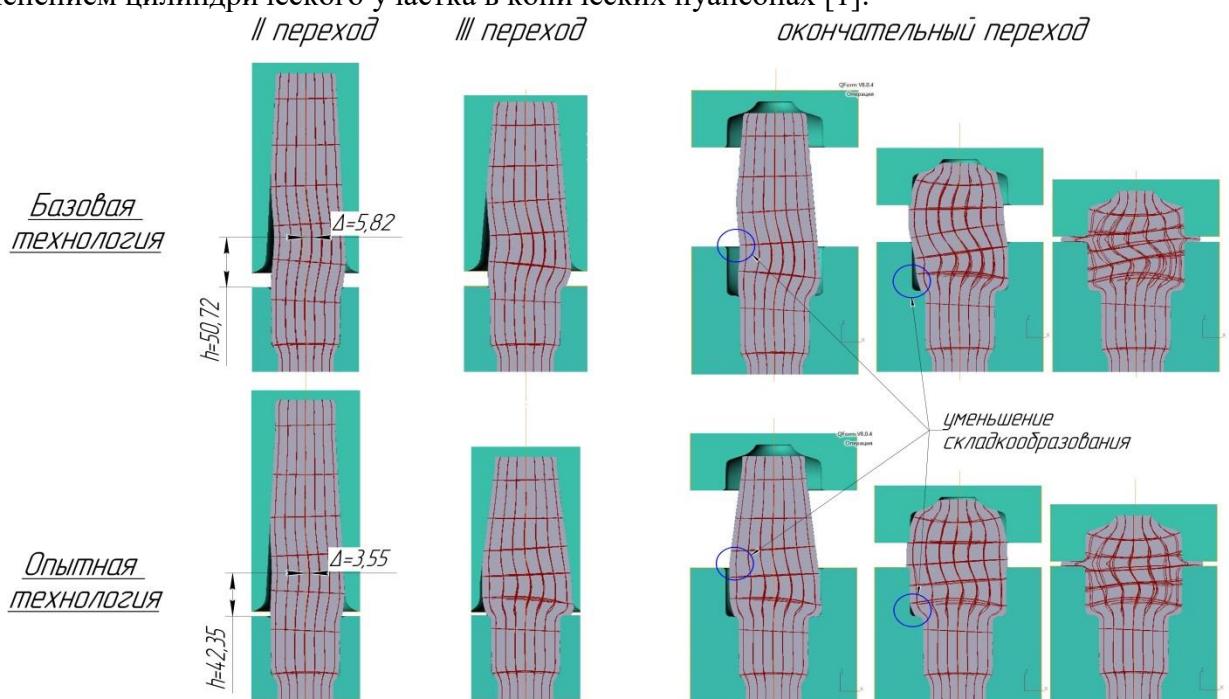
## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВОГО СПОСОБА ФОРМИРОВАНИЯ НАБОРНЫХ ПЕРЕХОДОВ НА ПРИМЕРЕ ПРОЦЕССА ВЫСАДКИ ПОКОВКИ КУЛАК ШАРНИРА

Низамов Р.С., Панкратов Д.Л.

Казанский приволжский федеральный университет, Набережные Челны, Россия

nizamovrs@yandex.ru

Процесс производства поковки кулак шарнира представляет собой высадку 3-х наборных и 4-го окончательного перехода. На практике действующая технология имеет существенный недостаток – образование повторяющихся дефектов незаполнения гравюры штампа и заштамповка заусенца. Дефекты имеют прямую наследственность в готовой детали. Для решения проблемы предлагается изменить геометрию второго и третьего наборного перехода с применением цилиндрического участка в конических пuhanсонах [1].



Моделирование процесса в программном комплексе QForm3DV 8.0.4 для нового предложенного способа высадки позволило подтвердить прогнозируемый результат повышения равномерности распределения металла при высадке в окончательном переходе.

1 Грезина И.В. Разработка техпроцесса штамповки полуоси автомобиля на ГКМ с направленным волокнистым строением (Наука и образование, электронное издание), 2008.

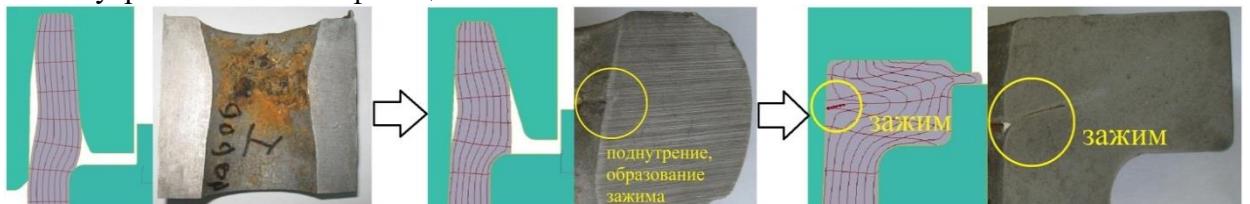
# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫСАДКИ ТРУБНОЙ ЗАГОТОВКИ НА ПРИМЕРЕ ПОКОВКИ КОЖУХ ПОЛУОСИ С ЦЕЛЬЮ АНАЛИЗА ПРИЧИН ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТА ЗАЖИМ

Низамов Р.С., Панкратов Д.Л.

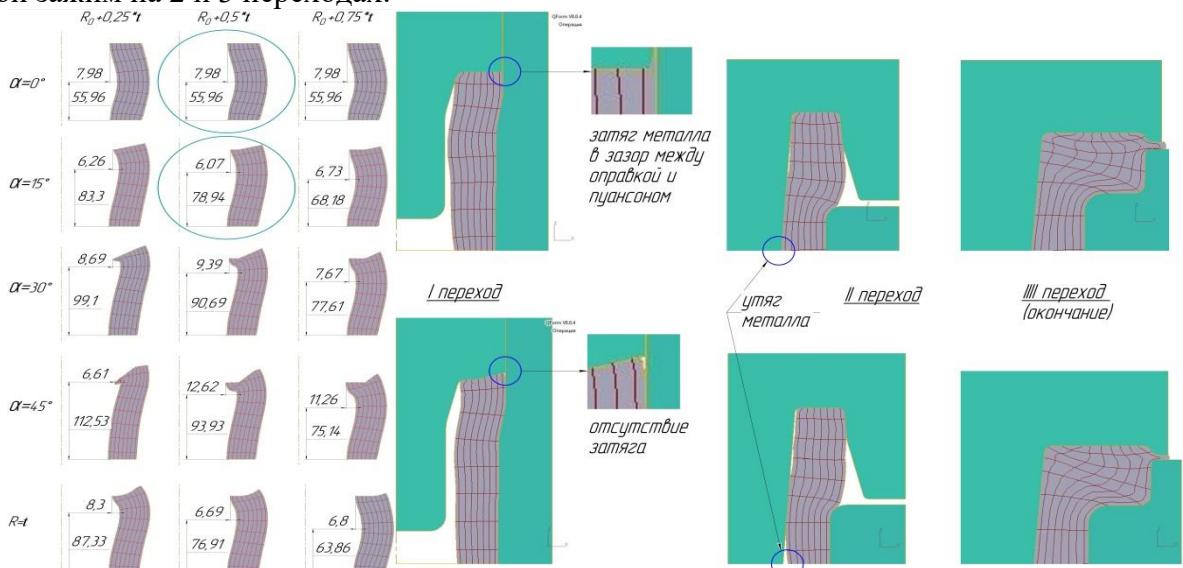
*Казанский приволжский федеральный университет, Набережные Челны, Россия*

*nizamovrs@yandex.ru*

Основная проблема технологического процесса высадки кожуха полуоси – дефект в виде зажима на внутренней полости фланцевой части поковки.



Исследование проблемы на практике и моделирование процесса в QForm2D V 8.0.4 при соблюдении условий, наиболее приближенным к условиям реальной задачи (заготовка из стали 37CrMo5,  $D_t=121$  мм,  $t=22$  мм, температура нагрева заготовки перед штамповкой  $T = 1220^{\circ}\text{C}$ , смазка на гравюре штампа -графит+вода) показало, что образование зажима в окончательном переходе обусловлено появлением поднутрения на 1-ом переходе и его заштамповкой в кольцевой зажим на 2 и 3 переходах.



По результатам моделирования процесса формообразования трубной заготовки с применением инструмента различной конфигурации предложен способ формирования наборного перехода, направленного на исключение образования дефекта зажим в готовом изделии.

## СИНТЕЗ МУЛЬТИИАКАЛИКСАРЕНОВЫХ СИНТЕТИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ НА БИОМАКРОМОЛЕКУЛЫ

Носов Р.В., Стойков И.И.

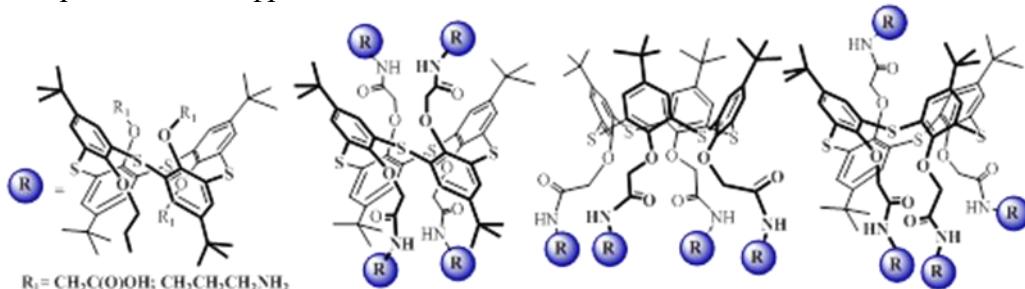
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

*romanosow@mail.ru*

Создание стабильных ферментативных каталитических систем является одним из бурно развивающихся направлений современной органической и супрамолекулярной химии. Одним из подходов к повышению стабильности ферментов в условиях различных температурных и химических стрессов является создание наноразмерных рецепторов с заданной пространственной структурой, способных к взаимодействию с поверхностью биомакромолекул посредством многоточечных взаимодействий.

Одним из перспективных подходов к созданию объемных, наноразмерных полифункциональных рецепторов на биомакромолекулы (белки, ферменты, ДНК) является синтез мультиакаликлических систем на основе молекулярной платформы *n*-трет-бутилиакаликс[4]арена.

Для синтеза мультиакаликс[4]ареновых систем в качестве ядер были выбраны тетрахлорангидриды кислот на основе *n*-трет-бутилиакаликс[4]арена в пространственных конфигурациях конус, частичный конус и 1,3-альтернат. В качестве периферийных макроциклов были выбраны моноамин производные *n*-трет-бутилиакаликс[4]арена. В результате были синтезированы мультиакаликсарены содержащие в своем составе аминогруппы и карбоксильные фрагменты.



Работа выполнена при финансовой поддержке – Гранта РФФИ (№ 16-33-01055 мол\_а) и стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики (СП-1015.2016-4).

## СИНТЕЗ И ИЗМЕРЕНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МИКРО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ $\text{LiTbF}_4$ И $\text{TbF}_3$

Нужина Д.С., Романова И.В.

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

*nuzh.darya@gmail.com*

В последнее время интерес к наноразмерным частицам возрастает благодаря их уникальным физическим и химическим свойствам, отличным от свойств макро- и микрочастиц [1]. Фторидные комплексы  $\text{LiRF}_4$  ( $\text{R}$ =редкоземельный ион) представляют собой класс кристаллических материалов со специальными свойствами. Нанокристаллы таких материалов контролируемой формы, размера, состава, фазы и поверхности обладают уникальными оптическими, электронными, магнитными и каталитическими свойствами, которые принципиально важны для технологического использования [2]. Трифториды редкоземельных ионов демонстрируют при низких температурах разнообразие магнитных свойств и представляют интерес как модельные системы для теоретического исследования магнитного упорядочения при конкуренции диполь-дипольного и обменного взаимодействий [3].

В данной работе произведен направленный синтез соединений  $\text{LiTbF}_4$  и  $\text{TbF}_3$ . Получены микроразмерные образцы  $\text{LiTbF}_4$  с примесью  $\text{TbF}_3$  в разных соотношениях, наноразмерный порошок  $\text{TbF}_3$ . Измерены температурные зависимости намагниченности синтезированных порошков при температурах от 2 до 300 К в магнитных полях 0.01 и 1 Т. Для полученных образцов определены температуры перехода в магнитоупорядоченное состояние. Проведена оценка поведения намагниченности для заданных образцов.

1. С.В. Кузнецов, В.В. Осико, Е.А. Ткаченко, П.П. Федоров. *Успехи химии*, 2006, **75**, 12.
2. Ya-Ping Du, Ya-Wen Zhang, Ling-Dong Sun, Chun-Hua Yan, 2009, **40**, 8574-8581.
3. L.M. Holmes, H.J. Guggenheim. *Journal de Physique*, 1971, **32**, 501-502.

## СИНТЕЗ ЛИПОФИЛЬНЫХ БИСФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ДИАМИНОВ

Нургалиев Д.Д., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

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

*alchemy-rus@yandex.ru*

Фосфорилированные  $\alpha,\omega$ -диамины показали высокую эффективность в процессах жидкостной и мембранный экстракции субстратов различной природы [1,2].

С использованием трехкомпонентной реакции Кабачника-Филдса нами была получена серия липофильных бисфосфорилированных диаминов общей формулы:

$\text{N}^{\circ}$	R	Z
I	n-C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub>
II		(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>
III	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>

Структура полученных соединений доказана комплексом физических методов исследования. Структура продукта (II) также доказана методом рентгеноструктурного анализа:

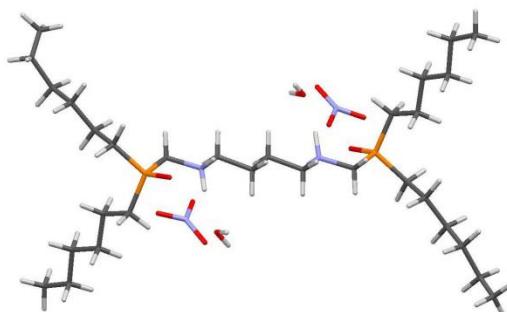


Рисунок. Молекулярная структура комплекса бис(дигексилфосфорилметил)-1,4-диаминобутана с азотной кислотой, полученная методом рентгеноструктурного анализа

Изучение мембранны-транспортных свойств полученных соединений показало, что реагенты являются эффективными переносчиками ионов редкоземельных металлов и скандия.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-03-00458).*

- Гарифзянов А.Р., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В., Черкасов Р.А., *Журнал общей химии*, 2012, **82**, 1619-1627.
- Гарифзянов А.Р., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В., Черкасов Р.А., *Журнал общей химии*, 2013, **83**, 343-344.

## КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ НА ОСНОВЕ СЕЛЕНИДА КАДМИЯ

Оленева П.А., Митрофанов А.А.

*Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*oleneva.polina@list.ru*

Полупроводниковые флуоресцентные нанокристаллы (квантовые точки) в последние годы являются объектом активных фундаментальных исследований, поскольку данные структуры находят широкое применение в самых различных областях естественных наук — от разработки новых оптоэлектронных устройств до визуализации тканей и отслеживания лекарственных веществ в организме. [1]

Тем не менее, обычные синтетические пути для получения таких материалов требует значительных затрат времени, а различные методы синтеза их значительно влияют на стабильность и свойства получаемых материалов. В последнее время наметилась тенденция получения КТ из доступных, стабильных и нетоксичных реагентов путём использования воспроизводимых методик.

Был разработан новый более дешёвый и экологичный способ получения наноразмерных полупроводниковых частиц селенида кадмия в высококипящем растворителе, в качестве которого был использован гексадекан, который по сравнению с триоктилфосфином или октадеценом дешевле, безопаснее для окружающей среды, а также стабильнее на воздухе. В качестве стабилизирующего агента были использованы олеиновая и стеариновая кислоты, которые в свою очередь дешевле и безопаснее для окружающей среды, чем традиционно используемые гексилфосфоновая или тетрадецилфосфоновая кислота.

Квантовые точки на основе селенида кадмия были успешно синтезированы при различных температурах. Влияние основных параметров эксперимента на размер полученных КТ контролировали с помощью рентгенофазового анализа.

Оптические свойства квантовых точек были исследованы с помощью спектроскопии поглощения и измерения фотолюминесценции.

1. Quantum Dots: research, technology and applications. Ed. by R.W. Knoss. Nova Science Publishers, Inc. New York. 2008.

## ИЗУЧЕНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ НЕФТЯНОГО БИТУМА ПО ДАННЫМ ТЕМПЕРАТУРНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ (ТМДСК)

Охотникова Е.С.<sup>a</sup>, Фирсин А.А.<sup>b</sup>, Фролов И.Н.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

*alekseifirsin@gmail.com*

Принято считать, что нефтяной битум в эксплуатационном диапазоне температур является коллоидной дисперсной системой с твердой фазой из агрегатов асфальтенов, диспергированной в среде мальтенов. Из-за сложности химического состава и строения агрегатов дисперсной фазы, фазовые превращения, наблюдаемые в битумах, различаются по своей природе и могут быть сгруппированы в два класса – фазовые и релаксационные переходы.

В работе для исследования фазовых превращений в нефтяном битуме использована ТМДСК. Метод позволил разделить релаксационные термокинетические процессы стеклования от фазовых термодинамических процессов кристаллизации и плавления.

Более сложной является проблема идентификации обнаруженных переходов, раскрытия их физического смысла или природы и механизмов структурных изменений, происходящих в области перехода.

Показано, что битум является коллоидной дисперсной системой только в определенных температурно-временных условиях. Дисперсная фаза может быть представлена агрегатами двух типов. Предельные углеводороды формируют агрегатно-твёрдую, структурно-кристаллическую фазу по закономерностям структурных фазовых переходов первого рода и нуклеационному термодинамическому механизму разделения фаз. Асфальтены и смолы образуют в течение относительно длительного времени (более 16 часов) агрегатно твёрдую структурно аморфную (жидкую) фазу в результате структурного релаксационного перехода стеклования, по спинодальному термодинамическому механизму разделения фаз.

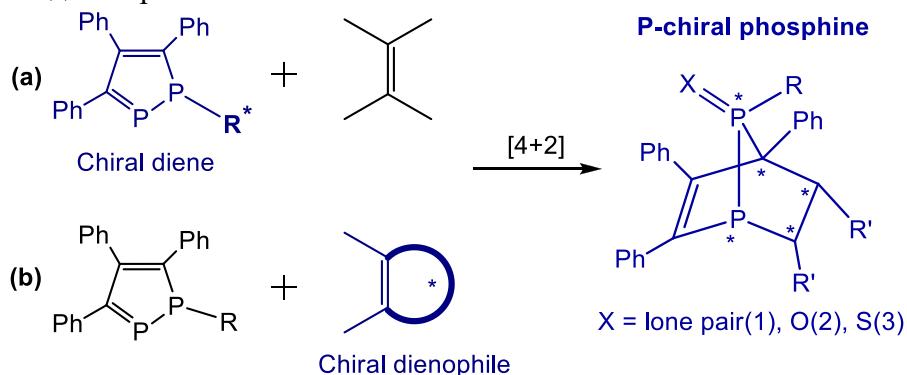
## АСИММЕТРИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ [4+2] ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ 1-АЛКИЛ-1,2-ДИФОСФОЛОВ

Ощепкова Е.С., Загидуллин А.А., Милюков В.А., Синяшин О.Г.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия*

*elenaoschepkova@mail.ru, zagridullin@iopc.ru*

Эффективными катализаторами асимметрического синтеза являются комплексы переходных металлов с лигандами, в центрах которых находится оптически активный атом фосфора (III). Включение атома фосфора в жесткую трициклическую систему позволяет предотвратить возможную рацемизацию атома фосфора. Удобным инструментом молекулярного дизайна хиральных каркасных фосфиновых лигандов являются реакции циклоприсоединения в ряду фосфацикlopентадиенов (фосфолов).<sup>1</sup> В ходе работы были исследованы асимметрические реакции [4+2] циклоприсоединения 1-алкил-1,2-дифосфолов, что является новым подходом в конструировании хиральных фосфинов. Разработан простой метод синтеза хиральных 1-алкил-1,2-дифосфолов на основе реакций 3,4,5-триарил-1,2-дифосфацикlopентадиенида натрия с (-)-альфа-хлорметоксimentолом и (-)-ментилтозилатом. Реакция 1-(+)-(S<sub>1</sub>,S<sub>2</sub>,R<sub>5</sub>)-неоментил-1,2-дифосфола с производными малеиновой кислоты протекает с очень высоким диастереомерным избытком (*d.e.* до 91%), что позволяет выделить энантиочистые фосфины фракционной перекристаллизацией из смеси растворителей.<sup>2</sup> Кроме того, реакция [4+2] циклоприсоединения нехиральных 1-алкил-1,2-дифосфолов с хиральным диеном 2-ментокси-(5*H*)-фураноном протекает с значением диастереоселективности *d.e.* более 95%.



*Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук (МК-7748.2015.3)*

1. (a) F. Mathey, *Acc. Chem. Res.* 2004, **37**, 954. (b) A. Zagidullin et al., *Mendeleev Commun.* 2013, **23**, 117.
2. (a) A. Zagidullin et al., *Eur. J. Org. Chem.* 2015, **24**, 5326. (b) E. Oshchepkova et al., *Phosphorus Sulfur and Silicon*. 2016, <http://dx.doi.org/10.1080/10426507.2016.1212350>.

## ИМИНОДИУКСУСНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ *P*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: СИНТЕЗ И САМОСБОРКА С БИСМАРКОМ КОРИЧНЕВЫМ Y

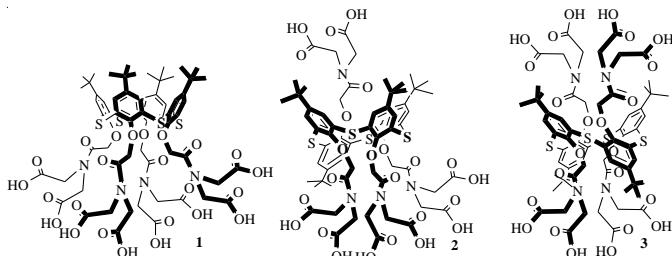
Падня П.Л., Мостовая О.А., Шурпик Д.Н., Стойков И.И.

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

*padnya.ksu@gmail.com*

В настоящее время весьма перспективным направлением химии является изучение красителей, применимых в различных областях человеческой деятельности – медицине, микробиологии, криминалистике. Одним из популярных красителей является Бисмарк коричневый Y (BBY), широко примен器ющийся в гистологической микроскопии, для маркировки мелкой рыбы, а также лечении онкозаболеваний. Большое практическое значение имеет изучение связывания производных тиакаликсарена с BBY, поскольку данные макроциклы являются аналогами пилларааренов, но вместе с тем существенно отличаются от них по пространственной структуре и свойствам.

Были синтезированы иминодиуксусные производные *p*-трет-бутилтиакаликс[4]арена **1-3** в трёх пространственных конфигурациях (конус, частичный конус, 1,3-альтернат), структура и состав которых охарактеризованы методами ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК спектроскопии, ESI масс-спектрометрии и данными элементного анализа.



Взаимодействие соединений **1-3** с BBY показано методами УФ и ЯМР спектроскопии, динамического светорассеяния и ПЭМ. Связывание BBY с октакислотами, находящимися в конфигурациях частичный конус и 1,3-альтернат, сопровождается образованием монодисперсных наноразмерных частиц (40-60 нм). Установлено, что краситель взаимодействует с макроциклами посредством связывания с их кислотными группами, без интеркалирования внутрь макроциклической полости.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (№16-13-00005).*

## ПРОЕКТИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА ИМПУЛЬСНОГО ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ ПРИЕМНОГО УСТРОЙСТВА

Паракина Г.С.

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

*gparakina@bk.ru*

В данной конструкторской разработке был разработан технологический процесс производства импульсного источника питания для приемного устройства. В ходе выполнения работы был проведён анализ различной конструкторской документации и технической литературы, который, в свою очередь, позволил оценить и определить наилучший вариант расстановки элементов, особенности сборочного узла, количественный состав элементов и деталей, которые относятся к пространственной компоновке, особенности размещения и различные варианты установки ЭРЭ и ИМС на плате, имеющиеся виды контактных соединений, а так же способы монтажа навесных элементов, технические требования для обеспечения надёжности и хорошей работоспособности функционирования узла и защиты его от различных воздействий , как внешних, так и внутренних. [1,2].

Расчёт технологичности показал, что печатная плата имеет высокий уровень технологичности. При расчёте вибропрочности выяснили, что собственная частота колебаний выходит за пределы частотного диапазона помех, отсюда следует вывод, что конструкция платы - виброустойчива.

На основании программы выпуска изделия был произведен выбор технологического оборудования, которое будет использоваться при монтаже платы, так же была спроектирована планировка участка сборки и монтажа. Были рассмотрены альтернативные варианты маршрутной технологии и выбран самый производительный из них. Разработан сборочный чертеж печатного узла, технологическая схема сборки, технологическая планировка на размещение оборудования.

1. А.В. Медведев. Печатные платы. Конструкции и материалы. М.: Техносфера. 2005. 304 с.
2. А.В. Медведев. Технология производства печатных плат. М.: Техносфера. 2005. 360 с.

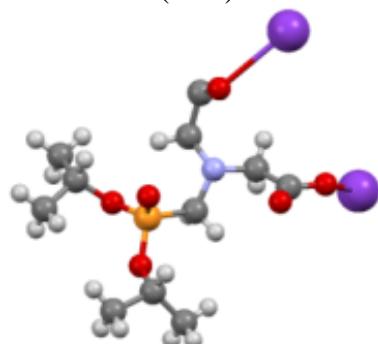
## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА N,N-БИСКАРБОКСИМЕТИЛ-O,O-ДИИЗОПРОПИЛАМИНОФОСФОНАТА

Петров С.Н., ГарифзяновА.Р., Катаева О.Н., Черкасов Р.А.

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

*petrovhimik793@mail.ru*

N,N-бискарбоксиметил-O,O-диизопропиламинофосфонат был получен по реакции Кабачника-Филдса в трехкомпонентной системе диизопропилfosфит / параформ / иминодиуксусная кислота при кипячении в течение нескольких часов в среде ацетонитрила, в качестве катализатора использовали п-толуолсульфокислоту. Продукт получен в виде белых хорошо сформированных кристаллов с выходом близким к количественному. В ИК-спектрах соединения содержится интенсивный сигнал в области  $1040\div1100 \text{ см}^{-1}$  характерный для P=O группы. В спектрах ЯМР  $^{31}\text{P}$  присутствует единственный сигнал в области 24.5 м.д. свидетельствующий о полном прохождении реакции. В спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  наблюдаются два характеристических сигнала – дублет от протонов  $\text{PCH}_2\text{N}$  группы и триплет, принадлежащий протонам метиленовых групп при атоме азота  $\text{N}-(\text{CH}_2)_2$



Молекулярная структура калиевой соли N,N-бискарбоксиметил-O,O-диизопропиламинофосфоната по данным РСА.

Подтверждают структуру полученного соединения также данные рентгеноструктурного анализа для калиевой соли N,N-бискарбоксиметил-O,O-диизопропиламинофосфоната, полученной щелочным гидролизом последнего 50% водным раствором гидроксида калия.

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

## СТАЦИОНАРНАЯ И ВРЕМЯРАЗРЕШЁННАЯ МАГНИТООПТИКА ТОНКОЙ ПЛЁНКИ FePt

Петров А.В., Юсупов Р.В., Никитин С.И.

Институт физики КФУ, Казань, Россия

*flypetrov@yandex.ru*

Для материалов, используемых в магнитной записи, важной характеристикой является размер магнитного зерна. По мере увеличения плотности информации магнитный размер зерна уменьшается, зерна могут становиться суперпарамагнитными и их магнитное состояние оказывается термически неустойчивым. Во избежание термических неустойчивостей уменьшение объема магнитных доменов должно достигаться путем повышения магнитокристаллической анизотропии  $K_u$ . В этом плане интересным для изучения материалом является тонкая пленка соединения FePt. Этот материал является ферромагнетиком с большим коэффициентом анизотропии ( $K_u \approx 7 \cdot 10^7 \text{ erg/cm}^3$ ) [1] и слабым взаимодействием между магнитными частицами, что позволяет достичь линейных размеров магнитных зёрен до 3-4 нм.

В данной работе методами стационарного и времяразрешённого магнитооптического эффекта Керра исследовалась тонкая магнитная пленка FePt с перпендикулярной анизотропией. В стационарном эффекте Керра в полярной геометрии наблюдается симметричная петля гистерезиса, характеризуемая большой величиной угла поворота плоскости поляризации в насыщении – 12.1 миллирадиан, и коэрцитивной силой 1160 Э. Угол поворота Керра в меридиональной геометрии на два порядка меньше и содержит две компоненты: линейную и квадратичную. Эти компоненты соответствуют изменениям составляющих намагниченности, лежащей в плоскости пленки (вдоль приложенного магнитного поля) и перпендикулярной плоскости.

Времяразрешенный фотоиндуцированный угол поворота плоскости поляризации в меридиональной геометрии содержит четную и нечетную по полю составляющие. Нечетный по полю вклад имеет магнитную природу, нарастает с характерным временем 530 фс и медленно релаксирует на масштабе сотен пикосекунд. Он обусловлен, по-видимому, фотоиндуцированным отклонением намагниченности от нормали к плоскости в направлении приложенного поля благодаря уменьшению поля анизотропии, связанному с нагревом и последующим остыванием пленки.

1. Kanazawa, H., et. al. *J. Appl. Phys.*, 2000, **87**, 6143

## ГЕКСАКАРБОНИЛМЕТАЛЛЫ(0) КАК ПРЕКАТАЛИЗАТОРЫ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОГО ГИДРОФОСФОРИЛИРОВАНИЯ ОЛЕФИНОВ

Плотникова А.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

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

*anezka\_93@mail.ru*

Ранее мы продемонстрировали, что взаимодействие диалкилфосфитов с гексакарбонильными комплексами металлов группы хрома приводит к образованию  $\sigma^4\lambda^4$ - (диметилфосфит)пентакарбонилметаллов, в которых OH-группа диалкилфосфористой кислоты отличается значительной кислотностью [1]. Мы предположили, что такие фосфаметаллорганические соединения будут вступать в реакцию электрофильного присоединения по связи C=C олефинов с образованием фосфита и дальнейшей его перегруппировкой в фосфонат.

В данной работе мы описываем наши результаты по разработке катализируемого комплексами металлов группы хрома электрофильного гидрофосфорилирования олефинов, не активированных электроноакцепторными заместителями. Модельная катализитическая система содержала эквимолярные количества олефина и  $(MeO)_2P(O)H$  и 10 мольных процентов  $M(CO)_6$ ; в качестве непредельных субстратов фосфорилирования выступали 1,2-дихлорэтилен, 1,1,2,2-тетрахлорэтилен, стирол и фенилацетилен.

Показано, что наибольшую катализитическую активность проявляет  $Cr(CO)_6$ , обеспечивающий полную конверсию  $(MeO)_2P(O)H$  и практически количественное образование соответствующих фосфонатов, худшим катализатором является  $Mo(CO)_6$ . В результате изучения реакционных смесей методами  $^1H$ ,  $^{13}C$  и  $^{31}P$  ЯМР спектроскопии мы зафиксировали интермедиаты катализического процесса, строение которых позволило предложить механизм обнаруженной нами катализической реакции.

1. Plotnikova A.V., Kuramshin A.I., Galkin V.I. The Acidity of the Hydroxy-tautomeric form of the Dimethylphosphite, stabilized with Chromium Group Metal. Book of Abstracts of 21st International Conference on Phosphorus Chemistry, Kazan, 5-10 June, 2016, P.270.

## ВЗАИМОСВЯЗЬ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЛАЗУРНЫХ ПОКРЫТИЙ И ДЕФОРМАЦИИ КЕРАМИЧЕСКИХ ПЛИТОК

Позняк А.И.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь*

*poznyak\_a@inbox.ru*

При получении деформационно устойчивых глазурованных керамических плиток особое значение имеют технологические характеристики и физико-химические свойства глазурных покрытий. Глазурь, нанесенная на керамическую основу, претерпевает в результате пирохимических реакций ряд изменений в химическом составе и строении, особенно в плоскостях контакта с черепком. Это связано с тем, что при медленном охлаждении глазурное покрытие окончательно не сформировалось и находится в состоянии пластичности, оно не может препятствовать изменению формы керамической основы. Последняя, следовательно, сжимается свободно, соответственно своему коэффициенту линейного расширения. Однако по мере того, как глазурное покрытие при охлаждении теряет свою подвижность, дальнейшее смещение керамической основы в плоскости соприкосновения с глазурью делается невозможным, так как оба слоя между собой скреплены.

Целью настоящей работы является установление взаимосвязи технологических характеристик глазурей и деформации керамических плиток. При проведении исследований выявлено, что при использовании глазурей, обладающих наибольшими показателями температуры начала спекания (920-930 °C) и вязкостью (904-908 Па·с), образцы характеризуются наименьшими значениями деформации, которые составляют порядка 0,6-1,0 %.

Это, вероятно, связано с тем, что легкоплавкие глазури начинают спекаться и плавится при более низкой температуре (менее 900 °C) по сравнению с тугоплавкими и, соответственно, они более длительное время и более активно реагируют с керамическим черепком, это в свою очередь приводит к увеличению усадки в лицевом слое и способствует искривлению плиток в сторону вогнутости.

## ПРОЗРАЧНЫЕ ГЛАЗУРИ ДЛЯ ДЕКОРИРОВАНИЯ ИЗДЕЛИЙ БЫТОВОЙ КЕРАМИКИ

Позняк А.И.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь*

*poznyak\_a@inbox.ru*

Целью настоящей работы является разработка составов прозрачных глазурей для декорирования изделий бытовой керамики преимущественно посудной группы. В результате изучения составов и свойств покрытий, применяемых в настоящее время на предприятиях выпускающих майоликовые изделия, в качестве базовой выбрана алюмоборосиликатная система, на основе которой разработаны составы и синтезированы фритты в следующем диапазоне содержания основных оксидов, мас. %:  $\text{Al}_2\text{O}_3$  6,0-12,0;  $\text{B}_2\text{O}_3$  14,0-22,0;  $\text{SiO}_2$  62,0-70,0 при постоянном количестве оксидов щелочных металлов ( $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ), составляющем 10 мас. %.

Исследование кристаллизационной способности синтезированных фритт методом термической обработки в градиентной электрической печи в интервале температур 500-1100 °C позволило установить, что стекла с содержанием  $\text{Al}_2\text{O}_3$  10,0-12,0 мас. % и  $\text{SiO}_2$  62,0-63,0 мас. % проявляют склонность к кристаллизации, что в дальнейшем приводит к формированию при температуре обжига 940-960 °C глазурных покрытий с белесостью на поверхности. Результаты дифференциально-сканирующей калориметрии разработанных фритт позволили определить температурный интервал размягчения и установить его прямую зависимость от химического состава. Определено, что при суммарном содержании оксидов кремния и алюминия, составляющем 74,0-76,0 мас.% и бора – 14,0-16,0 мас. % температура начала размягчения фритт варьируется в пределах 567,5-576,8°C, при снижении количества тугоплавких оксидов и повышении легкоплавкого  $\text{B}_2\text{O}_3$  наблюдается заметное снижение температуры начала размягчения от 551,1 до 535,4 °C. Показатели блеска синтезированных прозрачных глазурей составляют 64-72 % и находятся в прямой зависимости от соотношения легкоплавких и тугоплавких оксидов.

Проведенные исследования позволили определить область составов фритт, в которой формируются качественные прозрачные глазурные покрытия для майоликовых изделий с требуемыми технологическими характеристиками.

## ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОРАСШИРЕННОГО ГРАФИТА В СУПЕРКОНДЕНСАТОРАХ

Попов М.В.<sup>a</sup>, Баннов А.Г.<sup>a</sup>, Тошевикова М.С.<sup>a</sup>, Юсин С.И.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Новосибирский государственный технический университет,  
Механико-технологический факультет, Новосибирск, Россия

<sup>b</sup> Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

*porovmaxvik@gmail.com*

Терморасширенный графит (ТРГ) представляет собой углеродный материал, который характеризуется низкой плотностью и наличием в основном макро- и мезопор. Терморасширенный графит отличается высокими значениями емкости в связи с высокой удельной поверхностью. Это является ключевым фактором в использование данных материалов в качестве электродных. Важно, что емкость данных материалов можно значительно повысить за счет нанесения наночастиц оксидов металлов [1].

В данной исследовательской работе был получен и исследован материал на основе терморасширенного графита с нанесёнными частицами никеля. Синтез образца проводили по методике, описанной в патенте [2]. Терморасширенный графит с удельной поверхностью 300-350 м<sup>2</sup>/г пропитывали водным раствором соли никеля, затем прокаливали и восстанавливали в среде водорода. По результатам исследования удельная поверхность пор образца составила 42 м<sup>2</sup>/г, при этом удельная емкость полученного образца составила 116 Ф/г.

Таким образом, показано, что приготовленный данным способом материал может быть использован в качестве материала для электрохимических источников тока.

Исследования проводились при поддержке стипендии Президента РФ (проект № СП-69.2016.1).

- Lin Wei, Yuanbing M. Enhanced hydrogen storage performance of reduced grapheme oxide hybrids with nickel or its metallic mixtures based on spillover mechanism. 2016, 1-8.
- Goncharova O.V., Avdeeva L.B., Kuvshinov G.G., Likholobov V.A., Parmon V.N. The catalyst decomposition of hydrocarbons into hydrogen and carbon material and its production method. Patent RU (11) 2064831 (13) C1.

## ПОЛИМЕРНЫЕ ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ МЕМБРАНЫ ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ ЖИДКИХ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СМЕСЕЙ

Потехина Л.Н., Горохолинская Е.О.

Энгельсский технологический институт (филиал) Саратовского государственного технического университета имени Гагарина Ю.А., Энгельс, Россия

*larisa\_potehina@mail.ru*

В различных промышленных технологиях огромную роль играют процессы разделения жидких полидисперсных смесей (растворов). Традиционные процессы разделения растворов (дистилляция, ректификация, экстракция, сорбция-десорбция и др.) характеризуются высокой ресурсоэнергоемкостью. Применение для этих целей мембранный фильтрации приводит к радикальным изменениям в химической, пищевой, фармацевтической и других отраслях промышленности, а также в водоподготовке и водоочистке. Среди белково-углеводных смесей особое место занимает вторичное молочное сырье (ВМС), в частности – молочная сыворотка, которая является биологически ценным пищевым сырьем. Анализ белкового, углеводного и липидного комплексов свидетельствует о высокой ценности молочной сыворотки как пищевого сырья, промышленная переработка которого необычайно перспективна и экономически целесообразна. Для глубокой переработки ВМС наиболее перспективными являются мембранные технологии. Среди мембранных методов важнейшее место занимают нано- и ультрафильтрация, которые перспективны для выделения и концентрирования из многокомпонентных смесей веществ с широким диапазоном молекулярных масс ( $M=0,1-1000$  кДа (животных, молочных, растительных белков и др.). Основным элементом любой фильтрационной системы является селективно проницаемая мембрана, которая изготавливается преимущественно из полимеров. В качестве исходного полимерного сырья в данной работе был использован промышленный порошкообразный воздушно-сухой диацетат целлюлозы (ДАЦ) хлопкового происхождения. В качестве растворителя в исследованных нами полимерных смесях был использован технически чистый ацетон. В работе были исследованы реологические и оптические характеристики растворов, порометрические и эксплуатационные (проницаемость и селективность) характеристики мембран. Для баромембранной фильтрации проницаемость мембран характеризует ее способность пропускать через себя поток фильтрата под действием градиента давления. Для количественного определения проницаемости использовалась удельная производительность мембранны G. Селективность мембраны характеризует ее способность разделять компоненты смеси. Для количественного определения селективности использовалась величина задерживающей способности (фактора разделения) мембранны φ. Проницаемость и селективность разработанных мембран определялись в процессе фильтрации многокомпонентной жидкой смеси, в качестве которой (объект исследования) использовалась творожная сыворотка, очищенная от жировых включений в поле центробежных сил. В опытах исследовалась проницаемость мембран, как по творожной сыворотке, так и по дистиллированной воде.

Проведенные исследования дают основания рекомендовать разработанные полимерные фильтрационные мембранны для разделения жидких полидисперсных смесей, в том числе для установок ультрафильтрации вторичного молочного сырья.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНОАКТИВАЦИИ ЦЕМЕНТА НА МЕХАНИЧЕСКУЮ ПРОЧНОСТЬ БЕТОНА

Приходов Д.А.

«Сибирский Федеральный Университет», Красноярск, Россия

*pramid1985@mail.ru*

Для улучшения физико-механических и эксплуатационных свойств композиционных материалов применяют различные методы предварительной обработки их составляющих компонентов.

Регулирование процесса структурообразования цементных композитов, наряду с подбором оптимальных структурных показателей, возможно также за счет применения различных технологических приемов, одним из которых является активизация твердения вяжущих. В настоящее время механическая активация находит все более широкое применение в качестве высокоэффективного способа ускорения физико-химических и технологических процессов обработки сырья для производства многих строительных материалов. Согласно теории, П. Тиссена [1], при трении или ударе в области контакта сталкивающихся твердых тел происходит мгновенное выделение большого количества энергии, при этом некоторая часть вещества переходит в короткоживущее плазменное состояние, что и является причиной возбуждения химической активности.

Для исследования влияния механоактивации цемента на физико-механические свойства бетона использовался цемент марки ПЦ-500 Д0 производства Топкинского цементного завода. Механоактивация проводилась продолжительностью от 5 до 25 мин. Более 25 минут механоактивации, приводило к визуальному агломерированию частиц цемента, поэтому дальнейшая активация представляется не целесообразной.

Установлено, что после 10 минут активации начинается агломерация частиц цемента, за счет избыточной поверхностной энергии, что также подтверждается и уменьшением удельной площади поверхности частиц цемента. Исследование механической прочности активированных образцов цемента ПЦ-500 Д0 на 28 сутки нормального твердения показало, что 10 минут механоактивации зерен цемента приводит к увеличению механической прочности на сжатие образцов бетона на 30%.

1. В.И. Молchanov, О.Г. Селезнева, Е.Н. Жирнов Активация минералов при измельчении. М.: Недра, 1988. 208 с.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ИНСУЛИНА И ЕГО АНАЛОГОВ

Проворова Ю.Р., Зильберг Р.А., Максютова Э.И., Яркаева Ю.А., Сидельников А.В.

*Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*

*ZilbergRA@yandex.ru*

Инсулин – гормон пептидной природы, образуется в бета-клетках островков Лангерганса поджелудочной железы. Его основная функция заключается в поддержании постоянного уровня глюкозы в крови. В настоящее время человеческий инсулин и его аналоги, в основном, получают генно-инженерным способом с использованием рекомбинантной ДНК-технологии. Аналоги инсулина отличаются друг от друга положением аминокислот и других заместителей в цепи полипептида и имеют различное время действия.

С использованием методов хемометрики разработан вольтамперометрический способ идентификации и распознавания лекарственных средств различных производителей, содержащих инсулин и его аналоги. Для апробации вольтамперометрического способа идентификации и распознавания инсулиновых препаратов были исследованы препараты: Лантус, Апидра, Биосулин Р, Левемир, Новорапид Флекспен, Новорапид Пенфилл. Полученные на модифицированных полиариленфталидами стеклоуглеродных электродах вольтамперограммы преобразовывали методом главных компонент (МГК). Предложенная мультисенсорная система чувствительна к составу вспомогательных веществ в лекарственных средствах, содержащих инсулин, что позволяет их надежно идентифицировать.

Таким образом, с использованием вольтамперометрической системы типа «электронный язык» на основе стеклоуглеродных электродов, модифицированных полиариленфталидами с различным числом дифенилентио- и дифениленоксидных фрагментов в мономерных звеньях основной цепи полимера, и методов хемометрики, показана возможность экспрессной вольтамперометрической идентификации и распознавания лекарственных средств, содержащих инсулин и его аналоги, полученные методом рекомбинантной ДНК-технологии и отличающиеся друг от друга положением аминокислот и других заместителей в полипептиде. Следует заметить, что предложенный подход, возможно применять для экспресс оценки качества фармацевтических препаратов инсулина.

*Работа выполнена при поддержке РНФ: грант № 16-13-10257*

## СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ И ИХ ВЗАЙМОДЕЙСТВИЕ С БИОЛОГИЧЕСКИ ВАЖНЫМИ МАКРОМОЛЕКУЛАМИ

Рахимбекова А., Якимова Л.С., Стойков И.И.

*Химического института им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, Казань, Россия*

*asima.astana@outlook.com*

Воздействие лекарств в строго определенное место организма, в определенных дозах является одной из главных проблем в современной медицине. На соединения, которые, во-первых, способны как селективно, так и обратимо связываться с биологически важными макромолекулами, во-вторых, которые упаковывают макромолекулы в нано размеры и, в-третьих, растворимые в воде, возлагают большие надежды. Они могут выступать в качестве терапевтических и диагностических средств. Такими веществами на сегодняшний день являются гибридные органо-неорганические материалы на основе диоксида кремния.

Цель настоящей работы - разработка подходов к синтезу поверхностно-модифицированных наночастиц диоксида кремния фрагментами (сульфокислотными и аминогруппами) способными селективно и эффективно взаимодействовать с биологически важными макромолекулами.

Структуры поверхностно-функционализированных наночастиц диоксида кремния были охарактеризованы рядом физико-химических методов: ЯМР  $^1\text{H}$ , ИК, УФ спектроскопией; методами динамического светорассеяния, совмещенной термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии.

Исследование взаимодействия гибридных наночастиц диоксида кремния, модифицированных 3-аминопропилтриэтоксисиланом и 1,3-пропансульфоном, с такими макромолекулами как ДНК тимуса теленка, альбумин, показало, что происходит не только образование комплексов, но и упаковывание макромолекул. Методом динамического светорассеяния показано, что размеры комплексов модифицированного диоксида кремния с ДНК тимусом теленка и альбумином составляют приблизительно  $965 \pm 50$  нм и  $500 \pm 10$  нм. Константа ассоциации альбумина и иммобилизованного диоксида кремния, полученная УФ титрованием составляет  $5 \times 10^5$ .

## ШИРОКОПОРИСТЫЕ КРИОГЕЛИ ИЗ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА В КАЧЕСТВЕ ПОЛИМЕРНОЙ ОСНОВЫ БИОСОВМЕСТИМЫХ ГУБЧАТЫХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Родионов И.А.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова, Лаборатория  
криохимии (био)полимеров, Москва, Россия*

*ilyarodionov2@gmail.com*

Широкопористые полимерные криогели, формируемые в неглубоко замороженных средах, обладают большим прикладным потенциалом. Например, губчатые криогели на основе различных биополимеров, в частности белков, являются нетоксичными и поэтому представляют интерес в качестве биомедицинских материалов. К ним относятся широкопористые криогели на основе альбумина сыворотки крови, которые могут служить полимерной основой биоразлагаемых носителей лекарственных веществ.

Криотропным гелеобразованием водных растворов сывороточного альбумина в присутствии денатуранта (мочевина) и низкомолекулярного тиола (цистеин) получены губчатые белковые криогели. Показано, что такие их свойства, как выход гель-фракции, степень набухания полимерного каркаса и размеры макропор, определяются соотношением компонентов в исходной реакционной системе и температурой ее криогенной обработки [1].

Насыщением губчатых криогелей водным раствором антибактериального препарата, замораживанием набухшего материала с его последующей лиофилизацией получен ряд препаратов, содержащих такие вещества антибиотического действия, как ванкомицин, кларитромицин и др., активные в отношении патогенных микроорганизмов-воздушителей гнойных воспалений. По результатам микробиологических испытаний *in vivo* (проведены в ЦИТО МЗ РФ) продемонстрировано, что полученные препараты эффективно функционируют в качестве депо-форм антибиотиков, высвобождая действующее вещество, и могут рассматриваться как перспективные агенты для химиотерапии инфицированных ран. Поскольку полимерная основа нетоксична и биодеградируема, то нет необходимости в ее последующем извлечении из раны.

1. Rodionov I.A., Grinberg N.V., Burova T.V., Grinberg V.Ya., Lozinsky V.I. *Soft Matter*. 2015. **11(24)**, 4921-4931.

## ОЦЕНКА УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ МЕТАЛЛОРЕЖУЩИХ СТАНКОВ.

Сабиров А.Р.

*Набережночелнинский институт (филиал) Казанского Федерального университета,  
Набережные Челны, Россия*

*A.Sabirov.R@yandex.ru*

Основное требование к технологическому процессу изготовления – это обеспечение заданной точности детали. Основными причинами погрешностей обработки являются: недостаточная точность и жесткость станка; неточность изготовления и недостаточная жесткость режущего и вспомогательного инструмента; погрешности установки заготовки на станке и ее деформация при зажиме или под действием усилий резания и нагрева.

Погрешности, вызванные собственными и контактными деформациями узлов станка, в общем балансе точности составляют 40-90%.

Возможны следующие методы исследования поля деформаций:

1. Экспериментальный. Прикладываются нагрузки в местах крепления инструмента и заготовки, измеряется деформация в этих местах. Этот способ трудоемок, требует специальной экспериментальной оснастки. Исследование можно проводить непосредственно при резании.

2. Расчетный. Определение деформаций под действием нагрузок производится с применением какой-либо модели, учитывающей жесткость технологической системы. В современных условиях наиболее удобным и достоверным способом является конечно-элементное моделирование.

В нашем случае производилось расчетное определение деформаций под действием нагрузок с применением конечно-элементного моделирования, учитывающей жесткость технологической системы в системе UNIGRAPHICS NX. При моделировании были учтены особенности системы важные для этого этапа: заданы свойства материалов компонентов, нагрузки, ограничения, условия контакта моделей в сборке. Далее была создана, конечно – элементная модель системы и проведён расчёт деформаций.

1. Рудаков К.Н. FEMAP 10.2.0. Геометрическое и конечно-элементное моделирование конструкций. К.: КПИ, 2011. 317 с.

## КОЛЛОИДНЫЙ СИНТЕЗ ПАРАМАГНИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdMnSe В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Сагдеев Д.О.<sup>a</sup>, Шамилов Р.Р.<sup>a</sup>, Воронкова В.К.<sup>b</sup>, Суханов А.А.<sup>b</sup>, Галяметдинов Ю.Г.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский Физико-Технический Институт КазНЦ РАН, Казань, Россия

*demsagdi@yandex.ru*

Квантовые точки (КТ), легированные ионами марганца могут быть использованы в качестве составляющей биологического агента для анализа Люминесценция-МРТ [1] и покрытия фотоэлектродов солнечных батарей с целью повышения их чувствительности [2]. Также исследуется возможности использования КТ в качестве элементов памяти [3]. Синтез парамагнитных КТ в коллоидных растворах позволяет контролировать размер, а значит и люминесцентные свойства наночастиц, однако широко изученный коллоидный синтез в органических растворителях требует использования высоких температур и токсичных растворителей.

Настоящая работа посвящена исследованию методик синтеза КТ CdMnSe в низкокипящих растворителях и свойств получаемых нанокристаллов. Были получены водорастворимые КТ CdMnSe, с молярным соотношением Cd:Mn 0,95:0,05, стабилизированные L-цистеином, а также, для сравнения оптических свойств КТ CdSe, также стабилизированные L-цистеином.

Были сняты и сравнены спектры фотолюминесценции и поглощения КТ CdMnSe и CdSe. Ширина пика люминесценции оказалась довольно большой, что говорит о том, что нанокристаллы имеют большое количество поверхностных дефектов, что характерно для коллоидного синтеза в водной среде в целом, вызванных в том числе и ионами марганца. Максимум интенсивности фотолюминесценции КТ, содержащих в составе марганец достигается при длине волны 583 нм, для недопированных КТ – 561 нм, что говорит о том, что внедрение ионов марганца в КТ смещает пик люминесценции в красную область. Первый экситонный пик поглощения КТ Cd<sub>0,95</sub>Mn<sub>0,05</sub>Se приходится на длину волны 427 нм, для недопированных CdSe наблюдается 2 пика – на длинах волн 392 и 476 нм.

Подтверждения внедрения ионов Mn<sup>2+</sup> в квантовые точки были получены двумя методами: путём рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и ЭПР-спектроскопии. Процентное содержание марганца, относительно общей доли катионов в КТ, согласно результатам РФА составляет ~ 4,3%, что меньше, чем соотношение исходных реагентов. Это объясняется большей, по сравнению с ионами марганца, реакционной способностью ионов кадмия. Спектр ЭПР показал 6 линий Зеемановского расщепления, характерные для ионов Mn<sup>2+</sup>.

*Работа выполнена при поддержке гранта Минобразования № 4.323.2014/K*

1. S. Wang, B. Jarrett, S. Kauzlarich, A. Louie, *J. Am. Chem. Soc.*, 2007, **129**(13), 3848-3856.
2. Q. Dai, E. M. Sabio, W. Wang, J. Tang, *Applied Physics Letters*, 2014, **104**, 183901.
3. R. Beaulac, L. Schneider, P. Archer, G. Bacher, D. Gammelin, *Science*, 2009, **325**, 973-976.

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ПРОМЫШЛЕННО ВАЖНОГО ЭФИРА ЭТИЛПРОПИОНАТА

Садаева А.А, Тойкка М.А.

*Институт Химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*a.sadaeva@chem.spbu.ru*

Среди объектов, представляющих интерес для физико-химических исследований, особое место занимают фазовые равновесия в системах с возможностью протекания химических процессов. Информация о фазовых и химических равновесиях необходима как для развития термодинамического подхода в целом, так и для решения ряда прикладных задач. В частности, реакционная ректификация (совмещение стадий химической реакции и разделения) позволяет достичь существенного повышения степени конверсии реагентов, снижения энергетических затрат и экологических рисков [1].

Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию физико-химических свойств многокомпонентных жидкофазных расслаивающихся систем. В качестве объекта исследования выбрана система с реакцией синтеза-гидролиза промышленно важного эфира этилпропионата, которых входит в состав пищевых ароматических эссенций (пропионовая кислота – этиловый спирт – этилпропионат – вода). Растворимость указанной системы была изучена методом изотермического титрования при температурах 20, 30 и 40 °С. Химическое равновесие было изучено при тех же температурах. Анализ химически равновесных смесей проводился двумя различными методами: классическим (газохроматографическим методом) и относительно новым – методом ядерного магнитного резонанса. На основе полученных экспериментальных данных были построены поверхности растворимости и поверхности химического равновесия в тетраэдре составов. Рассчитаны термодинамические константы равновесия.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ (СП-2140.2016.1). Авторы выражают благодарность Ресурсному Центру СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования» за помощь в проведении эксперимента.*

1. F. Omota, A.C. Dimian, and A. Bliek. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, **58(14)**, 3159-3174.

## НОВЫЕ ДИАЗИДОПРОИЗВОДНЫЕ 2(5*H*)-ФУРАНОНА: СИНТЕЗ И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Сайгитбаталова Е.Ш., Ильина Е.В., Потапова Л.Н., Курбангалиева А.Р.

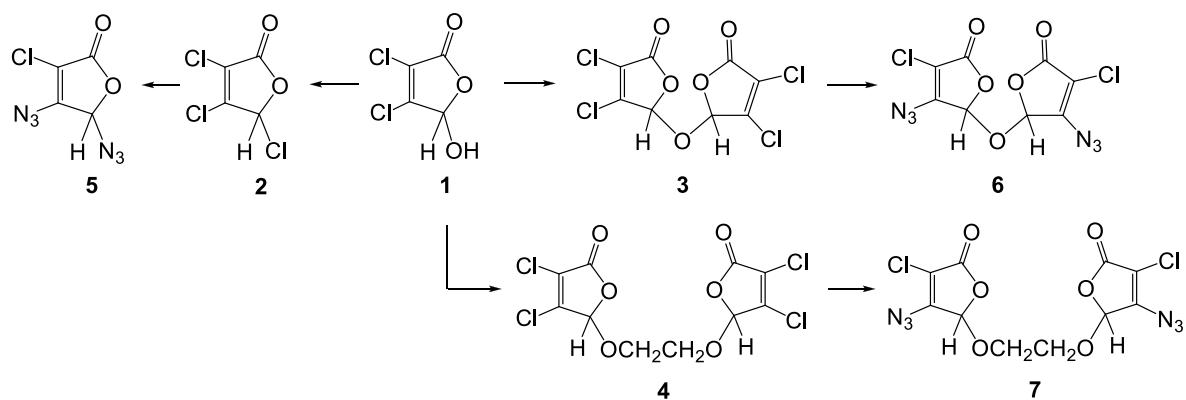
*Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, Казань, Россия*

*lena824773@yandex.ru*

В настоящее время внимание химиков-синтетиков обращено в сторону создания новых химических соединений, несущих в своем составе несколько различных функциональных групп, проявляющих различные виды биологической активности. Наиболее универсальными и широко применяемыми строительными блоками в этом случае выступают органические азиды. Целью данной работы явилась разработка методов синтеза и изучение химического потенциала диазидопроизводных 2(5*H*)-фуранонового ряда в реакциях с фосфорсодержащими нуклеофильными реагентами и терминальными алкинами.

Из мукохлорной кислоты **1** были синтезированы 3,4-дихлор-2(5*H*)-фураноны **2–4**, обработка которых избытком азида натрия привела к образованию диазидопроизводных **5–7**. При взаимодействии диазидов **5–7** с двумя эквивалентами трифенилfosфина с хорошими выходами получены дииминофосфораны. В реакциях [3+2]-циклоприсоединения диазидов **5–7** с фенилацетиленом и 5-пропаргилокси-2(5*H*)-фураноном получены новые азотсодержащие гетероциклические системы, несущие фрагменты 1,2,3-триазола и  $\gamma$ -лактонные циклы.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров*



## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ В ЭЛЕКТРОДУГОВОМ ПЛАЗМОТРОНЕ.

Самигуллин А.Д., Самигуллина А.Р.

*Набережночелнинский институт КФУ, Набережные Челны, Россия*

*samigullin86@mail.ru*

Мощный импульс развитию электродуговых генераторов горячего газа дала ракетная техника. Для наземной имитации условий полета ракеты в атмосфере необходимо было получить сверхзвуковые струи воздуха, - нагретого до высокой температуры (для некоторых траекторий полета превышающей 10 000 К). Эта задача была решена с помощью электродуговых устройств, получивших название плазмотронов.

Эффективность данных типов плазмотронов существенно зависит от правильной организации геометрии электродной системы и геометрии магнитных полей. Поэтому важным является построение физико-математических моделей для данной геометрии плазмотрона.

Моделирование производилась на основе пакета STAR-CCM+.

Разработанные модели процессов ускорения в данном типе плазмотронов с собственным магнитным полем учитывают свойства рабочего тела (газ-воздух) и геометрию канала.

Результаты счета по направлению векторов скоростей потока представлены на рисунке 1.

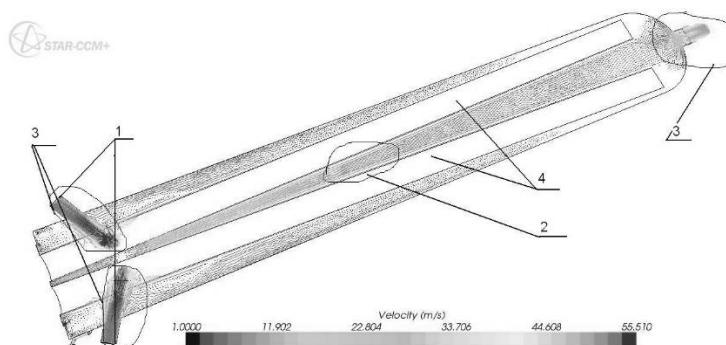


Рисунок 1. – Векторное поле скоростей потока воздуха.

На рисунке 1 по каналу 1 подаем плазмообразующий газ. Электрическая дуга движется между электродами 4. В области 3 находится поток воздуха высоких скоростей, а в области 2 находится поток воздуха низких скоростей.

Вывод: Исходя из построенного векторного поля скоростей проектировать геометрию канала таким образом, что бы линии тока течения потока газ не имели обратного направления, т.е. газ во всех областях в канале плазмотрона двигался в том же направление что и электрическая дуга.

1. Клебанов Ю.Д. Физические основы применения концентрированных потоков энергии в технологиях обработки материалов. М.: ИЦ МГТУ «Станкин», Янус-к, 2005. 220 с.
2. И.Х. Исрафилов и др. Компьютерное моделирование течения газа в разрядной камере импульсного плазменного генератора. *Известия Тульского государственного университета. Технические науки*, 2012, 6, 90-97.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НАГРУЗКИ НА ЭЛЕКТРОСЕТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ О ПОГОДЕ НА ПРИМЕРЕ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН (РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ)

Сафина Л.И.

*ИВМиИТ КФУ, Казань, Россия*

*liliasafina94@gmail.com*

В современных условиях энергетическая сфера является не только неотъемлемой частью коммерческого мира, но и оказывает сильное влияние на повседневную жизнь населения. Поэтому решения задач энергетики имеют большое значение для индустрии и человечества в целом.

Задача прогнозирования заключается в том, чтобы предсказать необходимые результаты для поставленной задачи с минимальной ошибкой.

Задача прогнозирования нагрузки на электросеть заключается в предсказании необходимых для продажи объёмов электроэнергии. Наиболее точный прогноз позволяет существенно сократить расходы поставщика. Анализ полученных данных способствует определению пиковых периодов, так называемые часы пиковой нагрузки. Пиковые периоды могут регулировать цены на электроэнергию. Прогнозирование нагрузки на электросеть позволяет предсказать аварийные ситуации на станциях.

Объёмы, затраченной электроэнергии, зависят от многих факторов. Наиболее активно на нагрузку электросетей влияют климатические, геологические и социальные признаки. Задачи прогнозирования нагрузки на электросеть являются индивидуальными для каждой местности.

Для решения поставленной задачи использовалось машинное обучение – область искусственного интеллекта, основанная на обучении системы решать конкретные задачи, используя большие объёмы данных.

Для прогнозирования нагрузки по Республике Татарстан были рассмотрены несколько методов машинного обучения, решающие задачу регрессии. В результате исследования были получены достаточно высокие результаты: наименьшая средняя относительная ошибка составила 2.17% от точных значений. Данные показатели были получены при использовании метода Gradient Tree boosting. Метод восстановления линейной регрессии дало среднее относительное отклонение, равное 7.91% от верного значения. Использование деревьев решений (англ. Decision Tree) и метода вероятностного леса (англ. Random Forest) показало наихудшие результаты. Среднее относительное отклонение от верного значения составило 10.44%.

При этом исследователи предполагают, что данные показатели можно улучшить и активно работают над этим вопросом.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ РЕЗОНАТОРОВ.

Сафиуллина Г.А.

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

*sga9393@mail.ru*

Лазерная технология - одна из самых важных направлений научно-технических инноваций в современном обществе. Сейчас лазеры используются во многих отраслях, например, при строительстве летательных беспилотных аппаратов, а также в промышленности и в электрической технике, в ювелирной работе, и в медицине. Не менее часто лазеры используются и в быту. В каждой квартире, имеются устройства с лазером. Это принтеры, оптические дисководы компьютеров и лазерные указки [3]. Во всех магазинах имеются оппознаватели штрих – кодов, это тоже изделие на основе лазерного луча. На концертах и праздниках лазерные световые шоу. Которыми наверное уже никого не удивишь. Но основная отрасль использования лазеров – промышленные цели [2].

В работе выполнено исследование оптического резонатора [1], обеспечивающего формирование электромагнитного поля коаксиальной конфигурации компактного лазера в оптико-геометрическом приближении характеристик поля асферического резонатора для лазеров с активной средой кольцевого сечения.

Полученные в результате работы данные позволяют принимать решения о применении таких резонаторов без проведения дорогостоящих экспериментальных и изготовления опытных образцов.

1. А. Джеррард, Дж. М. Берч Введение в матричную оптику: Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 344 с.
2. Быков В.П., Силичев О.О. Лазерные резонаторы. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004. 320 с
3. Звелто О. Принципы лазеров: Пер. с англ. – 3-е перераб. и доп. изд. М.: Мир, 1990. 560 с.

## ПОЛУЧЕНИЕ КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОНТАКТНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

Скиба М.И.<sup>a</sup>, Макарова А.К.<sup>a</sup>, Сорочкина О.А.<sup>a</sup>, Воробьев В.И.<sup>b</sup>, Кравченко Д.Г.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Украинский государственный химико-технологический Университет,  
Днепропетровск, Украина

<sup>b</sup> Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт  
имени Игоря Сикорского», Киев, Украина

Rita-vorobyova@yandex.ru

Наночастицы серебра характеризуются сочетанием ценных физико-химических свойств, что обуславливает перспективность их использования в различных областях техники, промышленности косметики, бытовой химии, пищевой промышленности, водоподготовки и др. Последнее подтверждается наличием значительного количества работ, посвященных разработке инновационных методов получения серебряных наночастиц и их свойствам. В связи с этим разработка новых методов получения наночастиц серебра без использования является актуальной задачей.

Перспективным в этом отношении представляется метод радиационно-химическое восстановление (или окисления) ионов металлов в водных растворах, которое осуществляется ионными и радикальными частицами, генерируемых под действием ионизирующего излучения, плазмы (коронный, барьерный или искровой плазменные разряды). Отдельное место среди плазмохимических разрядов занимает неравновесная низкотемпературная плазма [1]. Плазменный разряд генерируется между электродом находится в газовой фазе и поверхностью жидкости в объеме которой находится второй электрод. Таким образом химические превращения на границе раздела фаз обусловлены комплексным воздействием электрохимического окисления-восстановления; реакциями фотолиза, инициируемые, УФ - облучения; потоком заряженных частиц из газовой фазы на поверхность жидкой среды. Авторами работы предложено использование контактной неравновесной низкотемпературной плазма (КНП) как инструмент синтеза коллоидных растворов наночастиц серебра. В плазмохимических обработанных растворах, с помощью УФ-спектроскопии получено присутствие характерного пика поверхностного плазмонного максимума поглощения при 400–410 нм, что характерно для сферических наночастиц серебра. Исследовано влияние прекурсора на получение коллоидных растворов наночастиц серебра. В качестве последнего были апробированы нитрат серебра (I) и перхлорат серебра (I). Установлено, что коллоиды, полученные с  $\text{AgNO}_3$ , при прочих равных условиях, характеризуются узким распределением частиц по размерам 5–70 нм. Анализ спектров поглощения растворов обработанных КНП в течение разного промежутка позволило установить, что выделению наночастиц металла предшествует ряд промежуточных стадий образования, неустойчивых кластеров, в процессе их последовательного слияния формируют крупные частицы до появления квазиметаллических и дальше наноразмерных частиц. Исследовано влияние начальной концентрации прекурсора и энергетических параметров плазмохимического воздействия на процесс синтеза золей. Исследована коллоидно-химические свойства полученных золей. Была исследована антимикробная активность наночастиц серебра против дрожжей, кишечной палочки и золотистого стафилококка. Как показывают результаты, рост дрожжей и кишечной палочки были заторможены при низкой концентрации наночастиц серебра.

1. Pivovarov A.A., Kravchenko A.V., Tishchenko A.P., Nikolenko N.V., Sergeeva O.V., Vorob'eva M.I., Treshchuk S.V. Contact Nonequilibrium Plasma as a Tool for Treatment of Water and Aqueous Solutions: Theory and Practice. *Rus.Jour. of Gen.Chem.*, 2013, **57(3-4)**, 134-145.

## МИНЕРАЛОНАПЛНЕННЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Скрябнев Г.В.<sup>b</sup>, Балькаев Д.А.<sup>a,b</sup>, Беззаметнов О.Н.<sup>b</sup>, Амирова Л.М.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский федеральный университет, Казань, Россия

<sup>b</sup> Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань, Россия

*grigori116@mail.ru*

В докладе представлены результаты исследования влияния цеолит-содержащей глиняной породы на реологические, физико-механические и теплофизические свойства ряда полимерных композиций на основе полипропилена, также охарактеризованы технологические режимы получения.

В работе использовали: блок-сополимер пропилена и этилена марки: РР 8300N. В качестве наполнителя использовали цеолит-содержащую породу различной дисперсности и различные совмещающие агенты.

Смешение и грануляцию компонентов дисперсно-наполненных композитов проводили в двухшnekовом экструдере Scientific LTE 16-40.

Реологические испытания проводили на ротационном реометре Discovery Hybrid Rheometer DHR2 (TA Instruments) с применением комплекса программного обеспечения “Orchestrator software”, позволяющего анализировать молекулярную массу и молекулярно-массовое распределение. Молекулярно-массовые характеристики выбранных полимеров оценивали с использованием данных по стандартным образцам ПП с известными ММ и ММР. Для оптимизации параметров литья использовали капиллярный реометр Rosand RH2000 (Malvern). Ударную вязкость образцов определяли на маятниковом копре CEAST 9050 (IMPACTOR II) в соответствии с ISO 180.

Для всех образцов полимеров методом ДСК с термомодуляцией (калориметр 214 Polyma (Netzsch, Германия)) были определены все теплофизические характеристики и переходы, степень кристалличности полимеров. Исследование влияния марки полипропилена, природы наполнителя и его содержания на скорость кристаллизации ПП при различных температурно-временных режимах охлаждения.

Для образцов исходных и наполненных полимеров на приборе DMA 242 E Artemis (Netzsch) в обычных условиях и при фотостарении (УФ-облучение) определяли величины модуля упругости при изгибе и растяжении, температурные переходы при изгибе, растяжении и пенетрации, ползучесть при различных режимах нагружения.

Приведены результаты определения некоторых эксплуатационных характеристик после климатического воздействия (с применением климатической камеры LG-XD110G (Hyde Science and Technology) с регулируемыми температурой, влажностью и УФ-облучением с использованием ксеноновой лампы) и результаты влияния содержания наполнителя на водопоглощение.

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЁНОК НА ОСНОВЕ МЕТАКРИЛОВЫХ СОПОЛИМЕРОВ РАЗВЕТВЛЁННОГО СТРОЕНИЯ

Смирнов М.А., Назмиева Г.Н.

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

*smirnov\_maxim\_ne@mail.ru*

Органические полимерные материалы, содержащие в своём составе хромофоры (органические сопряженные молекулы с концевыми электронодонорными и электроноакцепторными группами), могут проявлять существенный электрооптический (ЭО) отклик (эффект Поккельса) на приложенное электрическое поле высокой интенсивности. Именно это свойство определяет их потенциальное применение в электрооптических модуляторах, высокоскоростных переключателях и других устройствах фотоники и оптоэлектроники [1].

В результате проделанной работы были исследованы тонкие полимерные плёнки на основе метакриловых сополимеров разветвлённого строения (рис. 1), синтез которых ранее был подробно описан в работе [2]. Полимерные плёнки наливались на стеклянную подложку, покрытую проводящей плёнкой оксида (ITO). Электретирование (перевод в заряженное состояние) полимерных плёнок проводили в поле коронного разряда при температуре близкой к температуре стеклования полимеров [3]. Для изготовления электрооптической ячейки, необходимой для измерения ЭО коэффициента, на поверхность каждой полимерной плёнки был нанесен дополнительный слой серебра толщиной ~ 30 нм, выполняющий роль второго электрода. Измерение ЭО коэффициента проводилось методом Тенга-Мана [4].

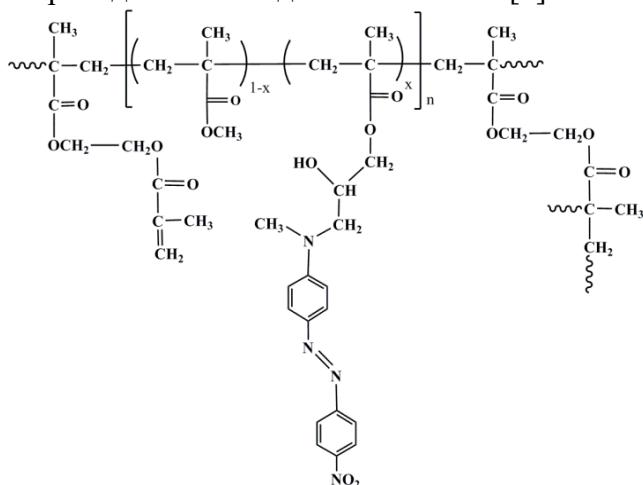


Рисунок 1. – Структурная формула исследуемых полимеров (FI:  $x=0.14$ ; FII:  $x=0.21$ ; FIII:  $x=0.29$ ).

Измерения значения ЭО коэффициента для исследуемых образцов FI, FII и FIII показали значения, равные 20, 33 и 21 пм/В соответственно. Полученные результаты позволяют рассматривать исследуемые плёнки в качестве потенциальных материалов для использования в электрооптических модуляторах.

*Работа была выполнена при финансовой поддержке молодёжного гранта Академии Наук Республики Татарстан (№ 04-50-ф Г 2016 / 2016).*

1. L.R. Dalton, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2003, **15**, 897.
2. T.A. Vakhonina, *Eur. Polym. J.*, 2014, **50**, 158.
3. J.A. Giacometti, Jr. O. N. Oliveira, *IEEE Trans. Elect. Ins.*, 1992, **27**, 924.
4. C.C. Teng, H.T. Man, *Appl. Phys. Lett.*, 1990, **56** (18), 1734.

## УНИВЕРСАЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА КОНТРОЛЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УЧАСТКА

Смирнов Б.Н., Усанов А.И.

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

*boris\_94\_05@mail.ru*

Разработана волоконно-оптическая информационная система контроля технологического участка производства, которая обеспечивает связь между постом оператора на производственном участке и конструкторским отделом, сбор информации с датчиков и передачу сигналов на информационные табло, и пост оператора, а также видеоконтроль.

Разработана структурная схема информационной сети и структурная схема системы контроля информационной сети. Разработана монтажная схема и схема расположения элементов волоконно-оптической информационной сети. Разработана принципиальная схема блока коммутации сигналов с датчиков в волоконно-оптическую информационную сеть, а также рассчитаны параметры принципиальной схемы блока коммутации сигналов.

Выбрано оборудование и элементы волоконно-оптической информационной системы.

Данная волоконно-оптическая информационная система контроля превосходит традиционную систему мониторинга в качестве [1,2], ширине полосы, долговечности, защите, миниатюрности, возможности работы в неблагоприятных условиях и простоте монтажа.

1. Рекламно-информационный журнал «Электротехнический рынок» №7-8(13-14) июль-август 2007; Тема номера: «Развитие рынка кабельно-проводниковой продукции»; Название статьи: «Особенности и отличия волоконно-оптических кабелей LAPP»; Автор: Анна Фризен, технический консультант U.I. LAPP GmbH. <http://market.elec.ru/nomer/12/lapp/>.
2. Р. Фриман «Волоконно-оптические системы связи» 4-е дополнительное издание; Москва: Техносфера, 2007. 512 с.

## ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ Q-FORM ПРИ РЕШЕНИИ ПРОБЛЕМЫ НИЗКОЙ СТОЙКОСТИ НАПЛАВЛЕННЫХ ШТАМПОВ ГОРЯЧЕГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ.

Смирнова О.Н.

*Набережночелнинский институт К(П)ФУ, Набережные Челны, Россия*

*olia-m-90@mail.ru*

Наплавка – это нанесение слоя металла на поверхность заготовки или изделия посредством сварки плавлением. В автомобильной промышленности наплавка нашла применение при восстановлении изношенных деталей оборудования и оснастки. Получение качественного продукта при восстановлении методом наплавки невозможно без решения ряда задач, учитывающих все аспекты и нюансы эксплуатации оснастки. Моделирование в программном комплексе Q-form решает следующие основные задачи: определение напряжений, действующих на участки оснастки в процессе штамповки; определение температуры нагрева ковочной оснастки во время штамповки. По результатам моделирования установлено максимальное напряжение порядка 1200 МПа на участке между коренными и шатунными шейками на предварительном переходе.

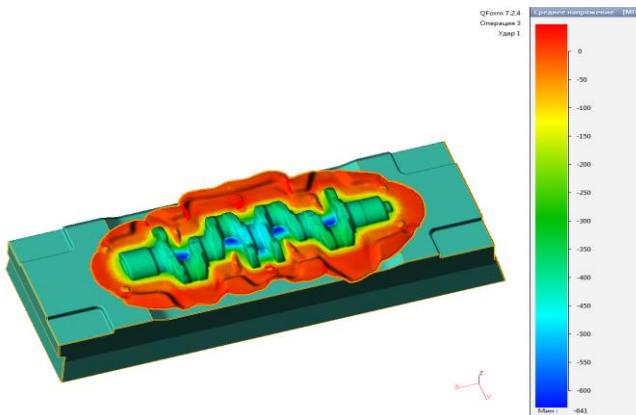


Рисунок 1. – Распределение напряжений на ковочной штампе поковки коленчатого вала по результатам моделирования на предварительном переходе.

Моделирование процесса штамповки установило неоднородность распределения напряжений по гравюре оснастки при эксплуатации. На основе результатов моделирования и для увеличения стойкости ковочной оснастки необходимо применять наплавку на различных участках зеркала штампа проволокой с различными свойствами.

## ОЦЕНКА МЕТАЛЛОУСТОЙЧИВОСТИ СИДЕРОФОР-ПРОДУЦИРУЮЩИХ БАКТЕРИЙ КАРБОНАТНО-СИЛИКАТНЫХ МИНЕРАЛОВ

Сорокина А.В.<sup>a</sup>, Пугачёва А.П.<sup>a</sup>, Щербакова Т.А.<sup>b</sup>, Шарипова М.Р.<sup>a</sup>, Хиляс И.В.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия

<sup>b</sup> ФГУП «Центральный научно-исследовательский институт геологии нерудных полезных ископаемых», Казань, Россия

alvita.94@yandex.ru

Микроорганизмы взаимодействуют с металлами и минералами в природных и промышленных условиях. Металлы напрямую или косвенно вовлечены во многие процессы жизнедеятельности микроорганизмов. Однако присутствие металлов выше определенных пороговых концентраций оказывает токсичное и канцерогенное действие на бактериальные клетки. Многие микроорганизмы адаптировались к высокому содержанию тяжелых металлов благодаря активации специфических механизмов устойчивости в экстремальных условиях обитания. Способность к биосорбции, биопреципитации, экстраклеточному связыванию, транспортным механизмам и хелатированию обеспечивает возможность использования бактерий в процессах биоремедиации [1]. В подавляющем большинстве карбонатно-силикатных минералов варыируют различные количества металлов. Микробное взаимодействие с поверхностью минералов влияет на их физико-химическое состояние, опосредуя их разрушение, растворение или биоминерализацию [2].

Целью настоящей работы явилось определение диапазона устойчивости сидерофор-продуцирующих микроорганизмов, выделенных из минералов карбонатно-силикатного состава, к тяжелым металлам.

Устойчивость микроорганизмов к тяжелым металлам проверяли путем посева бактериальных культур на агаризованную среду Лурии-Бертани, содержащую различные концентрации солей тяжелых металлов. Все бактериальные культуры проявили резистентность к присутствию в среде культивирования ионов  $Ni^{2+}$  в диапазоне концентраций 0.25-1 мМ и ионов  $Co^{2+}$  в диапазоне концентраций 0.25-0.5 мМ. Однако присутствие никеля в концентрации от 3 до 5 мМ замедляло рост *D. acidovorans* и *R. radiobacter* и полностью ингибировало рост других бактерий. Устойчивость к кобальту в концентрации до 2 мМ в среде роста проявили *D. acidovorans* и *R. radiobacter*. Дилюмат-ионы оказали наибольшее токсическое действие на все исследуемые культуры бактерий. *D. acidovorans*, *R. radiobacter* и *B. pumilus* оказались способными к росту на среде в присутствии  $Cr_2O_7^{2-}$  в концентрации не выше 0.5 мМ.

Таким образом, среди всех исследуемых сидерофор-продуцирующих бактерий, выделенных из карбонатно-силикатных минералов, наибольшую устойчивость к тяжелым металлам продемонстрировали два штамма: *D. acidovorans* и *R. radiobacter*. Среднюю устойчивость к присутствию в среде тяжелых металлов проявили *B. pumilus* и *A. Iwoffii*. Наименьшая устойчивость была обнаружена у *P. anguilliseptica*.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров; поддержанана грантом Российского фонда фундаментальных исследований РФФИ 16-34-60200 и грантом в рамках программы «УМНИК».*

1. Gadd G.M. Metals, minerals and microbes: geomicrobiology and bioremediation. *Microbiology*. 2010, **156**, 609-643.
2. Navarro C.A., Bernath D., Jerez C.A. Heavy Metal Resistance Strategies of Acidophilic Bacteria and Their Acquisition: Importance for Biomining and Bioremediation. *Biol. Res.*, 2013, **46(4)**, 363-371.

## СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ ОКСИГИДРОКСИДОВ Zr<sup>4+</sup> И Al<sup>3+</sup> ДЛЯ ДООЧИСТКИ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ

Сорочкина Е.А., Смотраев Р.В.

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»,  
Днепропетровск, Украина

*kate\_3110@mail.ru*

Одним из эффективных методов очистки воды является использование сорбентов, которые можно применять, как в промышленных масштабах, так и в виде наполнителей домашних фильтров. Особое внимание в качестве сорбента уделяется наноструктурированному оксигидроксиду циркония, который благодаря высокоразвитой поверхности, химической и механической устойчивости и развитому гидроксильно-гидратному покрову является одним из самых эффективных материалов для очистки воды от различных примесей.

В данной работе представлены результаты исследования свойств сорбентов на основе оксигидроксида циркония (ОГЦ) и алюминия (ОГА) с добавками Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, полученных золь-гель методом в результате гидролиза исходных солей в присутствии карбамида. Мольные соотношения компонентов: n<sub>Zr</sub>:n<sub>Al</sub>=1:0, 2:1, 1:1, 1:3, 0:1 при соотношении n<sub>Mn</sub>:n<sub>k</sub>=1:1,75 и 1:3., n<sub>Zr</sub>:n<sub>Al</sub>:n<sub>Mn</sub>=5:15:2 при соотношении n<sub>Mn</sub>:n<sub>k</sub>=1:3. Все полученные золи подвергали гелированию с одновременным гранулированием, после чего полученные сферические гранулы отмывали водой и сушили при комнатной температуре.

Полученные сорбенты характеризуются преобладающим размером гранул в 1-2 мм, влажностью 10-30% и статической прочностью от 80 до 550 кгс/см<sup>2</sup> в зависимости от состава сорбента. Удельная поверхность полученных сорбентов лежит в пределах 85-540 м<sup>2</sup>/г, объем пор – 0,113-0,284 см<sup>3</sup>/г, средний диаметр пор составляет от 16 до 31 Å. Все сорбенты имеют значением рН<sub>TN3</sub>=7±0,5 и в широком интервале могут сорбировать как катионы, так и анионы, что выгодно выделяет предложенные сорбенты на фоне промышленных аналогов.

Было определено, что полная статическая емкость гранул по ионам SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> незначительно превышает П<sub>т</sub>(Na<sup>+</sup>), что подтверждает амфолитные свойства сорбентов. Также, сорбенты эффективно удаляют ионы Fe<sup>3+</sup> и Mn<sup>2+</sup> с емкостью монослоя, соответственно, в 4,3 ммоль/г для чистого ОГЦ и 1,8 ммоль/г для Zr-Al-Mn сорбента, также обладающего степенью очистки в 97-99% для ионов AsO<sub>3</sub><sup>3-</sup> и AsO<sub>4</sub><sup>3-</sup>.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПИН-РЕШЕТОЧНОЙ РЕЛАКСАЦИИ $^3\text{He}$ В КОНТАКТЕ С ОРИЕНТИРОВАННЫМ АЭРОГЕЛЕМ $\text{Al}_2\text{O}_3$

Алакшин Е.М.<sup>a</sup>, Захаров М.Ю.<sup>a</sup>, Клочков А.В.<sup>a</sup>, Кузьмин В.В.<sup>a</sup>, Сафиуллин К.Р.<sup>a</sup>,  
Станиславовас А.А.<sup>a</sup>, Тагиров М.С.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт Физики, Казань, Россия

<sup>b</sup> Институт перспективных исследований АН РТ, Казань, Россия

*hectkctk@yandex.ru*

В данной работе методом импульсного ЯМР были проведены исследования спин-решеточной релаксации  $^3\text{He}$  в контакте с ориентированным аэрогелем  $\text{Al}_2\text{O}_3$  “Nafen 90” при температурах 1,6 – 4,2 К. Также были исследованы частотные времена  $T_1$  заполненного адсорбированного слоя  $^3\text{He}$  и газообразного  $^3\text{He}$ , заполненного адсорбированного слоя  $^4\text{He}$  и газообразного  $^3\text{He}$  в данном аэрогеле с целью определения вклада адсорбированной пленки  $^3\text{He}$  в релаксацию. Непосредственно перед изучением спин-решеточной релаксации  $^3\text{He}$  в контакте с аэрогелем  $\text{Al}_2\text{O}_3$  были измерены зависимости давления газа  $^3\text{He}$  от количества  $^3\text{He}$  введенного в экспериментальную ячейку.

Измерения проводились на импульсном ЯМР спектрометре лабораторного изготовления [1]. Для измерения частотной зависимости времени релаксации при одинаковых условиях, использовалась схема с “горячим конденсатором”, и были собраны колебательные контуры на следующие частоты: 16; 12; 8; 5; 3 МГц. Магнитное поле изменялось в диапазоне от 100 до 600 мТ, а температура изменялась в пределах 1,6 - 4,2 К благодаря непрерывной откачке паров гелия. Измерение времен спин-решеточной релаксации  $T_1$  ядер  $^3\text{He}$  осуществлялось методом «насыщение-восстановление» путем детектирования амплитуды спинового эха ( $\pi/2 - t - \pi/2 - 400$  мкс -  $\pi$ , длительность  $\pi/2$  импульса составляла 5 мкс, времена спин-спиновой релаксации  $T_2$  ядер  $^3\text{He}$  лежали в диапазоне 1,3 – 4,8 мс).

В результате обнаружен дополнительный механизм релаксации  $^3\text{He}$  в аэрогелях и показано, что данный механизм релаксации не является поверхностным. Выдвинута гипотеза о влиянии собственных парамагнитных центров на релаксацию газообразного  $^3\text{He}$ .

1. E.M. Alakshin, R.R. Gazizulin, A.V. Klochkov, V.V. Kuzmin, A.M. Sabitova, T.R. Safin, M.S. Tagirov. *MRS e.j.*, 2003, **15**, 1-6.

## УФ-ОТВЕРЖДАЕМЫЕ СМЕСЕВЫЕ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНЫХ И ПОЛИЭФИРНЫХ СМОЛ

Сурнова А.В.<sup>a</sup>, Амирова Л.Р.<sup>a</sup>, Ковалев В.В.<sup>b</sup>

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

<sup>b</sup> Центр композитных технологий КНИТУ-КАИ, Казань, Россия

*albin\_6767@yahoo.com*

Фотополимеризация нашла широкое применение в печатных красках, используемых в журналах и упаковочных материалах, в напольных покрытиях и обоях, в моделировании древесины, в стоматологических покрытиях и ортодонтических фиксаторах. Технология фотополимеризации позволяет получить те или иные материалы по более низкой цене, с меньшим вредом для окружающей среды и с наименьшими затратами энергии потребления, чем традиционные методы изготовления. Мощным стимулом для развития области является увеличение необходимости замены устаревшего теплового отверждения на более экологически приемлемые фотополимеризационные технологии.

Эпоксидные смолы являются самыми широко используемыми в промышленности реактопластами, они нашли свое применение при изготовлении kleев, покрытий, компаундов и связующих армированных пластиков благодаря своим механическим свойствам, высокой химической стойкости и термостабильности. Так как гомополимеры на основе эпоксидных смол позволяют получать материалы с низкими теплофизическими и физико-механическими свойствами, актуальной задачей является исследование УФ-отверждения смесевых композиций.

Был исследован процесс УФ-отверждения смесей различных составов, содержащих эпоксидные смолы (ЭД-22, Д.Е.Н. 438), полиэфирные УФ-смолы (BÜFA<sup>®</sup>-Resin UP 0410 I, POLYLITE<sup>®</sup> PO-4761, DION<sup>®</sup> IMPACT 9133-00), соответствующие отвердители (ангидридный - изометилтетрагидрофталевый ангидрид (изо-МТГФА) и аминный - 4,4-диаминодифенилсульфон (ДАДФС)) и фотоинициатор бис(2,4,6-триметилбензоил)-фенилфосфиноксид в различном процентном соотношении.

Для сравнительной оценки эффективности отвердителей и подбора оптимального режима отверждения и составов было проведено исследование УФ-отверждения с использованием методов дифференциальной сканирующей калориметрии (Netzsch Phoenix 204 с УФ-приставкой OmniCure), ИК-спектроскопии (Bruker Tenzor 27) и динамического механического анализа (DMAQ800). Для определения смачиваемости и свободной энергии поверхности (СЭП) использовали установку EASYDROP (KRUSS).

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБИОТИКОВ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО РЯДА НА ЭЛЕКТРОДАХ С ИММОБИЛИЗОВАННЫМ КОМПОЗИТОМ НА ОСНОВЕ ЗОЛОТА И НИКЕЛЯ

Сюткина В.Н., Шайдарова Л.Г., Гедмина А.В., Челнокова И.А., Будников Г.К.

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

*vika\_syutkina@mail.ru*

Антибиотики тетрациклического ряда: тетрациклин (Тц) и доксициклин (Дц) относятся к антимикробным препаратам широкого спектра действия и эффективно применяются для лечения некоторых заболеваний человека. С ростом интенсивности использования тетрациклических антибиотиков, создание и внедрение более совершенных и экспрессных методов контроля состава и качества лекарственных препаратов на их основе, является актуальной задачей. В настоящей работе изучена электрокатализическая бинарного композита на основе электролитических осадков золота и никеля (Au-Ni), иммобилизованных на поверхности электрода из стеклоуглерода (СУ), при электроокислении тетрациклина и доксициклина. Предварительно было установлено, что осадки индивидуальных металлов золота и никеля проявляют каталитическую активность при окислении изучаемых антибиотиков. Иммобилизация на поверхности электрода биметаллов может привести к повышению электрокатализической активности осадков металлов, поэтому сопоставлены каталитические свойства электролитических осадков золота и никеля на поверхности стеклоуглеродного электрода и биметалла никель-золота при электроокислении Тц и Дц. Установлено, что при переходе от электрода с осадком никеля к биметаллическому композиту на его основе значительно увеличиваются значения токов и каталитических эффектов. Предложен механизм и рассчитаны кинетические параметры электрокатализического окисления АТц и Дц на электроде с композитом из Au-Ni. Выявлены оптимальные условия получения композита, при которых регистрируется наибольший каталитический эффект. На основании полученных экспериментальных результатов разработаны способы вольтамперометрического определения Тц и Дц на Au-Ni -СУ. Использование композита Au-Ni по сравнению с осадками индивидуальных осадков золота и никеля позволило на порядок уменьшить нижнюю границу определяемых содержаний до  $5 \times 10^{-7}$  М. СУ с осадком биметалла Au-Ni был апробирован для определения тетрациклина и доксициклина в лекарственных средствах.

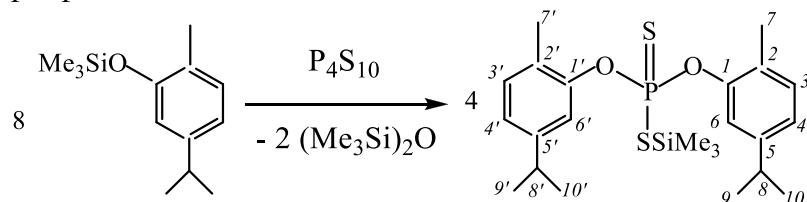
## ТРИМЕТИЛСИЛИЛОВЫЕ ЭФИРЫ ТИМОЛА И КАРВАКРОЛА В РЕАКЦИЯХ С СУЛЬФИДАМИ ФОСФОРА

Теренжев Д.А., Низамов И.С., Яковлев А.А., Низамов И.Д., Черкасов Р.А.

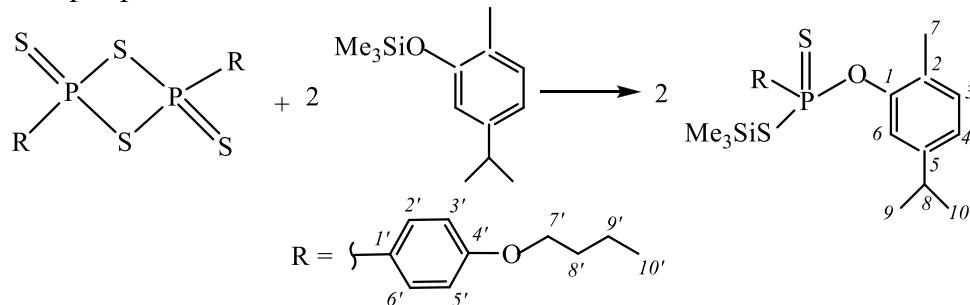
*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

*dmitriy.terenzhev@mail.ru*

С целью синтеза S-эфиров дитиокислот фосфора с потенциальными биологически активными свойствами мы получили в качестве полупродуктов S-триметилсилоловые эфиры дитиофосфорных и дитиофосфоновых кислот на основе тимола и карвакрола. 5-Изопропил-2-метилфенокситриметилсилан, полученный при силилировании карвакрола, реагирует с тетрафосфордекасульфидом с образованием O,O-бис(5-изопропил-2-метилфенил)-S-триметилсилидтиоfosфата.



2,4-Бис(4-бутоксифенил)-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфид гладко переводит 5-изопропил-2-метилфенокситриметилсилан в O-(2-изопропил-5-метилфенил]-S-триметилсилил-4-бутоксифенилдитиофосфонат.



Реакцией 2,4-диорганил-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфидов с 2-изопропил-5-метилфенокситриметилсиланом, полученным силилированием тимола, синтезированы O-(2-изопропил-5-метилфенил)-S-триметилсилил(органил)дитиофосфонаты.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-03-00897-а.*

## ПРИМЕНЕНИЕ SMART-КАРТ В ОБЩЕСТВЕННОМ ТРАНСПОРТЕ КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ ЕГО ПРИВЛЕКАТЕЛЬНОСТИ

Тихонов Д.П., Макарова И.В., Давлетшин Д.Ф.

*Набережночелнинский институт КФУ, Набережные Челны, Россия*

*dan.silence@mail.ru*

Процессы глобализации промышленного производства, рост числа и размеров мегаполисов, вызывают необходимость организации перемещения пассажиров и грузов. Обеспечение доступа к товарам, рабочим местам, услугам, образованию и досугу посредством экологически чистой, здоровьесберегающей, экономически и социально жизнеспособной транспортной системы является ключевым фактором улучшения состояния окружающей среды и качества жизни, экономического и социального роста. Одним из путей повышение эффективности мирового автопарка является переход от частных автомобилей к общественному транспорту без ущерба для мобильности населения. В Докладе о состоянии дорожного движения в мире 2015 отмечается, что продвижение к более устойчивым видам транспорта, таким как общественный и велосипедный, оказывает положительное воздействие при условии регулирования последствий, связанных с безопасностью дорожного движения.

Повысить привлекательность общественного транспорта позволит повышение комфорtnости передвижения, снижение стоимости поездок, а также обеспечение возможности их точного планирования. Это может быть реализовано повышением эффективности системы общественного транспорта и качества управления ею. Одним из путей повышения эффективности управления перевозками является планирование в соответствии с точной информацией о потребности в перемещениях. Обычно прогнозы строятся путем составления матриц корреспонденций или изучением загрузки существующей маршрутной сети. Составлению более точных прогнозов может способствовать применение smart-карт. Подобные системы существуют как в Европе, так и в Азиатских странах, например, в Сеуле специальные карты позволяют оплачивать поездки как на такси, так и на автобусе. Во Франкфурте оплата проезда осуществляется до пункта назначения в течение дня. Пассажир имеет возможность самостоятельно планировать маршрут, выходя на любой остановке.

Высокая скорость оплаты проезда с помощью карты, что важно для пассажирского транспорта в часы «пик», отсутствие физического износа как самой карты, так и считающего оборудования в момент оплаты, что существенно снижает эксплуатационные затраты, высокая безопасность. Преимуществом для пассажирских автопредприятий является возможность записи на карту необходимой информации, ввода различных ограничений и параметров. Это позволит построить гибкую тарифную систему. Кроме того, такая система сбора информации в совокупности с технологией OLAP-кубов, позволит рационально организовать движение городского пассажирского транспорта, оптимизировать маршрутные сети по различным категориям и периодам. В целом эти меры позволят повысить привлекательность системы пассажирского общественного транспорта, снизить негативную нагрузку на окружающую среду, что сделает города и мегаполисы удобными для жизни.

## КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В СИСТЕМАХ С РЕАКЦИЕЙ СИНТЕЗА СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ – РАСТВОРИТЕЛЕЙ В ХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Вернадская В.А., Тойкка М.А.

*Институт Химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*m.toikka@spbu.ru*

Исследование критических состояний флюидных систем (критических точек расслаивания или растворимости, критических точек равновесия жидкость-пар) в настоящее время относят к достаточно изученному направлению теории критических явлений. Это связано с хорошо известным интересом к теории и экспериментальным исследованиям критического состояния, развитием относительно новых направлений (например, теории сверхкритических флюидов). Экспериментальными объектами настоящего проекта являются многокомпонентные жидкофазные системы и системы жидкие фазы – пар, в том числе, в силу их значимости для технологии основного органического синтеза. Развитие общей теории критического состояния связано с именами многих классиков естествознания, начиная с работ Гиббса. Большинство работ в этом направлении в настоящее время проводится на базе аппарата теоретической физики [1-3]. В то же время, анализ литературы показывает, что многие задачи теории критических явлений, в том числе, имеющие фундаментальное значение, все еще не рассмотрены и не решены.

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование критических явлений в четверных системах с возможным протеканием химической реакции. В качестве объекта исследования выбрана система с реакцией синтеза промышленно значимого сложного эфира – этилацетата (уксусная кислота – этиловый спирт – этилацетат – вода). Получены новые экспериментальные данные о критических составах методом «cloud point technique». Представлена поверхность растворимости указанной системы в тетраэдре составов.

*Работа выполнена при поддержке Стипендии Президента РФ (СП-2140.2016.1).*

1. Bertel E. *J. Nanoparticle Research*, 2013, **15(5)**, article number 1407.
2. Efetov K.B., Meier H., Pepin C. *Nature Physics*, 2013, **9(7)**, pp. 442-446.
3. Ogawa S., Yamaguchi Y.Y. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 2015, **91(6)**, article number 062108.

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ  
БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ С РЕАКЦИЕЙ СИНТЕЗА  
ЭТИЛОЛЕАТА**

Тойкка М.А., Ляхов Д-М.И.

*Институт Химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*m.toikka@spbu.ru*

Тенденции развития современных технологий в последние годы предполагают использование «чистой» энергии (биодизельное топливо), получаемой из возобновляемых источников. Биодизельное топливо обладает рядом преимуществ над ископаемыми источниками энергии: изготавливается из возобновляемого сырья, не токсично, биологически разлагаемо и обладает лучшей смазывающей способностью [1]. В основе процесса синтеза биодизельного топлива лежат реакции этерификации жирных кислот этиловым (метиловым) спиртом в присутствии гомогенного кислотного или щелочного катализатора. Специфика совершенствования процесса получения биодизельного топлива в первую очередь связана с крайне ограниченной экспериментальной базой данных о физико-химических и термодинамических свойствах эфиров жирных кислот. Подобные знания являются основой любого химико-технологического процесса [2]. Экспериментальные данные, описывающие процесс достижения химического равновесия, в основном представлены системами, состоящими из уксусной кислоты и спиртов C1–C4. Эти результаты не могут служить надежным источником данных в приложении к процессу получения биодизельного топлива. Для ряда органических кислот с длиной алкильного заместителя C10–C12 имеются только единичные литературные сведения [3]. В качестве основных компонентов модельной системы нами были выбраны этиловый спирт и олеиновая кислота. В работе представлена схема синтеза этиолеата, а также приведены новые данные о химически равновесных составах указанной системы.

*Работа выполнена при поддержке Стипендии Президента РФ (СП-2140.2016.1).*

1. M.L. Savaliya, B.D. Dhorajiya, and B.Z. Dholakiya. *Sep. Purif. Rev.*, 2014, **44(1)**, pp. 28-40.
2. Н.Н. Лебедев. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. 1975, с. 588.
3. F. Omota, A.C. Dimian, and A. Bliek. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, **58(14)**, pp. 3159-3174.

## **СОЗДАНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ ТАКСАЦИОННОГО ОПИСАНИЯ РАСТИТЕЛЬНОСТИ НА ТЕРРИТОРИИ РАЙФСКОГО УЧАСТКОВОГО ЛЕСНИЧЕСТВА**

Толмачева С.А.

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

*Svetlana77793@mail.ru*

Базы данных в настоящее время являются незаменимым средством для эффективного управления и работы с большими массивами данных, в том числе в области экологии и биологии. Одним из главных источников информации о состоянии окружающей среды являются данные геоботанических описаний, полученные на основе полевых исследований. Как правило, подобные описания представляют собой сборники таблиц, содержащие тысячи записей о местах описания. В процессе работы с данными (сбор, хранение, обработка) возникает вопрос их эффективного использования. Основной проблемой в данном случае выступает большой объем информации, которую необходимо структурировать, для минимизации сложностей и упрощения процесса её обработки. С этой целью создаются *базы данных* (БД), позволяющие эффективно хранить и дополнять информацию, ускорить и упростить работу с большими массивами данных и обеспечить их сохранность от потери и порчи.

Базы данных неразрывно связаны с понятием *системы управления базами данных* (СУБД), которые можно назвать «руками» для работы с базой. СУБД – это совокупность программ, предназначенных для создания структуры новой БД, внесения содержимого, его редактирования и анализа, а так же для визуализации данных.

Целью данной работы было создание реляционной базы данных, содержащей таксационное описание растительности на территории участковых лесничеств.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Написать программный код, позволяющий считать и упорядочить данные таксационных описаний из документа формата Microsoft Word;
2. Проверить правильность считанных данных с помощью статистических методов;
3. Конвертировать упорядоченные данные в СУБД;
4. Разработать структуру базы данных;
5. Создать стандартные запросы и отчеты;
6. Разработать рабочую среду в полученной БД: формы для ввода данных, главная кнопочная форма;
7. Проанализировать особенности типов лесорастительных условий и произвести их сравнение с европейской классификацией EUNIS.

Исходными материалами для данной работы послужили данные лесотаксационного описания на территории Раифского участкового лесничества, полученные в рамках деятельности Казанского филиала ФГУП «РОСЛЕСИНФОРГ», инженерами-таксаторами: Масловым, Калимуллиным.

По итогам работы получены следующие результаты:

- Программа на языке Python, стандартизирующая данные таксационных описаний стандартного формата MsWord для дальнейшего импорта в СУБД Access.
- БД таксационных описаний, состоящая из 11 взаимосвязанных таблиц, 17 запросов, 9 форм, в т.ч главная кнопочная форма, 1 отчета и 14ти макросов.
- По итогам анализа типов лесорастительных условий, выведен средний(долевой) породный состав каждого типа. При сравнении данной и EUNIS классификаций, отмечено сходство, на основании которого предполагается вероятная возможность использования зарубежной классификации для описания некоторых природных условий в нашей стране.

1. Маслов Н.В., Калимуллин Р.Р. Таксационное описание. Книга 1. Казань, Казанский филиал ФГУП «РОСЛЕСИНФОРГ», 2013, 925 с.

## МУКОАДГЕЗИВНЫЕ ЛИПОСОМЫ ДЛЯ ИНТРАНАЗАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ИНТЕРФЕРОНА- $\alpha$

Толстых Д.А., Кожихова К.В., Шулепов И.Д., Миронов М.А.

*ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия*

*d.a.tolstykh@gmail.com*

Слизистая оболочка дыхательных путей является местом первого контакта вдыхаемого воздуха и, как следствие, подвержена действию большого количества неблагоприятных факторов, в частности вирусов [1].

Интерфероны являются важным компонентом противовирусного иммунного ответа, они подавляют репликацию вирусной ДНК, экспрессию вирусных генов, активируют НК-клетки, а также способствуют образованию молекул 1 класса МНС. Интерферон- $\alpha$  активно используется в медицинской практике в качестве иммуномодулирующего противовирусного препарата [2]. Однако при системном введении возможен ряд серьезных побочных эффектов, которыми пренебрегают при лечении гепатитов, а при интраназальном – требуется многократное введение для обеспечения длительного контакта с клеткой, при применении часто наблюдается раздражение слизистой и носовые кровотечения [3].

Для повышения эффективности применения интерферона- $\alpha$  было предложено использование комплексного носителя на основе липосом, покрытых модифицированной пектиновой оболочкой. Использование липосом, благодаря сродству к цитоплазматической мембране, может облегчить проникновение интерферона- $\alpha$  в клетки эпителия и снизить токсические эффекты. Сшитое пектиновое покрытие позволяет повысить стабильность получаемых носителей и обеспечить возможность химической модификации поверхности. Более того, пектиновый каркас обладает доказанными мукоадгезивными свойствами, что способствует удержанию и накоплению липосом на поверхности слизистых оболочек.

В ходе работы была получена новая липосомальная форма для интерферона- $\alpha$ , покрытая пектиновой оболочкой, сшитой с использованием реакции Ути. Исследована эффективность нагрузки липосом интерфероном- $\alpha$ , определены мукоадгезивные свойства полученных носителей, а также их размер и стабильность.

1. Tacchi L., et al. *Nat. Commun.*, 2014, **5**, 1-11.
2. Mangan N.E., et al. *Immunol Cell Biol*, 2012, **90**, 510-519.
3. Kugel D., et al. *J. Virol.*, 2009, **83**(8), 3843-3851.

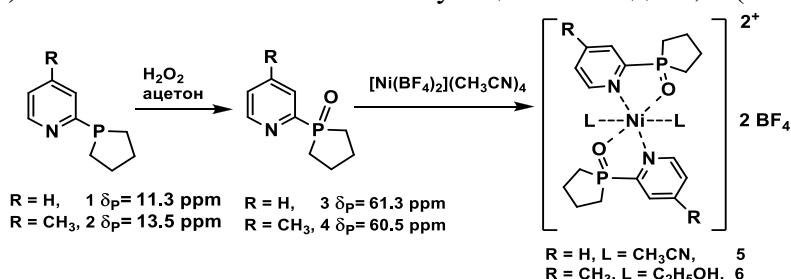
## СИНТЕЗ Р-ПИРИДИЛСОДЕРЖАЩИХ ФОСФОЛАНОКСИДОВ И КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ (II) НА ИХ ОСНОВЕ

Тригулова К.Р., Шамсиева А.В., Мусина Э.И.

*ИОФХ им. А.Е.Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия*

*kamtri95@mail.ru*

Циклические фосфины благодаря относительно жесткой структуре позволяют конструировать эффективные катализитические системы с переходными металлами на их основе [1-3]. Недавно нами была синтезирована серия гибридных P, N-лигандов - пиридилилсодержащих фосфоланов и получены полиядерные люминесцентные комплексы на основе меди (I) [4]. Наличие двух различных координационных центров позволяет конструировать хелатные комплексы, но их близкое расположение затрудняет образование хелатов из-за низкой стабильности четырехчленных циклов. Для получения стабильных хелатных комплексов, фосфоланопиридины **1**, **2** были окислены в соответствующие P-оксиды **3**, **4** (схема 1).



При взаимодействии оксидов фосфоланопиридинов **3**, **4** и тетрафторбората никеля(II) были получены моноядерные хелатные комплексы **5** и **6** (схема 1). Данные ЭПР и ЯМР спектроскопии показали образование парамагнитных высокоспиновых комплексов Ni(II) **5**, **6**. Согласно данным РСА в данных комплексах атом металла имеет октаэдрическую геометрию, сформированную N, O-координационными центрами лигандов, в то время как со-лиганды (молекулы растворителей) занимают аксиальное положение относительно плоскости комплексов. Полученные комплексы **5**, **6** демонстрируют высокую растворимость в большинстве органических растворителей, даже в воде, что делает их перспективными для дальнейших исследований.

1. F.Mathey., In Phosphorus-Carbon Heterocyclic Chemistry; Pergamon Press: Oxford, U.K., 2001, 75-772.
2. J.P. Steynberg, K. Govender, P.J. Steynberg, World Patent WO 14248; 2002 (to Sasol).
3. (a) Breit B., Fuchs E., *Chem. Commun.*, 2004, 694-695; (b) Baber R.A., Clarke M.L., Heslop K., et.al, *Dalton Trans*, 2005, 1079-1085.
4. Musina E.I., Shamsieva A.V., Strelnik I.D., et.al. *Dalton Trans*, 2016, 2250-2260.

## ОЧИСТКА ВОДЫ ОТ НИТРАТОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДОВ ИОННОГО ОБМЕНА

Трус И.Н., Гомеля Н.Д., Воробьева В.И., Флейшер А.Ю.

*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт», Киев, Украина*

*inna.trus.m@gmail.com*

Загрязнение водного бассейна – важная экологическая проблема, особенно в промышленных регионах, вследствии чего наблюдается дефицит чистой пресной воды, кроме того, население потребляет воду с достаточно высоким уровнем солей. Одной из достаточно серьезных проблем является загрязнение воды нитратами вследствие антропогенных и природных факторов [1, 2]. Предприятия по производству азотных удобрений являются одними из крупнейших загрязнителей, что объясняется достаточно широким использованием нитратов в качестве минеральных удобрений в сельском хозяйстве. Еще одним источником загрязнения является сброс очищенных коммунально-бытовых сточных вод. Превышение допустимого уровня нитратов усугубляет проблему водообеспечения населения качественной водой, к тому же это приводит к значительному негативному влиянию на поверхностные водоемы, что вызывает нарушение процессов развития существующих биоценозов и изменение параметров экосистемы. Весьма перспективным методом очистки воды от нитратов является ионный обмен, поскольку он является достаточно простым и недорогим способом [3]. Процессы очистки воды от нитратов изучали при использовании высокоосновного анионита АВ-17-8 в Cl<sup>-</sup> и SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> формах. Проведены исследования по извлечению из воды нитратов и показано, что высокоосновный анионит АВ-17-8 обеспечивает степень извлечения нитратов на уровне 90 %. Установлено, что эффективность сорбции анионита выше в хлоридной форме, чем в сульфатной форме. При проведении регенерации анионита АВ-17-8 использовали растворы хлорида и сульфата аммония, хлорида и карбоната калия. Данные исследования позволили установить, что эффективность регенерации высокоосновного анионита АВ-17-8 выше при использовании растворов хлоридов и растет с повышением концентрации регенерационных растворов.

1. M.J. Singleton, K.N. Woods, M.E. Conrad, D.J. Depaolo, P. Evan Dreisel Tracking sources of unsaturated zone and groundwater nitrate contamination using nitrogen and oxygen stable isotopes at the Hanford Site, Washington. *Environ. Sci. and Technol.*, 2005, **39(10)**, 3563-3570.
2. K.B. Piatek, M.J. Mitchell, S.R. Silva, C. Kendal Sources of nitrate in snowmelt discharge: evidence from water chemistry and stable isotopes of nitrate. *Water, Air, and Soil Pollut.*, 2005, **165(1-4)**, 13-35.
3. J. Mackiewicz, A. Dzibek Usuwanie azotanow z wod podziemnych na selektywnych zywicach anionowymiennych IONAC. *Ochr. srod.*, 2005, **4**, 45-47.

## ПОВЫШЕНИЕ ПОЧВЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ТЕХНОГЕННО-НАРУШЕННЫХ ТЕРРИТОРИЙ ЦЕНТРАЛЬНОГО КАЗАХСТАНА НА ОСНОВЕ БИОУДОБРЕНИЙ

Турсынбек А., Айдарханова Г.С.

*Евразийский национальный университет им.Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан*

*exbio@yandex.ru*

Основными источниками загрязнения почвенного покрова на территории Центрального Казахстана токсикантами являются предприятия черной и цветной металлургии; добывающей, перерабатывающей промышленности, ТЭЦ, транспорт и др. Установлено, что почвенный покров является основным депо поллютантов [1]. Отдельные участки в регионе используются для выращивания сельскохозяйственных культур. Актуальность работы вызвана необходимостью разработки технологий производства экологически безопасной продукции в регионе и целью работы было улучшение качества почв на основе применения биоудобрений из отходов казахстанских углей. Материалом исследования служили загрязненные почвы вблизи заброшенных угольных шахт, на которых выращивали пшеницу сорта *Дамсинская янтарная*. Типичный состав загрязнителей, определенных нами методом AAC, включал Cr, Cu, Cd, Pb, Zn, Ni. Их значимые концентрации составили 0.0008-0,112 мг/кг. Для улучшения качества загрязненных почв использовали водные растворы биоудобрения различных концентраций (1%, 2%, 3%, 4%, 5%), применяющиеся в различные фазы вегетации пшеницы. Анализ лабораторных исследований по биологическому действию препарата на рост тест-объекта показал, что положительный эффект на процессы развития проростков пшеницы наблюдается в увеличении высоты растений и сухой биомассы. Установлено, что наибольшее стимулирующее действие на рост и развитие пшеницы сорта *Дамсинская янтарная* оказывала 2% концентрация препарата. Наиболее высокий показатель всхожести составил 95%, что на 5,5% выше контроля. Показано, что для улучшения почвенного плодородия рекомендуются изменения традиционных агротехнологий с применением экологически безопасных, экономически доступных биоудобрений.

1. Экологическая обстановка в Карагандинской области. Бюлл. Областного департамента по статистике. Караганда, 2014, 167 с.

## **ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ В СРЕДЕ NX CAM С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕЖУЩИХ ИНСТРУМЕНТОВ И РЕЖИМОВ РЕЗАНИЯ СОГЛАСНО РЕКОМЕНДАЦИЯ SANDVIK COROMANT.**

Урманов М.Д.

*Набережночелнинский институт (филиал) Казанского (Приволжского) федерального Университета, Набережные Челны, Россия*

*marat.urmanov@mail.ru*

В настоящее время на многих предприятиях активно применяется сквозное проектирование с использованием различных систем CAD/CAM/CAE. Данный метод позволяет охватить весь процесс изготовления детали (от планирования производства до выпуска готового изделия). При использовании данных систем необходимо иметь технологические ресурсы, одними из которых являются набор трехмерных моделей инструментов и режимы резания от поставщиков [1.2]. На сайтах ведущих производителей инструментов имеется база инструментов, которую можно использовать в CAM-системах. Однако при добавлении их в библиотеку системы возникает ряд ошибок. Данные модели имеют различные расширения, а также существует проблема с распознаванием режущей части инструмента, местом его крепления и т.д. Эти проблемы увеличивают трудоемкость при подготовке к работе режущего инструмента в системе CAM.

В данной работе представлен метод создания инструментальной базы с использование инструментального калькулятора Sandvik Coromant. В качестве программного обеспечения для создания базы будут использоваться Microsoft Access с использование встроенного языка программирования VBA. Вся информация, касающаяся инструментов и инструментальной оснастки, использована с официального сайта <http://www.sandvik.coromant.com>.

Весь процесс работы базы данных по подготовке инструмента для библиотеки NX состоит из следующих шагов:

1. Указывается на форме путь в библиотеку инструментов.
2. Выбор режущего инструмента в системе Coroguide и добавление его в базу.
3. Подбор инструментальной оснастки, на основе выбранного инструмента и типа крепления станка.
4. Добавление инструмента в систему NX.
5. Добавление режимов резанья в систему NX.
6. Симуляция операций со станком в системе NX.

Преимуществом использования инструментальной базы является: обработка конкретной поверхности по рекомендациям производителя инструментов Sandvik Coromant. А также имеется возможность построить «инструментальную сборку», учитывая особенности крепления станка с добавлением при необходимости переходников.

1. Интернет ресурс: Изменение библиотеки данных обработки в NX CAM:  
[https://docs.plm.automation.siemens.com/t/doc/nx/10/nx\\_help/#uid:index\\_mfggeneral:xid384701:com\\_opts\\_edit\\_mach\\_data\\_lib:com\\_opts\\_mach\\_data\\_lib-edit](https://docs.plm.automation.siemens.com/t/doc/nx/10/nx_help/#uid:index_mfggeneral:xid384701:com_opts_edit_mach_data_lib:com_opts_mach_data_lib-edit) (дата обращение: 03.09.2016)
2. Интернет ресурс: Библиотека инструментов: <http://fsapr2000.ru/topic/57847-biblioteka-instrumentov/>

## КОМПОЗИЦИОННЫЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ПРЕПАРАТЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕЙ

Усманова Л.С., Герасимов А.В.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*[lian-usman@mail.ru](mailto:lian-usman@mail.ru),  
[Alexander.Gerasimov@kpfu.ru](mailto:Alexander.Gerasimov@kpfu.ru)

Одним из перспективных способов увеличения растворимости гидрофобных лекарственных препаратов является формирование твердых дисперсий с биосовместимыми полимерами. Наибольшее распространение при этом получили такие полимеры как: полиэтиленгликоли, плюроники и поливинилпирролидоны.

В настоящей работе, используя метод низкотемпературной дифференциальной сканирующей калориметрии была показана возможность получения твердых дисперсий гидрофобных лекарственных препаратов – фенацетина, сульфаниламида и дипиридамола с биосовместимыми полимерами – полиэтиленгликолями различной молекулярной массы (ПЭГ-1000 и ПЭГ-1400) и PluronicF127, а также изучены теплофизические свойства полученных композитов. Определены оптимальные соотношения полимер:лекарственный препарат, при которых происходит образование твердых дисперсий.

Влияние полимерной матрицы на предельную растворимость лекарственных препаратов было изучено с помощью УФ спектрофотометрии.

Методом калориметрии растворения были определены энергии межмолекулярных взаимодействий полимерной матрицы с лекарственным препаратом.

С помощью метода ИК-спектроскопии установлено уменьшение степени кристалличности лекарственного препарата при увеличении доли полимера в твердой дисперсии.

Полученные в ходе выполнения работы результаты позволят приблизиться к решению проблемы создания новых типов лекарственных форм с повышенной биодоступностью.

## МАГНИТОАКТИВНЫЕ ТВЕРДЫЕ ДИСПЕРСИИ ФЕНАЦЕТИНА С ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕМ

Усманова Л.С., Герасимов А.В.

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

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

Наночастицы, обладающие магнитными свойствами, представляют значительный интерес для медицины, что связано с возможностью дистанционного управления ими и конструкциями на их основе при наложении внешнего магнитного поля.

Одной из особенностей поведения наночастиц в растворе является их склонность к агрегации, поэтому практическое использование растворов наночастиц сопряжено с их стабилизацией (нанесение покрытия на поверхность магнитного «ядра», добавление стабилизаторов, подбор растворителей и т.д.). Применяемые покрытия можно разделить на органические (сурфактанты и полимеры) и неорганические (кремнезем, углерод, благородные металлы). Наиболее распространенными органическими покрытиями наночастиц являются декстран, полиэтиленгликоль (ПЭГ), крахмал, поливинилэтанол, гепарин, высшие карбоновые кислоты.

В тоже время остро стоит проблема увеличения растворимости лекарственных препаратов для увеличения их биодоступности. В этой области хорошо зарекомендовали себя твердые дисперсии гидрофобных лекарственных препаратов на основе различных полимеров, в том числе и полиэтиленгликолей

В ходе проведенного исследования, комплексом микроскопических методов, была показана возможность включения суперпарамагнитных наночастиц в твердые дисперсии на основе полиэтиленгликоля с молекулярной массой 950-1050 и фенацетина. Полученный композиционный материал с относительно равномерным распределением суперпарамагнитных наночастиц может найти свое применение при создании наполнителей в капсулированных лекарственных препаратах, сочетающих в себе возможность таргетной доставки, за счет наличия магнитных наночастиц, и повышенные солюбилизационные характеристики.

## ПОЛУЧЕНИЕ НАНОРАЗМЕРНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЛАНЕТАРНО - ВАЛЬЦЕВОГО ЭКСТРУДЕРА (ПВЭ)

Фадеева К.С., Яковлев И.Д., Киченин С.М., Момзяков А.А., Дебердеев Р.Я.

*ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия*

*ksunya-fadeeva@yandex.ru*

В последнее время растёт интерес к целлюлозе микро- и наноразмеров, что в первую очередь связано с их невероятно высокими прочностными свойствами за счет наличия высокоупорядоченных кристаллических областей [1,2]. В настоящей работе была исследована возможность получения наноцеллюлозы путем щелочного гидролиза исходного сырья с последующей механической обработкой полуфабриката в ПВЭ.

На первом этапе осуществляли делигнификацию целлюлозы раствором щелочи NaOH 1,2% масс. с одновременной отбелкой перекисью водорода H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 0,5% масс.

На втором этапе, полученный полуфабрикат подвергали механическому воздействию (размолу) в ПВЭ, который обладает рядом преимуществ:

- высокие сдвиговые напряжения, которые невозможно достичь в мельницах различного типа и в экструдерах другой конструкции;
- непосредственная подача влажного после делигнификации полуфабриката в бункер экструдера, что способствует высокому выходу наноразмерной целлюлозы;
- отсутствие большого количества продолжительных стадий, что связано с перемещением целлюлозы в одном экструдере и интенсивным её измельчением в течение нескольких минут.

Размолотую на ПВЭ целлюлозу исследовали на анализаторе размеров частиц Brookhaven ZetaPALS. Для выбора наиболее эффективных условий измельчения мы меняли конструкцию экструдера, варьируя количество секций, а также число и тип сателлитов.

Из полученных на анализаторе гистограмм видно, что ПВЭ даёт возможность получать частицы целлюлозы с размерами до 230 нм. Причем частицы с наименьшими размерами и большой объёмной долей получаются на ПВЭ с одной секцией. Увеличение количества секций вплоть до 4 не приводит к дополнительному измельчению частиц, а наоборот, способствует их укрупнению, что, скорее всего, связано с агломерацией частиц целлюлозы при прохождении её через 2-ю, 3-ю и 4-ю секции. Сравнивая влияние типа сателлита, а именно гладких и шишковатых, на размеры частиц, можно сказать, что использование гладких сателлитов способствует получению более мелких частиц.

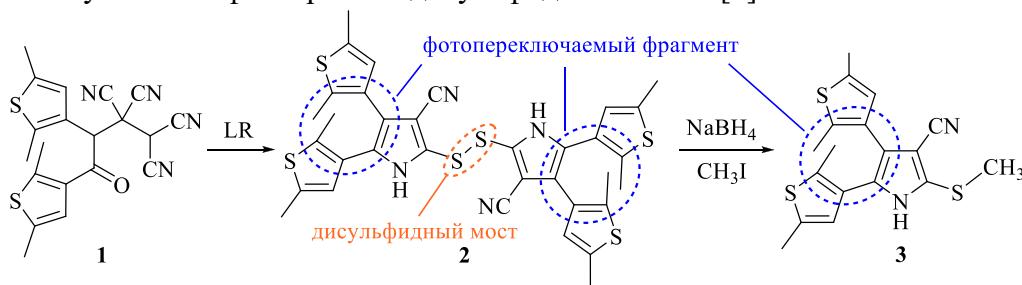
1. В.М. Никитин, А.В. Оболенская, В.П Щеголев Химия древесины и целлюлозы. М.: Лесная промышленность, 1978. 368 с.

2. З.А. Роговин Химия целлюлозы. М.: Химия, 1972. 520 с.

**2-(АЛКИЛСУЛЬФАНИЛ)-1Н-ПИРРОЛ С DAE ФРАГМЕНТОМ**Федосеев С.В., Беликов М.Ю.*Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова, Чебоксары, Россия**sergey.fedoseev88@gmail.com*

Разработка методов синтеза 4,5-диарилзамещенных 2-меркаптопирролов открывает путь к получению фотохромных соединений диарилэтилового (DAE) ряда. Возможной спецификой использования дисульфидной связи в качестве связки для двух фоточувствительных центров является ее способность к обратимому восстановлению. Данный факт создает уникальные возможности для построения мультипозиционных молекулярных фотопереключателей.

Ранее взаимодействием 4-оксоалкан-1,1,2,2-тетракарбонитрила **1** с реагентом Лавессона (LR) нами были получены бисфотохромы с дисульфидной связью [1].



В ходе дальнейших исследований при попытке восстановления дисульфидной связи действием борогидридом натрия обнаружено, что реакция является обратимой, и образующиеся продукты восстановления в ходе нейтрализации претерпевают окисление и димеризацию в исходные дисульфиды **1**. Зафиксировать восстановленную форму удалось при введении в реакционную массу метилиодида с образованием 2-(метилсульфанил)-1Н-пиррол-3-карбонитрила **3**.

Таким образом, в ходе исследования был синтезирован новый представитель фотохромных соединений диарилэтилового ряда – 4,5-бис(2,5-диметилтиофен-3-ил)-2-(метилсульфанил)-1Н-пиррол-3-карбонитрил **3**.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00657 мол\_а.*

1. M.Yu. Belikov, S.V. Fedoseev, M.Yu. Ievlev, O.V. Ershov, V.A. Tafeenko. *RSC Adv.*, 2015, **5**, 65316-65320.

## ПРИМЕНЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ (ТМДСК) ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕФТЯНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Фирсин А.А., Фролов И.Н.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

*alekseifirsin@gmail.com*

Нефти и нефтепродукты (в частности битум) являются сложной смесью углеводородов. По существующим представлениям нефтяные дисперсные системы формируются дисперсной фазой асфальтенов в дисперсионной среде мальтенов. Потребительские и технологические свойства таких систем определяются реологией, обусловленной структурно-фазовыми превращениями и температурно-временными условиями формирования надмолекулярных структур. Появление метода ТМДСК для исследования полимеров и последующее его применение для изучения структуры нефтяных систем обеспечило новые возможности для исследования их фазового состава и строения.

В представленной работе методом ТМДСК исследован битум товарной марки и его фракции. Из анализа полученных результатов следует, что ТМДСК кривые для битума не являются простой суммой сигналов обратимых и необратимых потоков для его компонентов. Очевидно, что механизмы протекания структурно-термических процессов в битуме как смеси определенных объемов предельных и ароматических углеводородов, смол и асфальтенов отличаются от таковых для «чистых» компонентов. Тем не менее, закономерности формирования термических эффектов индивидуальных фракций, в соответствующих температурно-временных условиях, позволяют идентифицировать их источники для битума.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для формирования методической базы при исследовании битумов и нефтяных дисперсных систем не только методом модулированной, но и обычной ДСК.

## ГИДРОФОБИЗИРУЮЩАЯ ДОБАВКА ДЛЯ ДОМЕННОГО ШЛАКА

Флейшер А.Ю., Пригожая А.В., Трус И.Н.

*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт», Киев, Украина*

*watrushkoo@mail.ru*

Сегодняшний этап развития строительной промышленности характеризуется постоянным увеличением объемов и темпов строительства, потребления цемента и ростом его стоимости. В данном контексте экономия цементной компоненты в составе бетона становится все более актуальной задачей.

Одним из наиболее применяемых приемов экономии цемента является использование активных минеральных добавок и органических добавок [1]. В Украине чаще всего в качестве минеральных добавок используется тонкомолотый доменный шлак.

Доменный шлак – побочный продукт производства чугуна. В составе цементов с добавками используются тонкомолотые шлаки с удельной поверхностью 3000-6000 см<sup>2</sup>/г. Повышение тонкости помола шлака вызывает трудности при его хранении. В частности тонкомолотый шлак – минеральный порошок, обладающий определенной гигроскопичностью, что приводит к поглощению влаги воздуха, увеличению влажности, комкованию и частичной потере потребительских свойств. С целью предотвращения указанных нежелательных явлений при хранении шлака было предложено размалывать его с органической комплексной добавкой, состоящей преимущественно из олеиновой кислоты и диэтаноламида жирных кислот. Для сравнительного анализа шлак был размолот с химически чистой олеиновой кислотой. Гидрофобность определялась по значениям краевого угла смачивания и влагопоглощения после 15 недель выдержки в среде с 85 %-ной относительной влажностью (табл.1).

Таблица 1. – Краевой угол смачивания и влагопоглощение гидрофобизированного шлака.

Концентрация добавки, масс. %	Краевой угол смачивания, град		Влагопоглощение, масс. %,	
	Олеиновая кислота	Комплексная добавка	Олеиновая кислота	Комплексная добавка
0,000	31	31	2,48	2,48
0,055	132	35	1,86	0,77
0,105	136	58	2,11	0,78
0,155	136	137	1,80	0,78

Обнаружено, что комплексная добавка является более эффективной гидрофобизирующей добавкой, то есть снижающей гигроскопичность шлака, чем гидрофобной (придающей шлаку водоотталкивающие свойства), и может быть использована при помоле с целью увеличения длительности хранения тонкомолотого шлака.

1. Л.И. Дворкин, О.Л. Дворкин Строительные материалы из отходов промышленности: учебно-справочное пособие. Ростов н/Д: Феникс. 2007. 368 с.

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» ДЛЯ  
ИДЕНТИФИКАЦИИ ДЖЕНЕРИКОВ И ОРИГИНАЛЬНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ  
ПРЕПАРАТОВ БИСОПРОЛОЛА.**

Хаблетдинова А.И., Яркаева Ю.А., Проворова Ю.Р., Мурзина К.А., Зильберг Р.А.

*Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*

*aigulik17@mail.ru . ZilbergRA@yandex.ru*

Дженерики по сравнению с оригинальными лекарственными препаратами более доступны и имеют значительно меньшую себестоимость. Однако, сопоставление терапевтической эффективности оригинальных препаратов и соответствующих дженериков в виде готовых лекарственных форм, показывает, что последние могут уступать оригиналу по эффективности и также имеют побочные эффекты, отсутствующие в случае оригинала. Для надежного установления качества дженериков необходим анализ не только действующего вещества, но и многофакторный анализ вспомогательных компонентов. В этой связи разработка экспресс-методов идентификации и контроля качества дженериков и оригинальных лекарственных препаратов на основе модифицированных вольтамперометрических мультисенсорных систем «электронный язык» является важной и актуальной задачей. В настоящей работе предложен новый подход к решению проблем сравнительной оценки и идентификации  $\beta$ -адреноблокаторов на основе бисопролола различных производителей. Он заключается в применении вольтамперометрического «электронного языка» на основе модифицированных полиариленфталидными полимерными пленками. Отклики таких электродов (перекрестная чувствительность) по-разному зависят от природы и содержания электроактивных соединений и неэлектроактивных веществ в анализируемом препарате. При этом природа и состав исследуемого объекта оказывают влияние как на величину регистрируемого тока, так и на форму вольтамперограмм. Для оценки схожести и различий между вольтамперограммами проводили их моделирование с помощью хемометрических методов. Предложенная вольтамперометрическая система типа «электронный язык» чувствительна к составу таблетированных лекарственных форм, что позволяет различать лекарственные средства, содержащие одно и то же действующее вещество, но выпущенные различными производителями с вероятностью не ниже 90%.

*Работа выполнена при поддержке РНФ: грант № 16-13-10257*

# ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ QFORM ПРИ РАЗРАБОТКЕ ТЕХНОЛОГИИ ХОЛОДНОЙ КАЛИБРОВКИ ШЕСТЕРЕН

Хайруллин Р.А.

*Набережночелнинский институт К(П)ФУ, Набережные Челны, Россия*

*guanava@mail.ru*

Разработка технологии холодной калибровки пятна контакта деталей шестерен является многофакторной задачей, при решении которой необходимо учесть влияние следующих факторов: вариабельность размеров полуфабриката, температура нагрева полуфабриката, жесткость пресса, упругие деформации в штампах и в калиброванном полуфабрикате. Оценка влияния каждого из перечисленных факторов на точность получаемого изделия проведено в программном комплексе QFORM. Проведены моделирования с различными температурными режимами, геометрией полуфабриката и коэффициентами трения на поверхности инструмент-заготовка. В результате моделирования выявлено наличие упругих деформаций в инструменте, существенно снижающих точность получаемых изделий (рисунок 1).

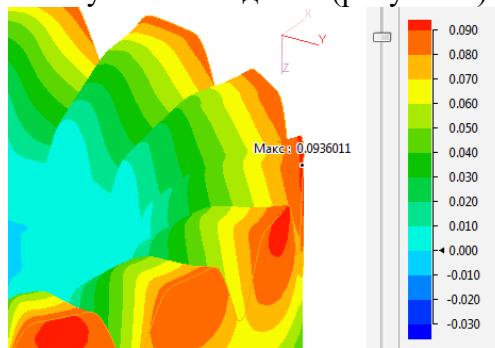


Рисунок 1. – упругие деформации в калибровочном инструменте.

Установлено, что упругие деформации инструмента возрастают в направлении внешнего контура. Причиной является консольность выступов, формирующих зубья шестерни. Для снижения упругих деформаций были разработаны конструктивные решения, повышающие жесткость инструмента. Моделирование процесса калибровки с применением инструмента с увеличенной жесткостью показало снижение упругих деформаций в инструменте до 35%. Корректировка геометрии инструмента на величину полученных в результате моделирования упругих отжатий, позволит получить требуемую геометрию зубьев шестерни.

## КОНТАКТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ПЛАСТИНЫ НА УПРУГОМ ОСНОВАНИИ

Кузнецов С.А., Хакимзянов Р.Р.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань, Россия*

*skoal@kpfu.ru*

Исследование контактного взаимодействия пластин с жёсткими телами – традиционная тематика кафедры теоретической механики КФУ [1-5]. Математически корректная постановка контактных задач теории пластин и оболочек с учётом деформаций поперечного обжатия в зоне контакта приводит к интегральному уравнению Фредгольма второго рода относительно неизвестного контактного давления. Решение этого уравнения проводится методом сведения к краевой задаче, разработанным профессором Казанского университета Ю.П. Артюхиным. В работе эта методика применяется для решения контактная задача для полубесконечной пластины, лежащей на упругом основании Винклера и взаимодействующей с линейным штампом. Ядро интегрального уравнения (функция влияния) получено авторами в виде разложения в ряд Фурье с использованием аппарата теории обобщённых функций для двух различных вариантов закрепления передней кромки пластины: свободный край и шарнирно опёртый. Для контактных напряжений получено точное аналитическое решение в рядах Фурье. Численные результаты приводятся в виде графиков и таблиц, сходимость решения исследована численно.

1. Д.Л. Егоров, С.А. Кузнецов. Контактное взаимодействие круглых пластин на упругом основании со штампами различных форм. *Научно-технический вестник Поволжья*, 2011, **5**, 32-35.
2. Ю.Г. Коноплев, С.А. Кузнецов, А.А. Саченков, М.А. Точкиасова. Исследование контактного взаимодействия прямоугольной пластины с жесткой накладкой при гармонических колебаниях. *Учён. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки*, 2011, **53(4)**, 98-111.
3. А.Н. Шишова, С.А. Кузнецов. Контактное взаимодействие пластины с жестким штампом при неизвестной области контакта. *Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук*, 2013, **8**, 25-30.
4. Д.Л. Егоров, С.А. Кузнецов. Численно-аналитическое решение задачи контактного взаимодействия круглой пластины и штампов различных форм. *Вестник Казанского технологического университета*, 2013, **11**, 36-39.
5. С.А. Кузнецов, Г.Г. Зиганшина, Э.Р. Лотфуллина, О.В. Старожилова, А.Н. Хусаинова. Влияние граничных условий на распределение контактных напряжений при взаимодействии пластин с жесткими телами. Супервычисления и математическое моделирование: Труды XV Международной конф. под ред. Р.М. Шагалиева. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2015. С. 279-282..

## БЕСПИЛОТНЫЕ ГРУЗОВЫЕ АВТОМОБИЛИ ДЛЯ РАБОТЫ В ТЯЖЕЛЫХ УСЛОВИЯХ ТРУДА

Халяфиев А.А., Бойко А.Д., Халяфиев Р.А.

*Набережночелнинский институт КФУ, Набережные Челны, Россия*

*azatmaster@gmail.com*

Развитие технологий достигло такого уровня, когда мы можем не только говорить о беспилотных транспортных средствах, но и увидеть их в жизни. Разработки таких средств ведутся не только зарубежом, но и в России. Разрабатывается не только программная часть, но и аппаратная, т.е. камеры и датчики.

Тяжелыми условиями труда по прежнему является работа на крайнем севере, в горнодобывающей отрасли, нефтяной отрасли, а так же логистика и МЧС. Беспилотные грузовые автомобили можно использовать не только для гражданской сферы, но и для военных подразделений различного назначения.

Одними из функций выполняемыми беспилотными грузовиками является работа, для тушения пожаров на складах с боеприпасами и избегания потерь среди личного состава. Другой функцией является доставка грузов к местам чрезвычайных ситуаций. Так же одной из многочисленных функций будет являться развал завалов и эвакуация людей в местах после разрушительных природных явлений. Для ежедневных работ – логистика в перевозках особо опасных грузов на закрытой территории между складами. Так же можно использовать для доставки различных грузов мирного назначения- почта, продуктов питания и техники.

В России разработчиками являются несколько крупных компаний и институтов. Среди производителей грузовых автомобилей КАМАЗ, Газель. Среди фирм-разработчиков программного обеспечения – Вист-Групп. А среди институтов- МАДИ. Каждый из них ведет политику разработки собственного программного продукта для управления беспилотными грузовыми транспортными средствами. Еще ведут разработки в собственной компонентной базе.

Беспилотный КАМАЗ получил компьютерную модель фoveального зрения собственной разработки, позволяющее ему тратить меньше вычислительных мощностей на анализ видеоизображения с дороги. Особый алгоритм беспилотного автомобиля способен распознавать любое дорожное полотно, его границы, дорожные знаки, других участников движения.

Для полноценной работы беспилотного грузового автомобиля необходима установка следующих программных компонент:

1. Радиолокационные станции
2. Лидар
3. Видеокамеры
4. Системы связи
5. Управление с пульта ДУ
6. Бортовая вычислительная система

## ИЗГОТОВЛЕНИЕ ЭПОКСИАНГИДРИДНОГО ПРЕПРЕГА ДЛЯ ИЗДЕЛИЯ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Хамидуллин О.Л.<sup>a,b</sup>, Гадыева И.И.<sup>a</sup>, Амирова Л.Р.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> КНИТУ им.А.Н.Туполева, Казань, Россия

<sup>b</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

inga230193@mail.ru

С развитием индустрии композитного материаловедения использование изделий из КМ перестает ограничиваться такими областями промышленности, как космос и авиации. Доля использования КМ растет так же и в медицине. При изготовлении изделий медицинского назначения, относящихся к группе контактирующим с тканями организма, к ним применяется ряд четких требований, таких как не токсичность и сохранность свойств при стерилизации. При подборе компонентов связующего, помимо медицинских, должны учитываться также требования связанные с технологией изготовления. Для исследований была выбрана препрерговая технология изготовления.

Одним из важнейших вопросов при разработке связующего для препрега, является правильный подбор реологических свойств. Недостаточная вязкость связующего приводит к повышенной пористости и низкой межслоевой прочности. Реология связующего должна обеспечивать формуустойчивость выложенной на оснастку заготовки. В процессе изготовления препрега важно, чтобы вязкость связующего и время нахождения вязкости при данной температуре обеспечивало возможность качественной пропитки.

Целью данной работы явился выбор компонентов для получения препрега, удовлетворяющего требованиям, предъявляемым к изделию медицинского назначения.

Научная новизна заключалась в использование нового катализатора синтезированного нами ранее [1], который обладает повышенными антибактериальными свойствами [2]. Реологические параметры смолы и отвердителя для изготовления препрега определялись на динамическом реометре. Из полученных данных были подобраны компоненты состава связующего. На первом этапе изготовления препрега была получена пленка из выбранного связующего. Далее происходило совмещение волокна со связующим с последующей сушкой препрега. Из полученного препрега был изготовлен фрагмент панели и проведены механические и теплофизические испытания. Механические испытания проводились на универсальной электромеханической машине Instron5882 Значение прочности на сжатие определялось по ASTM D 3410 и было равно 320,7 МПа. Температура стеклования полученного композита равна 147° С.

1. L.R. Amirova, A.R. Burilov, L.M. Amirova, I. Bauer, W.D. Habicher Kinetics and Mechanistic Investigation of Epoxy-Anhydride Compositions Cured with Quaternary Phosphonium Salts as Initiators. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 2016, **54(8)**, 1088-1097.
2. G.A. Gainanova, G.I. Vagapova, V.V. Syakaev, A.R. Ibragimova, F.G. Valeeva, E.V. Tudriy, I.V. Galkina, O.N. Kataeva, L.Ya. Zakhrova, S.K. Latypov, A.I. Konovalov Self-assembling systems based on amphiphilic alkyltriphenylphosphonium bromides: Elucidation of the role of head group. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2012, **367(1)**, 327-336.

## МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАТРИЕВОГО КОБАЛЬТАТА $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ НА ЗОНДОВЫХ АТОМАХ $^{57}\text{Fe}$

Хасанов Р.Н., Гильмутдинов И.Ф., Вагизов Ф.Г., Мухамедшин И.Р.

*Институт физики КФУ, Казань, Россия*

*scumtman@gmail.com*

Сильно-коррелированные системы обладают уникальными термоэлектрическими свойствами. Так натриевые кобальтаты  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  сочетают в себе высокую электропроводимость и большой коэффициент термо-ЭДС. Последний связывают с наличием высокой спиновой энтропии в данном соединении [1]. Допирование натриевых кобальтатов ионами переходных металлов является одним из способов влияния на спиновую энтропию и позволяет изменять термоэлектрические характеристики. Существует ряд теоретических и экспериментальных работ, исследующих как допирование ионами железа влияет на термоэлектрические свойства натриевого кобальтата. Однако неясно как распределяются ионы железа по кристаллографическим позициям и какие искажения они вносят в кристаллическую решетку. Также остается открытым вопрос о зарядовом состоянии ионов железа и влиянии упорядочения ионов натрия на него. В работе представлены результаты исследования магнитных свойств натриевого кобальтата  $\text{Na}_{0.67}\text{CoO}_2$ ,ированного 1% Fe и эффекта Мёссбауэра на зондовых атомах Fe. Поликристаллический образец был приготовлен методом твердофазного синтеза. Рентгеновская дифрактограмма соответствует соединению  $\text{Na}_{0.67}\text{CoO}_2$ . Мёссбауэрский спектр при комнатной температуре состоит из двух квадрупольных дублетов, которые соответствуют различным зарядовым состояниям ионов железа. Зарядовое расслоение может быть вызвано упорядочением ионов натрия.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.*

1. N. Kaurav, K. K. Wu, Y. K. Kuo, G. J. Shu, F. C. Chou. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**, 075105.

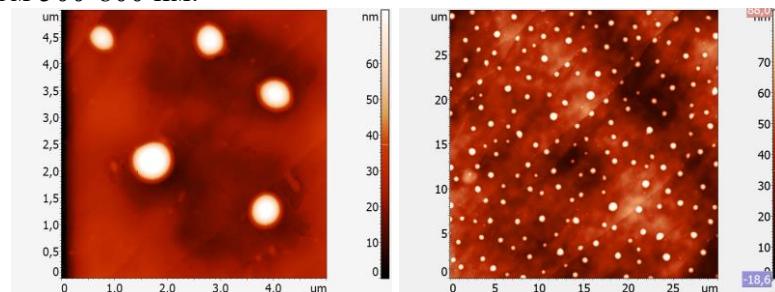
## МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ Cu (II) И Ni(II) ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИКАРБАМАТА

Хасанова Э.М., Кутырева М.П., Гатаулина А.Р., Улахович Н.А.

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

*hasanova.1972@mail.ru*

Модификация гиперразветвленных полиэфирополиолов карбаматными фрагментами способна расширить сферу их применения. Реакцией фенилизоцианата с гиперразветвленным полиэфирополиолом синтезирован полиэфирополи(N-фенилкарбамат)полиол (**L**). По данным ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопии степень функционализации составила 75%. Оценены физико-химические характеристики поликарбамата **L** для последующего применения в качестве гибридного комплексообразующего реагента. По данным метода атомно-силовой микроскопии установлено, что в тонких пленках **L** на поверхности пиролитического графита формируются наночастицы поликарбамата размером 500-800 нм.



Строение координационного узла в металлополимерных комплексах **L** с ионами Cu(II) и Ni(II) определяли ИК-, УФ-вид спектроскопией, методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Установлено, что наилучшие условия для комплексообразования лиганда с ионами Ni(II) создаются при pH = 6.5, для ионов Cu(II) pH = 6. По методу Жоба был определен стехиометрический состав комплексных форм M(II)-L в растворе и рассчитаны условные константы устойчивости  $\lg \beta'$  комплексных форм в растворе:

M	M:L	$\lambda$ , нм	$\lg \beta'$	M	M:L	$\lambda$ , нм	$\lg \beta'$
Cu(II)	5:1	864	10.65	Ni(II)	5:1	670	11.37
	9:1		16.28		9:1		17.70

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ «ЧИСТОЙ» И ЛЕГИРОВАННОЙ ЖЕЛЕЗОМ PZT КЕРАМИКИ

Хафизов Л.И., Гусев Е.В., Лунёв И. .

*Казанский(Приволжский)Федеральный Университет, Казань, Россия*

*Linarka94@gmail.com*

Керамические твердые растворы цирконата-титаната свинца  $Pb(Zr,Ti)O_3$  (PZT) являются базовыми материалами пьезотехники [1]. С начала 90-х годов прошлого века началось интенсивное исследование керамических тонких пленок PZT. Их прикладной потенциал оказался гораздо шире: пленки находят применение в микроэлектромеханике, ИК- и СВЧ-технике, в неразрушающей памяти, в магнетоэлектрических преобразователях [2].

В настоящее время PZT керамика активно модифицируется, в структуру внедряют ионы железа, никеля и др., меняя и варьируя её физико-химические свойства. Исследование электрических свойств модифицированной PZT керамики является очень актуальной задачей.

Целью данной работы является исследование электрических свойств легированной железом керамики PZT и сравнение с чистой керамикой PZT.

Исследования проводятся на диэлектрическом спектрометре Novocontrol BDS-80 в температурном диапазоне от +20 С до -160 С и диапазоне напряжений от 1 до 1000 V, диапазон частот: от  $10^0$  Hz до  $10^7$  Hz.

В результате выполнения работы измерены диэлектрический спектр чистого PZT в температурном диапазоне от +20 С до -154 С. Измерены зависимости диэлектрической проницаемости от приложенного постоянного напряжения  $\pm 480$  V (6 kV/cm).

1. Яффе Б., Кук У., Яффе Г. Пьезоэлектрическая керамика. М.: Мир. 1974. 288 с.
2. Izyumskaya N., Alivov Y.-I., Cho S.-J., Morkoç H. Processing, structure, properties, and applications of PZT thin films. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 2007, 32, 111-202.

## САМОСБОРКА ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ АММОНИЕВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Хрипунова И.А., Падня П.Л., Стойков И.И.

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

*irrinna20@mail.ru*

Дизайн и синтез искусственных рецепторных структур – важный раздел современной органической химии. Одной из используемых молекулярных платформ для создания молекул-«хозяев» являются (тиа)каликс[4]арены.

Целью данной работы является синтез и изучение агрегационных и флуоресцентных свойств водорастворимых аммониевых производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]аренов, содержащих хиральные аминокислотные фрагменты *L*-триптофана на нижнем ободе макроцикла, в конфигурациях *конус* и *1,3-альтернат*.

Были получены новые производные *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, замещенные по нижнему ободу хиральными аминокислотными фрагментами *L*-триптофана, в конфигурациях *конус* и *1,3-альтернат*. Структура полученных соединений подтверждена комплексом физических и физико-химических методов (<sup>1</sup>Н и <sup>13</sup>С, ИК спектроскопией и масс-спектрометрией), а состав подтвержден данными элементного анализа.

С помощью методов динамического светорассеяния, флуоресцентной спектроскопии, а также просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии была показана способность полученных соединений в конфигурациях *конус* и *1,3-альтернат* образовывать в воде наноразмерные частицы, обладающие флуоресцентными свойствами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (16-33-60141 мол\_а\_дк) и стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики (Конкурс СП-3597.2016.4)*

## ЖИДКОСТНАЯ ЭКСТРАКЦИЯ МЕДИ (II) О-2-ЭТИЛГЕКСИЛ-N,N-БИС (2-ЭТИЛГЕКСИЛАМИНО)МЕТИЛФОСФОНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Чибиров Е.О., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

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

*chibirevigor@mail.ru*

Разработка методов экстракции ионов металлов из аммиачных сред может послужить основой создания новых гидрометаллургических технологий извлечения меди из природных источников. Результаты исследования процессов жидкостной экстракции ионов Cu(II) аминофосфорильным экстрагентом – О-2-этилгексил-N,N-бис(2-этоксигексиламино)метилфосфоновой кислотой – свидетельствуют о высокой эффективности экстракции этого металла из нейтральных и щелочных водных растворов. График зависимости степени извлечения ионов Cu(II) от pH водной фазы имеет вид, характерный для экстракции металлов по катионаобменному механизму: степень извлечения меди увеличивается с ростом значений pH от 3 до 10 единиц, после чего начинает падать. Найдено, что при использовании керосина в качестве разбавителя, в двухфазной системе образуется комплекс металл : лиганд состава 1:2 (рисунок 1)

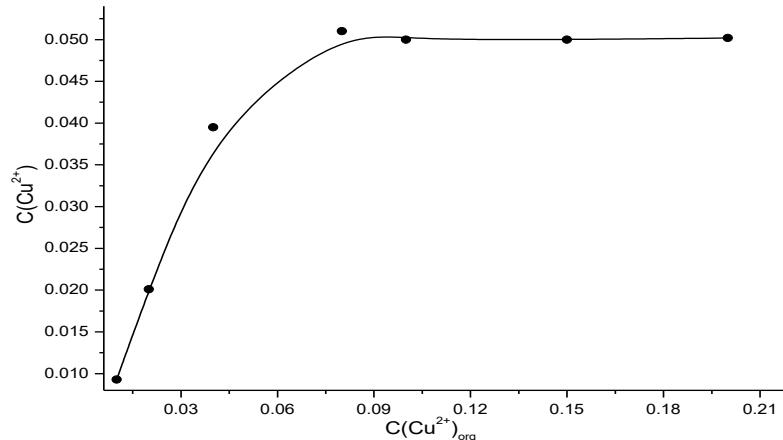


Рисунок 1. – Зависимость степени извлечения от концентрации Cu(II);  $C_{\text{эк}} = 0.2\text{M}$ ; pH=9.75

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

## НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ РЯДА 1,5-ДИАЗАЦИКЛООКТАНА

Чулакова Д.Р.<sup>a</sup>, Смирнов И.С.<sup>a</sup>, Латыпова Л.З.<sup>a</sup>, Прадипта А.Р.<sup>b</sup>, Танака К.<sup>a,b</sup>, Курбангалиева А.Р.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, Казань, Россия

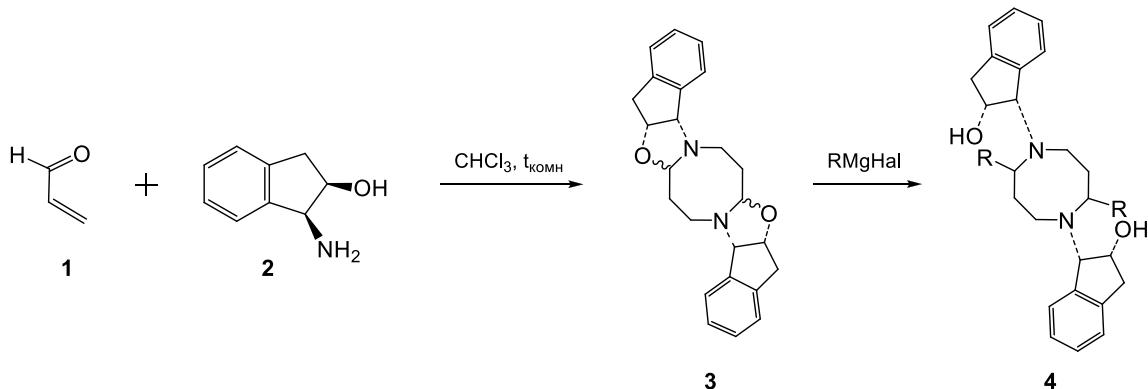
<sup>b</sup> Национальный научно-исследовательский институт естественных наук RIKEN, Вако, Япония

*diliara.22@yandex.ru*

Данная работа посвящена разработке подходов к синтезу восьмичленных *N*-гетероциклов ряда 1,5-диазациклооктана из  $\alpha,\beta$ -ненасыщенных иминов. Ранее была обнаружена способность ненасыщенных иминов, образующихся при взаимодействии акролеина **1** с производными 1,2-этаноламина, участвовать в реакции [4+4]-димеризации по типу «голова к хвосту» и приводить к получению продуктов ряда 1,5-диазациклооктана [1]. При действии на акролеин **1** оптически активного (1*S*,2*R*)-(-)-*cis*-1-амино-2-инданола (**2**) был получен 1,5-диазациклооктан **3**, который был далее вовлечен в реакции нуклеофильного алкилирования с помощью

алкилмагнийгалогенидов.

В результате нами синтезированы и охарактеризованы данными одномерных и двумерных спектров ЯМР новые производные 1,5-диазациклооктана **4**, содержащие различные алкильные заместители в положениях 2 и 6 восьмичленного цикла.



Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

1. K. Tanaka, R. Matsumoto, A. R. Pradipta, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Manabe, K. Fukase. *Synlett*, 2014, **25**, 1026-1030.

## СИНТЕЗ ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО ПОРОШКА ДИБОРИДА ХРОМА КАРБИДОБОРНЫМ МЕТОДОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОВОЛОКНИСТОГО УГЛЕРОДА

Чушенков В.И., Квашина Т.С., Крутский Ю.Л.

*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

*chushenkov.vladislav@mail.ru*

Соединения металлов с бором - бориды - представляют собой очень важный и обширный класс неорганических соединений, отличающихся тугоплавкостью и высокой химической стойкостью в различных агрессивных средах. Одним из наиболее важных представителей боридов является диборид хрома  $\text{CrB}_2$ .

В НГТУ на кафедре ХХТ проводят реакции синтеза нановолокнистого углерода (НВУ) методом селективного каталитического пиролиза легких углеводородов. НВУ обладает рядом уникальных свойств, по сравнению с обычным углеродным материалом (сажей). В частности, он имеет высокое значение удельной поверхности ( $\sim 200 \text{ м}^2/\text{г}$ ). Именно НВУ был использован для синтеза  $\text{CrB}_2$ . Также в реакции синтеза в качестве реагентов выступили порошки карбида бора  $\text{B}_4\text{C}$  и оксида хрома  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ . Шихта для карбидоборного синтеза  $\text{CrB}_2$  готовилась в соответствии со стехиометрией для следующей реакции:  $\text{Cr}_2\text{O}_3 + \text{B}_4\text{C} + 2\text{C} = 2\text{CrB}_2 + 3\text{CO}\uparrow$ .

Синтез  $\text{CrB}_2$  проводился в индукционной печи тигельного типа в среде аргона в течение 20 минут при температурах 1300°C, 1500°C и 1700°C. Аргон необходим для того, чтобы избежать нежелательного азотирования  $\text{B}_4\text{C}$ .

Экспериментальная убыль массы для каждой реакции (за счет выделения газа CO) составила 24,41%; 31,12%; и 36,08% соответственно, а в свою очередь расчетная составила 36,2%. Рентгенофазовый анализ показал, что практический чистый однофазный продукт был получен при температуре 1700°C. Согласно результатам атомно-эмиссионной спектрометрии содержание хрома в 3-м образце составляет 68,06%, содержание бора 31,07%, что близко к расчётному значению. Проведя термический анализ, выяснили, что 3-й образец  $\text{CrB}_2$  начинает окисляться при температуре 498°C, а при выдержке при температуре 1000°C в течение 3 часов он окисляется на 44%, что говорит о его высокой термической стойкости.

Выполнив седиментационный анализ, выяснили, что средний размер частиц составил 7,95 мкм, рассчитанные величины стандартного отклонения и коэффициента асимметрии показали, что частицы имеют широкий диапазон дисперсности, а кривая распределения симметрична.

Таким образом, НВУ является очень хорошим и перспективным материалом для получения порошка  $\text{CrB}_2$  карбидоборным методом в одну стадию.

## КОМПЛЕКСЫ ЖЕЛЕЗА(III) С 2,6-ДИОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТОЙ В РАСТВОРАХ РЯДА КАТИОННЫХ ПАВ, ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА И ИХ СМЕСИ

Шайымова Ю.Р., Зиятдинова А.Б., Амиров Р.Р.

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

*julia\_shayimova@mail.ru*

Железо участвует во многих биохимических и технологических процессах, поэтому актуальной задачей является разработка и усовершенствование методов определения ионов этого металла. В настоящее время для количественного анализа ионов железа(III) используются окси- и диокси-производные бензойной кислоты. Комплексы с такими лигандами водорастворимы и имеют окраску, зависящую от pH среды, что позволяет использовать их в аналитических методиках.

В докладе представлены результаты исследования комплексов  $\text{Fe}^{3+}$  с 2,6 диоксибензойной кислотой (2,6-DHB) методами спектрофотометрии и ЯМР-релаксации. Методом математического моделирования по программе CPESSPR были рассчитаны константы устойчивости металлокомплексов, их спектральные и магнитно-релаксационные характеристики, уточнены области pH их накопления.

Для проверки возможности «стимулирования» образования высокоустойчивых бис- и трис-комплексов, были проведены эксперименты в присутствии катионных добавок. В качестве последних использовали водорастворимый полимер полиэтиленимин (ПЭИ) и ряд мицеллообразующих ПАВ: бромиды додецилпиридиния (DPyB), цетилпиридиния (CPyB) и цетилтриметиламония (CTAB).

Было установлено, что добавка катионного полимера ПЭИ не оказывает влияния на образование моно-комплекса  $[\text{FeHL}]^+$ , подавляет образование бис-комплекса  $[\text{Fe}(\text{HL})_2]^-$  и стимулирует образование трис-комплекса  $[\text{Fe}(\text{HL})_3]^{3-}$  в кислой среде при всех концентрациях лиганда. Мицеллярные растворы всех изученных катионных ПАВ (DPyB, CPyB, CTAB) затрудняют образование монолигандного комплекса  $[\text{FeHL}]^+$  вследствие связывания лиганда. Строение и концентрация ПАВ влияет на формирование бис- и трис-лигандных комплексов Fe(III) с 2,6-DHB. ПАВ практически не влияют на  $[\text{Fe}(\text{HL})_2]^-$  и заметно стимулируют образование  $[\text{Fe}(\text{HL})_3]^{3-}$ . Изучено состояние комплексов Fe(III) с 2,6-DHB в смесях ПАВ-ПЕI. Найдены концентрационные условия и области pH ассоциации трис-комплексов с агрегатами DPyB-ПЕI и CTAB-ПЕI. Подтверждено образование ассоциатов ПАВ-полимер, которые связывают анионные комплексы Fe(III) с 2,6-DHB.

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

## ОЦЕНКА ЭКСПЛУАТАЦИОННОЙ ДОЛГОВЕЧНОСТИ СТРОИТЕЛЬНЫХ КОНСТРУКЦИЙ ИЗ СТЕКЛОПЛАСТИКА

Шарафутдинова А.А., Каюмов Р.А.

Институт строительства, КГАСУ, Казань, Россия  
Строительный факультет, Казань, Россия

*alina\_shara@mail.ru*

Разрабатывается методика оценки долговечности конструкции. При разработке подходов расчета безопасного срока эксплуатации в общем случае необходимо учитывать понижение прочности при воздействии различных таких факторов, как напряжения, влага, абразивный износ, УФ излучение, температура. В предлагаемом исследовании используется модификация теории Журкова и закон линейного суммирования повреждений. В зависимости от уровня механических напряжений время до разрушения материалов  $\tau$  может определяться по известной формуле Журкова. Однако при достижении статического предела прочности  $\sigma = \sigma^*$  не удается получить условие мгновенного разрушения.  $\tau = 0$ . Для обеспечения этого условия предлагается модифицировать формулу Журкова в виде:

$$\tau = e^{\frac{\beta-\alpha\sigma}{T}} - e^{\frac{\beta-\alpha\sigma^*(T)}{T}} \quad (1)$$

Здесь  $\sigma^*(T)$  - мгновенный предел прочности материала при температуре  $T$ ,  $\tau$  – время до разрушения,  $\alpha$  и  $\beta$  – константы материала,  $T$  – температура (К),  $\sigma$  – напряжение (Мпа).

Закон линейного суммирования поврежденности позволяет определить потерю ресурса за определенный промежуток времени при переменных нагрузках или температурах. Согласно этой теории поврежденность, накопленная за время  $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$ , будет

$$\Delta \omega_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{dt}{t^*} \quad (2)$$

Здесь  $t^*$  - время до разрушения от напряжений, которые действуют в момент времени  $t := [t_i - t_{i-1}]$ .

Приводятся результаты длительных экспериментов, проведенных для стеклопластиковых образцов, и результаты их обработки. На основе полученных характеристик решены задачи оценки срока службы стеклопластиковых балок при постоянной нагрузке, но переменной температуре, моделирующих ее изменения в течение года.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 15-08-06018 и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект №1660 государственного задания в сфере научной деятельности по Заданию № 2014/58 за 2016*

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВЕТВЛЕННЫХ МЕТАКРИЛОВЫХ СОПОЛИМЕРОВ С АЗОХРОМОФОРАМИ

Шарипова А.В., Левицкая А.И., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

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

*a.v.sharipova@yandex.ru*

Нелинейно-оптические (НЛО) полимерные материалы с органическими хромофорами обладают рядом преимуществ по сравнению с их неорганическими аналогами. Для обеспечения оптимальных величин НЛО отклика материала необходимо разработать эффективные температурно-временные протоколы ориентирования. В настоящей работе методами молекулярного моделирования (программа MacroModel [1]) изучена взаимосвязь *структурно-свойство* модельных разветвленных метакриловых сополимеров с азохромофорами, методами молекулярной динамики [1] исследована локальная подвижность хромофоров и участков цепи в предложенных модельных олигомерах. В ходе конформационного поиска методом Монте-Карло в силовом поле MMFF94s в присутствии растворителя был определен набор уникальных конформаций модельных систем.

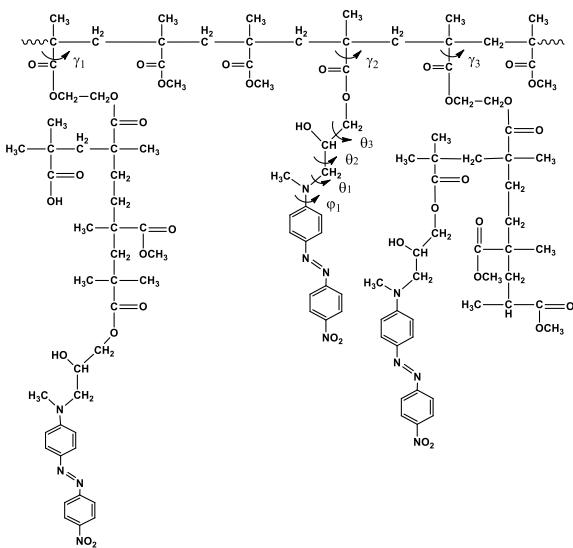


Рисунок 1. – Модель сополимера разветвленного строения.

Для ряда выбранных конформеров квантово-химически (TDHF//AM1) были рассчитаны значения электрических характеристик. Подвижность хромофоров и участков цепи, характеризующаяся изменением торсионных углов, в отобранных конформерах исследована при различных температурах, соответствующих температурам релаксационных процессов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке АН РТ (№ 04-50-ф Г 2016).*

1. MacroModel, version 9.8, Schrodinger, LLC, New York, 2010.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЕКЛОНАПОЛНЕННЫХ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Шафигуллин Л.Н., Шафигуллина А.Н., Шафигуллина Г.Р.

*Набережночелнинский институт (филиал) федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Набережные Челны, Россия*

*misharin\_82@mail.ru*

В соответствии с техническими требованиями, предъявляемыми к шумоизоляционным акустическим экранам автомобилей КАМАЗ, они должны удовлетворять множеству критериев [1]. Провели исследования жесткого стеклонаполненного ППУ, состоящего из полиуретановой системы на основе полиольного компонента А (SPECFLEX 753) и изоцианатного компонента Б (SPECFLEX 138) в соотношении компонентов А : Б - 1,8:1. В качестве наполнителя использовался стеклоровинг марки EDR 24-2400-386 (2400 tex) в количестве 25 масс.ч. на 100 масс.ч. матричного компонента. Изделия из стеклонаполненного полиуретана изготавливались по инновационной технологии «Fiber Composite Spraying» (FCS) [2]. Определяли физико-механические свойства стеклонаполненных ППУ: статический изгиб по ГОСТ 18564-73, твердость по Шору D по ГОСТ 24621-91, стойкость к действию ультрафиолетового излучения на экспериментальной установке, созданной специалистами Набережночелнинского института КФУ. В ходе проведенных экспериментальных исследований выявлено, что в процесс воздействия ультрафиолетового излучения на стеклонаполненные ППУ происходит: уменьшение разрушающего напряжение при изгибе в среднем на 2 МПа; увеличение твердости по Шору D в среднем на 7 единиц. Изменение твердости в процессе воздействия УФ излучения происходит из-за доотверждения компонентов ППУ и ускорения процесса полимеризации в поверхностных слоях. Обнаружено изменение цвета поверхностного слоя.

1. Интернет-ресурс: Газонаполненные пластические массы (пенопласти). <http://chem21.info/info/895542/> (Дата обращения: 13.11.2015).
2. Интернет-ресурс: <http://www.kraussmaffei.com/ru/home.html> (Дата обращения: 06.07.2016)

## РЕГУЛИРОВАНИЕ ПРОПИТЫВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ЭПОКСИДНЫХ СВЯЗУЮЩИХ ВВЕДЕНИЕМ АКТИВНЫХ РАЗБАВИТЕЛЕЙ

Шергин А.А., Курмашева Л.Р., Замараев А.А.

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

*rapsody93@mail.ru*

В последнее время наблюдается широкое применение полимерных композиционных материалов (ПКМ) на основе низковязких эпоксидных связующих практически во всех областях промышленности. Однако, сегодня, наиболее важной задачей становится сокращение стоимости производства и технического обслуживания композиционных конструкций. Для решения этой задачи необходим принципиально новый подход, заключающийся в сочетании новых методов проектирования конструкций из ПКМ и экономичных методов их производства. Наиболее же важным является обеспечение необходимого уровня пропитывающей способности низковязких связующих. В связи с этим, цель данной работы заключалась в разработке низковязких связующих с необходимым уровнем пропитывающей способности. Для достижения этой цели была проведена сравнительная оценка пропитывающей способности различных смесевых композиций. В качестве объектов исследования были выбраны низкомолекулярные марки эпоксидных смол YD-128, ЭД-20, DER-331 и DER-332. Как активные разбавители применяли следующие: азотсодержащий эпоксидный олигомер (ЭА), монофункциональный глицидиловый эфир (LGE), диглицидиловый эфир этиленгликоля (ДЭГ-1), диглицидиловый эфир 1,4-бутандиола (ДГЭБД). Исследование вязкости модифицированных эпоксидных смесей были проведены при различных температурах на ротационном динамическом реометре «Reostress 6000». Физико-химические свойства изучались на приборе DSA20E (EasyDrop) фирмы «Kruss». Измерение плотности низковязких эпоксидных смесей проводили пикнометрическим методом на жидкостном термостате. Проведенные исследования и расчеты показали, что наиболее выгодным уровнем пропитывающей способности обладают композиции DER-332+ДГЭБД (3%) и YD-128+LGE (3%). Показано, что из всех параметров, влияющих на пропитывающую способность связующих, превалирующий вклад оказывает вязкость, которая не должна превышать 0,2 Па·с.

## ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИТОВЫХ НАНОПЛАСТИН В СУПЕРКОНДЕНСАТОРАХ

Шибаев А.А.<sup>a</sup>, Юсин С.И.<sup>a,b</sup>, Ухина А.В.<sup>b</sup>, Баннов А.Г.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Новосибирский государственный технический университет,  
Механико-технологический факультет, Новосибирск, Россия

<sup>b</sup> Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

*shibaev\_aleksandr@inbox.ru*

В настоящее время весьма актуальной проблемой является повышение экологичности эксплуатации автотранспорта в больших городах. Выбросы оксидов азота, серы, углерода значительно ухудшают экологическую обстановку мегаполисов. Эту проблему могло бы решить использование электротранспорта. К сожалению, использование аккумуляторов из-за присущих им недостатков делает его применение затруднительным. Использование суперконденсаторов является более эффективным решением такого рода проблем.

Сегодня известен широкий круг углеродных материалов, которые тестировались в качестве электродов суперконденсаторов: однослойные и многослойные углеродные нанотрубки; восстановленный оксид графена; карбидный активированный углерод и другие [1]. Весьма перспективным материалом для использования в качестве электродов суперконденсаторов являются графитовые нанопластины (ГНП).

Данная работа посвящена исследованию процесса химической обработки графитовых нанопластин в растворах азотной кислоты. Проведено исследование влияния концентрации азотной кислоты на удельную емкость материала. В качестве прекурсора использовались ГНП, полученные из терморасширенного графита путем ультразвукового диспергирования в диметилсульфоксиде. Исходные и модифицированные ГНП исследовали с помощью широкого спектра современных методов анализа: методами растровой электронной микроскопии, рентгенофазового анализа, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и других.

*Исследования проводились при поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых ученых - кандидатов наук (МК-5360.2016.8).*

1. А.Ю. Рычагов, Ю.М. Волькович, М.А. Воротынцев и др. Электрохимическая энергетика, 2012, **12(4)**, 167-180.

## ПОСТРОЕНИЕ ТЕНЗОРА СТРУКТУРЫ КОСТНОЙ КОРТИКАЛЬНОЙ ТКАНИ

Шигапова Ф.А.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань, Россия*

*fainashigapova.post@gmail.com*

Костная ткань – пористый материал, способный изменяться под воздействием внешних нагрузок. При изменении величины и (или) направления внешней силы – преимущественно, силы тяжести организма – меняется внутренняя структура ткани, что может повлиять на прочность кости [1]. Этот неблагоприятный фактор особенно сильно сказывается на несущих костях – тазовых, бедренных, и т.д. [2,3]

Для того чтобы можно было оценить напряженно-деформированное состояние костной ткани, как пористого материала, необходимо включить в определяющее соотношение слагаемое, отвечающее за пористость. Данное слагаемое является тензором 4 ранга. Из эксперимента было установлено, что во введенной системе координат (декартова система координат: направление z ориентировано вдоль длины трубчатой кости, два других лежат в плоскости поперечного сечения кости), тензор структуры имеет следующий вид:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} H_1 & 0 & 0 \\ 0 & H_2 & 0 \\ 0 & 0 & H_3 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Осредненные ненулевые диагональные элементы  $H_i$  были найдены на основе статистической обработки данных. Также были определены направления главных осей тензора относительно исследуемого образца.

1. Р.Р. Гайсин, Р.Х. Закиров, Р.А. Зарипов, А.В. Никифорова, О.А. Саченков. Трехмерная реконструкция внутренних органов с одним характерным размером на основе компьютерной томографии. *Практическая медицина*, 2013, **1-2-1(69)**, 22-24.
2. Ю.Г. Коноплев, А.В. Мазуренко, О.А. Саченков, Р.М. Тихилов. Численное исследование влияния степени недопокрытия вертлужного компонента на несущую способность эндопротеза тазобедренного сустава. *Российский журнал биомеханики*, 2015, **19**, 330-343.
3. Р.Ф. Хасанов, А.П. Андреев, А.П. Скворцов, О.А. Саченков, И.В. Яшина. Биомеханическое обоснование хирургического лечения болезни Легг-Кальве-Пертеса. *Практическая медицина*, 2015, **4-1**, 200-203.

## АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ОБРАБОТКА ГРАФИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПОРИСТЫХ СРЕД

Шигапова Ф.А.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань, Россия*

*fainashigapova.post@gmail.com*

В работе представлен программный комплекс для ускорения процесса обработки изображений. Автоматизация процесса анализа графических изображений позволяет оптимизировать научные исследования, минимизировать затрату труда на рутинную обработку данных [3], а также повысить качество получаемой информации, повысить точность результатов, что является актуальной задачей при выявлении статистических закономерностей [1,2]. Апробация работы производилась в рамках проекта по исследованию влияния гипогравитации на структуру костной ткани. Была сформулирована задача определения пористости и построения тензора структуры костной ткани по данным компьютерной томографии.

Образец кости (бедренная кость) подвергался сканированию на компьютерном томографе в трех областях: в диафизе, метафизе и эпифизе. Из полученных данных сканирования выделялись кубические образцы. По ним определялась пористость, тензор структуры. Таким образом, мы получили картину распределения пористости и характеристику структуры костной ткани в различных участках кости в зависимости от пространственного расположения.

1. Р.Х. Закиров, Р.А. Зарипов, Ю.Г. Коноплев, В.И. Митряйкин, О.А. Саченков. Диагностика асептического некроза головки бедренной кости с использованием спиральной компьютерной и магнитно-резонансной томографии и применение математического моделирования при планировании операции по эндопротезированию тазобедренного сустава. *Практическая медицина*, 2012, **8-2 (64)**, 63-68.
2. Р.Р. Гайсин, Р.Х. Закиров, Р.А. Зарипов, А.В. Никифорова, О.А. Саченков. Трехмерная реконструкция внутренних органов с одним характерным размером на основе компьютерной томографии. *Практическая медицина*, 2013, **1-2-1 (69)**, 22-24.
3. Р.Р. Гайсин, А.В. Никифорова, В.В. Кугуракова, О.А. Саченков. Трехмерная платформонезависящая визуализация данных томографии. *Научно-технический вестник Поволжья*, 2013, **4**, 137-139.

## РЕЛАКСАЦИЯ ПАРАМАГНИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В СИНТЕТИЧЕСКОМ ГИДРОКСИАПАТИТЕ В СЛУЧАЕ СОДОПИРОВАНИЯ

Гафуров М.Р., Биктагиров Т.Б., Мамин Г.В., Шуртакова Д.В., Орлинский С.Б.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

*darja-shurtakva@mail.ru*

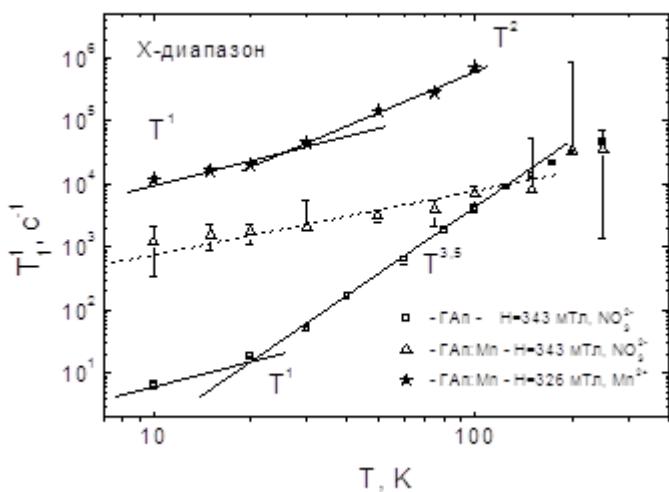
В последнее время гидроксиапатит часто используется в медицине в качестве биокерамики для стоматологических и ортопедических имплантатов, так как обладает химическими и кристаллографическими сходствами с минеральной частью кости, что обуславливает актуальность его исследования.

Целью работы являлось определение времени релаксации в образцах гидроксиапатита «недопированного» размерами 30 нм и 1 мкм, а так же в образцах гидроксиапатита, допированного примесью Mn 0.05 мол.% в диапазоне температур 10-250 К. Процесс спин-решеточной релаксации измерялся по восстановлению продольной намагниченности после инвертирующего импульса на спектрометре Elexsys-580/680 в импульсном режиме, в X-диапазоне частот.

В образцах наблюдались спектры ЭПР комплексов  $\text{NO}_3^{2-}$  [1] и ионов  $\text{Mn}^{2+}$  (для допированного образца). Времена релаксации измерялись в магнитном поле  $H=343.3$  мТл для комплексов  $\text{NO}_3^{2-}$  (переход  $M_I=0$ ) и  $H=326$  мТл для ионов  $\text{Mn}^{2+}$ .

Была получена температурная зависимость скорости восстановления спин-решеточной релаксации в образцах недопированного гидроксиапатита с размерами 30 нм и 1000 нм. В диапазоне температур 20-100 К зависимость  $T_1^{-1}$   $\text{NO}_3^{2-}$  центров от температуры частиц со средним диаметром 1 мкм описывается законом  $\sim T^4$ , отличном от обычных  $T^9$  или  $T^5$ . Для частиц со средним диаметром 30 нм зависимость  $T_1^{-1}$  описывается законом  $T^{3.5}$ , что позволяет сделать предварительные выводы о влиянии размера наночастиц на скорость релаксации.

На рисунке можно увидеть резкое изменение времени релаксации  $\text{NO}_3^{2-}$  центров в ГАп с примесью ионов  $\text{Mn}^{2+}$ , что указывает на существование этих двух центров в одной наночастице.



Таким образом температурные зависимости времен спин-решеточной релаксации могут выявить новые данные о расположении примесей в наночастицах.

1. M.Gafurov et. al. Nitrogen-containing species in the structure of the synthesized nano-hydroxyapatite. Pis'ma v ZhETF, 2014, **99(4)**, 223-230.

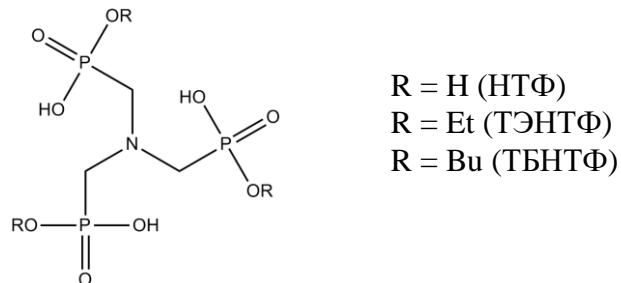
## КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА ТРИАЛКИЛОВЫХ ЭФИРОВ НИТРИЛОТРИМЕТИЛЕНФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Шурыгин И.Д., Гарифзянов А.Р.

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

*idshurygin@gmail.com*

Фосфорорганические комплексоны, в частности – нитрилотриметиленфосфоновая кислота (НТФ) имеют широкое применение в аналитической химии и промышленности [1]. Целью настоящей работы является изучение комплексообразующих свойств трибутилового (ТБНТФ) и триэтилового (ТЭНТФ) эфиров НТФ.



Методом потенциометрического титрования определены константы диссоциации ТЭНТФ ( $pK_1 = 1.32$ ,  $pK_2 = 1.43$  и  $pK_3 = 6.46$ ) и ТБНТФ ( $pK_1 = 1.02$ ,  $pK_2 = 1.29$  и  $pK_3 = 6.25$ ) лигандов, а также изучено комплексообразование с ионами  $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Zn^{2+}$  в водном растворе при  $I = 0.2$  М ( $KNO_3$ ). Исследование процессов комплексообразования проводили в диапазоне pH 1.5-7.5 при мольном соотношении металл:лиганд 1:1. В обоих случаях было установлено, что в изучаемом диапазоне pH существует только один комплекс, в состав которого входит полностью депротонированная форма лиганда –  $ML^-$ , где  $M = Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Zn^{2+}$ .

	$CoL^-$	$NiL^-$	$ZnL^-$
$lg\beta$ (ТБНТФ)	4.96	3.87	6.36
$lg\beta$ (ТЭНТФ)	5.30	4.49	6.74
$lg\beta$ (НТФ) [2]	14.4	11.1	16.4

Данные комплексные формы являются доминирующими в нейтральной и слабокислой областях pH. В кислой области pH происходит их разрушение с образованием аква-иона металла и протонированных форм лиганда.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-03-00458).*

1. К.А. Петров, В.А. Чаузов, Т.С. Ерохина, *Ж. Успехи химии*, 1974, **43**, 2045-2085.
2. A.E. Martell, R.M. Smith. *Critical stability constants*, 1 ed.; Plenum Press: New York, 1982, 227-228.

## ИЗУЧЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ПОЛИМЕРОВ ПО КОЛЕБАТЕЛЬНЫМ СПЕКТРАМ ФОТОХРОМНЫХ ЗОНДОВ

Шухина К.Л., Фишман А.И.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

*nefedieva\_ksu@mail.ru*

В последнее время возрос интерес к органическим полимерам с ковалентно присоединенными нелинейно-оптическими хромофорами. Ориентация хромофорных фрагментов может быть осуществлена путем приложения переменного (оптического) поля. Такие анизотропные среды могут быть использованы для создания устройств хранения информации, оптических переключателей и др. Важным свойством этих материалов, определяющим их практическое применение, является релаксационная стабильность – способность в течение заданного времени сохранять наведенную ориентацию хромофорных групп.

Время релаксации ориентированных фрагментов связано с локальной подвижностью полимерной цепи. В данной работе предлагается исследовать характер подвижности и величину свободного объема полимера, по динамике релаксации ориентированных хромофоров, входящих в состав полимерной цепи. Нами исследовались пленки эпоксиаминного полимера с ковалентно присоединенными азохромофорными группами ОАХФ [1]. Для ориентации хромофорных фрагментов пленки освещались линейно поляризованным лазерным излучением с линией возбуждения, попадающей в полосу поглощения вещества ( $\lambda = 532$  нм). Интенсивность света варьировалась в интервале от 5 до 20 мВт/см<sup>2</sup>. Динамика изменения анизотропии с температурой в интервале от +30 до +140°C при постоянном освещении регистрировалась по дихроизму (D) ИК полос поглощения 1139 ( $\nu_s(CN)$ ) и 1338 см<sup>-1</sup> ( $\nu_s(NO_2)$ ) и степени деполяризации ( $\rho$ ) линии 1139 см<sup>-1</sup> ( $\nu_s(CN)$ ) в спектрах КР. Характер зависимостей D(T) и  $\rho(T)$  изменялся при температуре 58 ± 7°C, что свидетельствует о возникновении дополнительного канала дезориентации хромофоров. По данным диэлектрической спектроскопии [2] в этом температурном интервале наблюдается  $\beta_1$  релаксационный переход. Полученные экспериментальные данные позволяют заключить, что этот переход связан с возникновением ориентационной подвижности фрагментов полимерной цепи, размер которых близок к размеру хромофорных групп.

Данную методику можно использовать для получения дополнительной информации о природе релаксационных переходов, величине свободного объема и подвижности полимерных цепей, с ковалентно присоединенными хромофорными группами.

*Исследования были выполнены на оборудовании Федерального центра коллективного пользования Казанского федерального университета*

1. T.A. Vakhonina et al, *Proc. of SPIE*, 2011, **7993**, 1-8.
2. N.A. Nikonorova et al, *Chem. Phys. Lett*, 2012, **552**, 114.

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ АВТОМАТИЧЕСКОГО УПРАВЛЕНИЯ ДОРОЖНЫМ ДВИЖЕНИЕМ.

Ющенко М.А., Данилаев М.П.

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

*yushenko.m@mail.ru*

В последние годы актуальным является вопрос избытка автотранспортных средств на дорогах в крупных городах России. Так, например, по данным РБК-рейтинг на 2016г такие города, как Москва, Екатеринбург, Казань являются одними из самых «автомобильных» городов России.

Анализ показывает, что значительно смягчить ситуацию на дорогах позволит комплекс мероприятий, связанных с совершенствованием управления транспортным потоком в городе – внедрением компьютеризованных автоматических систем управления дорожным движением (АСУДД) на уличной сети городов [1].

Целью данной работы является разработка основ построения системы автоматического управления дорожного движения.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

1. Выявить наиболее подходящую структуру системы управления, исходя из приведенных требований;
2. Подобрать протокол связи, который будет соответствовать требованиям системы;
3. Промоделировать работу системы для участка города.

В результате был предложен подход к построению системы. Данная система позволяет реализовать автоматическое управление дорожным движением на дорогах города, это достигается с помощью камер, установленных на дорогах города и передающих информацию о скорости движения транспорта на локальный сервер.

1. Горлов Ю. Г. Имитационное моделирование дорожного движения по транспортной сети промышленного центра. Материалы НТС: Современная миссия технических университетов в развитии инновационных территорий. Варна, 2004, 125-135.

## РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СХЕМЫ ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ СЕЙСМОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Яббарова Д.Р.

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

*yabbarova.d@mail.ru*

Землетрясения являются проявлением сейсмической активности земной коры и одним из самых опасных стихийных явлений на Земле. Отдельные районы планеты страдают особо активной сейсмической неустойчивостью. В том числе, Камчатка относится к одному из таких районов планеты.

Научная новизна исследования состоит в том, что на основании проведенных исследований обоснована необходимость использования и совершенствования информационных технологий в сейсмических исследованиях, вследствие чего была разработана конкурентоспособная система передачи информации в условиях работы в шахтах, которая отличается высокой помехоустойчивостью [1].

Для достижения цели построения информационно-измерительной системы необходимо провести:

1. Обзорная проработка темы;
2. Разработка структурной и функциональной схем системы;
3. Расчет системных параметров и обоснование выбора микропроцессорной части измерительного канала;
4. Расчет узлов принципиальной схемы измерительного канала подземного блока станции.

Таким образом, можно сделать вывод, что была разработана информационно-измерительная система сбора и обработки сейсмической информации, работающая в автономном режиме.

1. Казаков К.Ю. Методика обработки сигналов и модели функционирования акустико-сейсмических информационно-измерительных систем наблюдения объектов. Автореферат диссертации. Тула. 2007 С.20.