

Казанский (Приволжский) федеральный университет



**Сборник Тезисов
Всероссийской школы-конференции студентов,
аспирантов и молодых ученых
«Материалы и технологии XXI века»**

Казань

11-12 декабря 2014 г.

Казанский (Приволжский) федеральный университет



Сборник Тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века»

Казань

11-12 декабря 2014 г.

Казанский (Приволжский) федеральный университет



Сборник Тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века»

Сборник Тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века»/ Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: Изд-во КФУ, 2014. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM); 12 см. – Систем. требования: ПК с процессором 486+; Windows 95; дисковод CD-ROM; Adobe Acrobat Reader.

Казань
11-12 декабря 2014 г.

Организатор

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Организационный комитет

Сопредседатели:

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

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

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

Аганов А.В. (директор Института физики КФУ)

Координатор:

Варфоломеев М.А.

Ученый секретарь:

Челнокова И.А.

Члены оргкомитета:

Вахин А.В.

Гедмина А.В.

Герасимов А.В.

Каюмов А.Р.

Салин А.В.

Тагиров М.С.

Фахруллин Р.Ф.

Исаков Д.Р.

Студенческий оргкомитет:

Захаров М.Ю.

Гарипова Ю.И.

Гайфуллин М.Р.

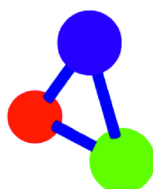
Партнеры конференции



NETZSCH



ООО «Синергия Технологий»



ХимЭлемент

OPTEC
Connecting solutions

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1 БИОМЕДИЦИНА И ФАРМАЦЕВТИКА .. 7

СЕКЦИЯ 2 НЕФТЕРАЗРАБОТКА,
НЕФТЕПЕРЕРАБОТКА И НЕФТЕХИМИЯ..... 87

СЕКЦИЯ 3 ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ:
СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА 154

СЕКЦИЯ 1 БИОМЕДИЦИНА И ФАРМАЦЕВТИКА

НОВЫЕ АНТАГОНИСТИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ШТАММЫ ЛАКТОБАЦИЛЛ ДЛЯ ПРОБИОТИКОТЕРАПИИ

Анисимова Е.А., Потапова А.С., Яруллина Д.Р.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
elizaveta-real@mail.ru*

Бактерии рода *Lactobacillus* способны подавлять развитие патогенных и условно-патогенных микроорганизмов за счет образования целого ряда антимикробных веществ: органических кислот, бактериоцинов, перекиси водорода и др. Антагонистически активные лактобациллы используются в пробиотиках, а также в качестве продуцентов веществ с бактерицидными свойствами для пищевой отрасли и медицины. Целью данной работы является анализ антагонистической активности у новых штаммов лактобацилл, выделенных из растительного материала.

Из силоса, квашеной и свежей капусты, соленых огурцов и моченых яблок выделены 20 штаммов микроорганизмов и установлена их принадлежность к роду *Lactobacillus*, согласно ГОСТ 10444.11-89 и прямому белковому профилированию MALDI-TOF. Методом агаровых блоков оценена антагонистическая активность лактобацилл в отношении *Klebsiella sp.*, *B. cereus*, *Salmonella sp.*, *E.coli*, *S.marcescens*, *Listeria monocytogenes*, *S. epidermidis*, *S. aureus*. Из культуральной жидкости лактобацилл высаливанием сульфатом аммония при 70% насыщения выделены бактериоцины и диффузионным методом исследована их антагонистическая активность в отношении тех же тест-микроорганизмов. На среде МРС с 3,3',5,5'-тетраметилбензидином и пероксидазой оценена способность лактобацилл продуцировать H₂O₂. Также в работе определена скорость закисления среды при росте на ней лактобацилл. По совокупности исследованных свойств штаммы *Lactobacillus sp.* FCa 1L, *L. plantarum* FCa 3L, *L. plantarum* S6 и *L. plantarum* S7 оказались наиболее антагонистически активными и, следовательно, наиболее перспективными в фокусе биотехнологического интереса.

ОКИСЛЕННАЯ ЦЕЛЛЮЛОЗА В ЧЕЛЮСТНО-ЛИЦЕВОЙ ХИРУРГИИ ДЛЯ УСТРАНЕНИЯ ПОСЛЕОПЕРАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

Лунева Л.А., Швед И.А., Апанасович М.В.

*Белорусский государственный медицинский университет, Минск, Республика Беларусь
apanasovi4@gmail.com*

При больших послеоперационных дефектах репаративные процессы в кости могут быть значительно замедлены вследствие развития воспалительных осложнений, число которых составляет 47-57%. Нередко процесс восстановления не идет дальше формирования соединительной ткани и затягивается на годы. После оперативного вмешательства на верхнечелюстной пазухе возникает дефект ее передней стенки, и в послеоперационном периоде мягкие ткани щеки, лишённые опоры, втягиваются в пазуху, вместе с рубцами заполняют ее, нередко приводят к реоперации. В последнее время появилась концепция регенерации костной ткани с использованием мембраны, выполняющей роль «фильтра», которая предотвращает пролиферацию эпителия в костных дефектах, увеличивает регенерацию кости.

Цель исследования – изучение использования окисленной целлюлозы (МКЦ) в качестве мембраны для восстановления анатомической целостности костной ткани в послеоперационных дефектах. В проводимом исследовании нами использовалась МКЦ, содержащая гентамицин и тимоген или цефалексин и пролин. На основании изучения репаративных процессов в послеоперационных дефектах с использованием клинических, лучевых и морфологических методов исследования доказано, что МКЦ легко моделируется, принимая нужную форму, создает эффективную биологическую герметизацию костного дефекта, вызывает пролиферативную реакцию ткани, препятствует прорастанию клеток эпителия и соединительной ткани в послеоперационный костный дефект. Морфологические исследования на экспериментальных животных, а также оценка динамического состояния репаративного процесса у пациентов после оперативного вмешательства при заболеваниях радикулярная киста нижней и верхней челюсти, в том числе киста, проросшая в ВЧП, а также хронический одонтогенный верхнечелюстной синусит с последующим замещением костного дефекта МКЦ, показали, что целлюлоза активизирует процесс регенерации костной ткани, формирование зрелой костной ткани в костных полостях происходит на 120 и 180 сутки в зависимости от размера костного дефекта. Без использования МКЦ процессы остеогенеза находятся в этот период наблюдений в стадии неполного завершения, регенерация кости наблюдается лишь на 240 сутки и в более поздний срок. Продолжительность послеоперационного периода пациентов в клинике, лечение которых проводили с применением МКЦ, сокращается на 7,8-26,0% в зависимости от диагноза заболевания. Экспериментально-клинически доказана целесообразность замещения послеоперационных дефектов МКЦ, обладающей противовоспалительным, гемостатическим, антимикробным и стимулирующим остеогенез действием.

ТЕСТИРОВАНИЕ НОВЫХ ПРОТИВОПАРКИНСОНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ – ДИОЛА И ДИИЛА ДИАЦЕТАТА

Архарова И.А.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
ircha-@mail.ru*

Сегодня в РФ насчитывается около 200 тыс. людей, страдающих болезнью Паркинсона. Несмотря на довольно обширный арсенал противопаркинсонических средств [1], все они имеют ограниченную эффективность. Все это делает актуальным поиск и исследование биологических свойств новых противопаркинсонических веществ. Целью данной работы явилось исследование токсичности двух новых веществ с потенциальным противопаркинсоническим действием.

В связи с поставленной целью были определены следующие задачи: определить возможные генетические нарушения на модели аллиум-теста и выявить влияние веществ на клетки MCF-7 и фибробласты с использованием MTS-теста. Исследовали субстанции с противопаркинсонической активностью [(1R,2R,6S)-3-метил-6-(проп-1-ен-2-ил)циклогекс-3-ен-1,2-диол] и [(1R,2R,6S)-3-метил-6-(проп-1-ен-2-ил)циклогекс-3-ен-1,2-диол диал диацетат]. В качестве тест-объектов использовали лук (*Allium cepa*), клетки MCF-7, фибробласты. В настоящей работе было определено, что диал диацетат проявил слабый митотоксический эффект. Были обнаружены некоторые хромосомные и ядерные дефекты, но их количество было незначительным. Диол в целом оказывает стимулирующее действие на дыхание исследуемых клеток. Однако характер стимуляции различен – у раковых клеток он повышается с уменьшением концентрации, а у фибробластов наоборот – снижение концентрации вещества приводит к уменьшению стимулирующего эффекта. В отношении эффекта диал диацетата можно отметить, что терапевтические концентрации вещества – 1% - у раковых клеток практически не оказывают эффекта; у фибробластов при этом отмечается легкое подавление дыхания.

1. В.Л. Голубев, Я.И. Левин, А.М. Вейнт Болезнь Паркинсона и синдром паркинсонизма, М.: Медпресс, 1999.

ЛЕКАРСТВЕННАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ЛАКТОБАЦИЛЛ ИЗ КИСЛОМОЛОЧНЫХ ПРОДУКТОВ И ПРОБИОТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ

Ахатова Д.Р., Бруслик Н.Л., Яруллина Д.Р.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
d.ahatova@mail.ru*

Назначение пробиотиков – микробных препаратов, способных оказывать благотворное действие на здоровье человека [ВОЗ], - современный прием восстановления кишечной микрофлоры, нарушенной приемом антибиотиков. Однако часто пробиотики оказываются неэффективны, поскольку входящие в их состав бактерии обладают чувствительностью к антибиотическим препаратам. Целью данной работы является оценка чувствительности к антибиотикам у лактобацилл, выделенных из пробиотических препаратов и кисломолочных продуктов.

В работе для 19 исследуемых штаммов лактобацилл диско-диффузионным методом оценили резистентность к 14 различным антибиотикам: ампицилину, амоксицилину, стрептомицину, канамицину, гентамицину, амикацину, эритромицину, кларитромицину, клиндамицину, ванкомицину, рифампицину, ципрофлоксацину, тетрациклину, хлорамфениколу. Ни один штамм лактобацилл не обладал устойчивостью ко всем использованным антибиотикам. Бактерии *L. delbrueckii subsp. bulgaricus* 51, выделенные из препарата «Гастрофарм» (АО «Биовет», Болгария), демонстрировали наиболее широкий спектр устойчивости, обладая чувствительностью только к рифампицину, тетрациклину и хлорамфениколу. Широкий спектр устойчивости к антибиотикам обнаружен также у бактерий *L. acidophilus n.v.* E.p.317/402 и *L. plantarum* 8P-A3, выделенных из коммерческих пробиотических препаратов - БАД «Наринэ» (ОАО «Narex», Армения) и «Лактобактерин» (ФГУП НПО «Биомед»), соответственно, и только у одного штамма, выделенного из кисломолочного продукта, – *Lactobacillus fermentum* 3-4 из напитка «Тан» (ООО Продукт «Чистая линия»). Наибольшей бактерицидной активностью в отношении лактобацилл обладали антибиотики клиндамицин, ципрофлоксантин, хлорамфеникол, канамицин и тетрациклин, следовательно, при терапии данными антибиотиками необходимо особенно тщательно подбирать пробиотики для восстановления микробиоты организма. Полученные данные о чувствительности лактобацилл к антибиотикам позволяют оптимизировать существующие схемы приема пробиотиков при антибиотикотерапии.

ОБРАЗОВАНИЕ БИОПЛЕНОК РАЗЛИЧНЫМИ БАКТЕРИЯМИ РОДА ENTEROBACTERIACEAE

Аюпова Э.Ф., Кузьменко А.В., Марданова А.М.

Институт Фундаментальной Медицины и Биологии К(П)ФУ, Казань
elmira10221@gmail.com, kuznetschik92@gmail.com

Способность патогенных и условно-патогенных бактерий образовывать биопленки является одним из важнейших аспектов патогенеза многих хронических инфекций. Доказана роль биопленок в возникновении и развитии инфекций, связанных с колонизацией мочевыводящих путей, сердечных клапанов, полости рта, катетеров и др. Известно, что энтеробактерии *Proteus mirabilis*, *Morganella morganii* и *Serratia marcescens* могут вызывать гнойно-воспалительные заболевания различной локализации, вплоть до сепсиса и менингитов, а образование биопленок обеспечивает устойчивость к антибиотикам и персистенцию патогенов в организме.

Целью работы было исследование образования биопленок дикими штаммами *P. mirabilis* 17, *M. morganii* ZM, *S. marcescens* Sm6, а так же влияния инактивации генов нуклеазы (*S. marcescens* Sm6 *nucA*) и эффлюкс системы *macAB* (*S. marcescens* Sm6 *macAB*⁻) на образование биопленок. Для исследования образования биопленок использовали планшетный метод с окрашиванием генциан виолетом. Культуры инкубировали при 30°C и 37°C в среде LB, детской и искусственной моче.

Показали, что бактерии *P. mirabilis* образуют биопленки на разных средах эффективнее, чем остальные исследуемые штаммы. Дикие штаммы обладают более высокой способностью к образованию биопленок на среде LB при 30°C, чем при 37°C, что может быть связано с более высокой подвижностью этих бактерий при 37°C. В тоже время оба мутанта *S. marcescens* образуют биопленки более эффективно при 37°C. 1% глюкоза ингибирует образование биопленки у всех исследуемых штаммов при 30°C на 25-30% от контроля. Однако при 37°C культивирования глюкоза не влияет на образование биопленок. Связывание свободного железа в среде с помощью бипиримидина приводит к ингибированию образования биопленок всеми штаммами на 15-25%. Эффект ингибирования бипиридином менее выражен при 37°C. Инактивация гена внеклеточной нуклеазы *S. marcescens* приводит к ингибированию образования биопленки на среде LB и повышению ингибирования образования биопленки глюкозой и бипиримидином по сравнению с диким штаммом. Инактивация генов эффлюкс системы *macAB* повышает способность к образованию биопленок на среде LB.

ОЦЕНКА МУТАГЕННЫХ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИММОБИЛИЗОВАННЫХ НА ХИТОЗАНЕ ФЕРМЕНТОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КАЧЕСТВЕ РАНОЗАЖИВЛЯЮЩИХ ПРЕПАРАТОВ

Байдамшина Д.Р.^a, Холявка М.Г.^b, Каюмов А.Р.^a

^a *ИФМиБ, К(П)ФУ, Казань*

^b *ВГУ, Воронеж*
prosto-di@mail.ru

Одним из современных направлений биотехнологии является создание перевязочных средств с иммобилизованными ферментами для лучшего ранозаживления. При закреплении ферментов на нерастворимых носителях получают гетерогенные биокатализаторы, которые обладают преимуществами: повышается не только стабильность, но и эффективность полученного препарата за счет управления процессом протекания реакции. Перспективными носителями являются хитозаны. Полимерная матрица молекул хитозана позволяет иммобилизовать ферменты, как внутри сетки, так и на ее поверхности. Производные хитозанов характеризуются нетоксичностью и слабой иммуногенностью [1]. Целью работы был анализ степени токсичности ферментов и хитозанов для клеток про- и эукариот. Трипсин и все варианты хитозана не демонстрировали мутагенного действия в тесте Эймса. РНКза и ДНКза показали мутагенный эффект, и, следовательно, не могут быть рекомендованы к использованию. Также исследовали цитотоксичность соединений, в МТС-тесте на клетках линии MCF7. Все соединения не являются токсичными и могут быть использованы в качестве ранозаживляющих препаратов. Также исследовали морфологию клеток, пролиферирующих в присутствии ферментов и хитозанов. Ни одно из исследуемых соединений не вызывало изменений в морфологии клеток и не оказывало цитостатического эффекта. Надо отметить, что присутствие трипсина усиливало пролиферацию клеток, следовательно, можно ожидать высокого заживляющего эффекта этого фермента. Присутствие всех видов хитозана кроме сукцината хитозана также не нарушало морфологии клеток. Нерастворимые примеси в сукцинате хитозана значительно обрастали клетками измененной формы, в меньшей степени такая картина наблюдалась в случае высокомолекулярного хитозана. Это требует более глубокого исследования, поскольку данный эффект может негативно сказаться при клиническом использовании с иммобилизованными ферментами.

1. Nakorn P., Metals J. Mater. Minerals, 2008, 18, 73-77.

ВЛИЯНИЕ ЭТАНОЛА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АДСОРБИРОВАННЫХ СЛОЕВ ФИБРИНОГЕНА И ФИБРИНА

Бакирова Д.Р., Файзуллин Д.А.

*Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН, Казань
bakirova.dilyafruz@gmail.com, dfaizullin@mail.ru*

Фибриноген – растворимый белок плазмы, образующий при взаимодействии с ферментом тромбином полимеризованный фибрин. Полимерные нити фибрина являются основой сгустка крови, который образуется на стенках сосудов. Изучение изменений свойств адсорбированных слоев мономерных фибриногена и фибрина представляет интерес для выяснения механизмов тромбообразования и управления этим процессом, а также для создания белковых покрытий с заданными свойствами. Структурное состояние белков и процессы их адсорбции из раствора можно регулировать, модифицируя свойства растворителя. В настоящей работе в качестве такого модификатора использован этанол.

Структуру фибриногена и фибрина оценивали методом ИК-спектроскопии. Вязкоупругие свойства пленки фибриногена, адсорбированного на золотом электроде, контролировали методом микрогравиметрии. Все эксперименты выполнялись при 25°C.

Установлено, что влияние этанола на свойства исследованных белков различно для двух диапазонов концентраций спирта. При концентрациях от 0-10 об.% этанол не вызывает существенных изменений во вторичной структуре белков. При этом наблюдается повышение вязкости пленок фибриногена и фибрина, сопровождающееся сорбцией молекул растворителя. Повышение концентрации этанола приводит к усиленной спирализации молекул фибриногена и фибрина, увеличению плотности и жесткости белкового слоя. Обнаружена необратимость изменений зарегистрированных параметров при воздействии концентрированным раствором этанола (40 об.%).

ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ Н- И М-ОТВЕТОВ МЫШЦ ГОЛЕНИ КРЫСЫ ПОСЛЕ КОНТУЗИОННОЙ ТРАВМЫ СПИННОГО МОЗГА

Балтин М.Э., Федянин А.О., Шайхутдинов Н.М.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
baban.bog@mail.ru*

В настоящем исследовании определяли изменение рефлекторной возбудимости нейронов спинного мозга методом тестирования Н-ответа и состояние периферической части нейромоторного аппарата крысы по параметрам М-ответа. В ходе экспериментов было обследовано 12 лабораторных крыс массой 160-240 граммов. Все эксперименты были выполнены с соблюдением биоэтических норм.

Дозированную контузионную травму спинного мозга наносили по модифицированной методике А.Алене (1911). Электромиографическую оценку производили на 1,3, 7, 14, 30, 90 сутки после травмы. Определяли порог, максимальную амплитуду, ЛП и длительность регистрируемых Н- и М – ответов, определяли отношение H_{max}/M_{max} и депрессию Н-ответа при частотной стимуляции.

Изменение параметров М-ответа при контузионной травме спинного мозга продемонстрировали ухудшение состояния периферической части нейромоторного аппарата крысы. Наибольшее падение амплитуды М-ответа наблюдали к 14 суткам ($49\pm 5\%$) в дальнейшем наблюдали незначительное повышение амплитуды М-ответа. Порог Н-ответа снизился после травмы. Однако значимые изменения порога Н-ответа отмечали к 14 суткам, когда порог уменьшился на 67 % от контрольного. Отношение H_{max}/M_{max} у животных после контузионной травмы спинного мозга было выше, чем в контроле. Депрессия Н- рефлекса при 1-5 Гц была менее выражена у травмированных, чем у контрольных животных при соответствующих частотах. Значимые изменения были отмечены на 21 день после травмы, и сохранялись через 3 месяца после травмы.

Наши данные показывают, что происходят существенные изменения в состоянии нейромоторного аппарата крыс в результате контузии спинного мозга. И хотя наибольшие изменения происходят в раннем периоде после контузии спинного мозга, они сохраняются на протяжении 3 месяцев исследования.

Работа поддержана грантом РФФИ - 13-04-01746_a.

ИНАКТИВАЦИЯ ГЕНОВ ПРОТЕИНАЗ В КЛЕТКАХ *BACILLUS PUMILUS* 3-19

Баранова Д.С., Тойменцева А.А., Шарипова М.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
DashulyaBaranova@mail.ru

Протеиназы бацилл широко используются в медицине, пищевой промышленности и биотехнологии. Для создания высокоэффективных продуцентов этих ферментов необходимы знания о механизмах регуляции генов протеиназ, а также установить их роль в физиологии микробной клетки. Для решения таких вопросов часто используют метод инактивации изучаемого гена. Для получения штаммов с инактивированными генами протеиназ использовали метод, который основан на гомологичной рекомбинации между плазмидной и геномной ДНК. Объектами инактивации являлись гены субтилизиноподобной протеиназы (*AprBp*) и металлопротеиназы (*MprBp*) *B. pumilus* 3-19. Инактивацию проводили используя Т-вектор - рTZ57R/Т, в который клонировали рекомбинантную конструкцию, где ген эритромицина (*erm*) встроен между двумя нативными участками (до 1000 п.о.) окружающими ген протеиназы. Конструкции проверяли методом ПЦР и электрофореза в агарозном геле. Получившиеся плазмиды (рTZ57R/Т+*aprBp::erm* и рTZ57R/Т+*mprBp::erm*) трансформировали в клетки *E. coli* DH5α и выделяли для секвенирования. После трансформации рекомбинантных плазмид в клетки *B. pumilus* 3-19 отбор мутантов будет проводиться на питательной среде содержащей антибиотик эритромицин. Колонии, выросшие на антибиотике, будут проверены методом ПЦР, а также на способность секретировать протеиназы. Далее будут изучены изменения в морфологии клеток, способность к спорообразованию, продолжительность фаз роста. Полученные данные позволят установить роль протеиназ в физиологии клеток *B. pumilus* и других бацилл.

БИОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КЛЕТОК ЧЕЛОВЕКА И ЖИВОТНЫХ ДЛЯ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ НА МОДИФИЦИРОВАННОМ НОСИТЕЛЕ

Белините М.А., Перес Хусаенова Э.Л., Фаттахова А.Н.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
labasritas@yandex.ru*

Разработка новых технологичных и недорогих субстратов для культивирования клеточных культур для целей медицины и биотехнологии является неотъемлемой частью развития биомедицинской науки.

Актуальность моей работы заключается в разработке новых технологичных и недорогих субстратов для культивирования клеточных культур для целей медицины и биотехнологии, которые являются неотъемлемой частью развития биомедицинской науки.

С каждым годом растет потребность в большом количестве клеточных линий для проведения исследований. Но выделение большого количества клеток на сегодняшний день является проблемой. Следовательно, необходимо создание методики значительного увеличения клеток.

Целью нашего исследования было создание 2D-матрицы, обладающей определенными свойствами.

Результаты исследований показали, что количество гепатоцитов на опытных матрицах было в 2.8 ± 0.2 раза больше, чем на контрольном гладком стекле, а количество фибробластов в 1.5 ± 0.5 раза было больше, чем на контрольных гладких стеклах.

Проведенное исследование позволило сделать вывод об эффективности культивирования гепатоцитов и фибробластов на стекле, модифицированном ионно-лучевым методом.

ИЗМЕРИТЕЛЬ КРИТИЧЕСКОЙ ЧАСТОТЫ СЛИЯНИЯ МЕРЦАНИЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ ВОЗДЕЙСТВИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ

Бирюкова К.С., Зайцев А.А.

*Московский авиационный институт (НИУ), Москва
k.s.biryukova@mail.ru , en-bon@mail.ru*

Медикаментозное вмешательство практикуется очень широко. На нём основана практически вся терапия. Закономерен вопрос, не является ли такое вмешательство вредным для пациента? Конечно, любое фармацевтическое средство имеет побочные эффекты, нежелательные для организма. Как определить, что лекарство не нанесёт вреда больше, чем пользы? Простейшим примером могут служить аллергические реакции организма. Такие реакции медицина фиксирует практически сразу. Но что делать, если вредное воздействие вновь назначенного фармацевтического средства скрыто, проявится позднее, после наблюдения за пациентом? 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. Предлагается прибор для измерения частотного порога и методы повышения точности измерений в условиях клиники или обихода.

1. Дроботов В.Б., Бирюкова К.С. Новые возможности микросхем при нештатном питании // Материалы Международной школы-семинара «Физика в системе высшего и среднего образования России» / Под ред. Г.Г.Спирина. – Москва, Московский авиационный институт, АПР, июль 2012. - С.73-34.
2. Бирюкова К.С. Генерация пилообразного напряжения при нештатном питании микросхем // Сборник Тезисов Первой Всероссийской Интернет-конференции «Грани науки 2012». – Электронный ресурс. – ISSN 2227-8389 (CD-ROM). – Казань: 2012. – С. 222-223.
3. Бирюкова К.С. Передача информации частотной модуляцией пилообразной несущей частоты / Всероссийский межотраслевой молодёжный научно-технический форум «Молодёжь и будущее авиации и космонавтики – 2012» // Конкурс научно-технических работ и проектов. Аннотации работ. – М.: Московский авиационный институт (НИУ) - – ISBN 978-5-905176-15-9/ - С.70-71.
4. Бирюкова К.С. Новые возможности микросхем при нештатном питании / Всероссийский конкурс научных, образовательных и инновационных проектов студенческих научных обществ: сборник научных работ победителей конкурса. Ч. II / М-во образ. и науки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2012. – 280 с. - ISBN 978-5-7882-1304-0. – С.24-25.

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ ПРОРАСТАНИЯ И ВСХОЖЕСТИ ПРИ ХИМИЧЕСКОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ СЕМЯН РАСТЕНИЙ РОДА *MONARDAL*

Бобрович М.В.^a, Далидчик Т.М.^a, Мазалёва А.Г.^a, Киевицкая Д.А.^a, Саврицкая К.Ю.^a,
Бобрович Д.В.^b

^a ГУО «Плещеницкая средняя школа № 1 Логойского района», г.п. Плещеницы, Беларусь

^b Белорусский государственный технологический университет ЛХФ, Минск, Беларусь
maksimbobrowitsch@mail.ru

Широкое применение регуляторов роста различной природы сдерживается низкими посевными качествами многих лекарственных культур-интродуцентов. В связи с этим весьма актуальным направлением современных исследований является поиск новых эффективных способов предпосевной обработки, не оказывающих вредного воздействия на окружающую среду, и вместе с тем улучшающих агрономические качества семян.

Объектами исследования послужили эфиромаслинные лекарственные растения рода *Monarda*L.: монарда лимонная (*Monardacitriodora*L.) сорт «Мона Лиза», монардагибридная (*Monardahybrida*L.) сорт «Ламбада» и монарда двойчатая (*Monarda didyma*L.) сорт «Панорама».

Химическая обработка семян проводилась регулятором роста эпин+ (гомобрасинолид), далее Гб-1 (10⁻⁴%), Гб-2 (10⁻⁶%), Гб-3 (10⁻⁸%). Биологическая обработка семян проводилась регулятором роста эмистим С(ЭМС), далее ЭМС-1 (10⁻⁴%), ЭМС-2 (10⁻⁶%), ЭМС-3 (10⁻⁸%). Полученные данные были статистически обработаны с помощью программы M.Exel [1].

Энергия прорастания у растений *Monardacitriodora*s. «Мона Лиза» при обработке ЭМС-1, ЭМС-2, ЭМС-3, Гб-1 и Гб-2 увеличивается относительно контроля и составляет соответственно 163%, 150%, 138%, 150% и 138%. При воздействии ЭМС-2 и ЭМС-3 на растения *Monardadidyma*s. «Панорама» увеличивается в 2,25 и 2,75 раза соответственно относительно контроля. Биохимическая обработка на растения *Monardahybrida*s. «Ламбада» оказывает отрицательное влияние, за исключением ЭМС-2, который увеличил энергию прорастания на 233%.

На всхожесть позитивный результат оказывает обработка семян *Monardacitriodora*s. «Мона Лиза» ЭМС-2, ЭМС-3, Гб-1 и Гб-2 и составляет 133%, 144%, 178% и 144% соответственно относительно контроля. При воздействии биохимической обработки семян *Monardadidyma*s. «Панорама» и *Monardahybrida*s. «Ламбада» мы наблюдаем отрицательное влияние и ошибки в пределах опыта.

1. Алексейчук, Г.Н. Физиологическое качество семян сельскохозяйственных культур и методы его оценки / Г.Н. Алексейчук, Н.А. Ламан – Минск: Право и экономика, 2105. – 46с.

БИОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ФИТОСЫРЬЯ ИНТРОДУЦИРОВАННЫХ РАСТЕНИЙ СЕМЕЙСТВА *LAMINACEAE LINDL*

Бобрович М.В.^а, Синявская М.М.^а, Бобрович Д.В.^б

^а ГУО «Плещеницкая средняя школа № 1 Логойского района», г.п. Плещеницы, Беларусь

^б Белорусский государственный технологический университет ЛХФ, Минск, Беларусь
maksimbobrowitsch@mail.ru

Особое место в ряду интродуцентов, являющихся потенциальными источниками лекарственного сырья в Республике Беларусь, занимают малоизученные лекарственные растения семейства Яснотковые (*Laminaceae Lindl*) рода монарда (*Monarda L.*). С целью выявления наиболее перспективных для использования в фармакопейных целях таксонов данного рода в 2011-2014 гг. было проведено исследование биохимического состава растений рода *Monarda L.*

Monarda L. – многолетнее травянистое растение, обладающее лекарственными свойствами с сильным приятным ароматом. Используются в качестве антистрессового, слабительного, бактерицидного средства и т. д.. Представители рода *Monarda L.* содержат большое количество полезных эфирных масел, витаминов (В₁, В₂, С) и другие биологически активные вещества, такие как флавоноиды, фенольные гликозиды, гидрооксикоричные кислоты и др.[1].

Целью данной работы является изучение влияния препаратов эпин+ (гомобрасинолида), далее Гб, – Гб-2 (10⁻⁶%), и эмистима С (10⁻⁸%), на уровень фторичных метаболитов в листьях растений не снижающих качества фитосырья произрастающих в больших масштабах на территории РБ.

Количественное определение суммарной фракции флавоноидов и фенольных соединений проводили спектрофотометрическим методом при соответствующей длине волны по методике Шлыка.

Таким образом, установлено, что растения рода *Monarda L.*, культивируемые в условиях Беларуси под влиянием различных видов экзогенного воздействия обладают достаточной способностью к биосинтезу биофлавоноидов. Наиболее высокими показателями биосинтеза флавоноидов и фенольных соединений характеризуется Гб-2 их сумма составляет 0,48705 и 2,72798 соответственно, т. к ЭМс ухудшает накопление фенольных соединений в 1,98 раза относительно контроля, а при накоплении флавоноидов наблюдается позитивный результат – увеличение в 1,5 раза относительно контроля.

1. Дорошева, З.Н. Биология дикорастущих растений семейства *Lamiaceae Lindl*. в лесостепном Предуралье Республики Башкортан: автореф. дисс... канд. биол. наук: 03.00.05; 03.00.12 / З.Н. Дорошева. - Уфа, 2005.

СТАБИЛЬНОСТЬ БИОМАРКЕРА НЕФТЕПРОДУКТОВ НА ОСНОВЕ ПИГМЕНТА БАКТЕРИЙ *SERRATIA MARCESCENS*

Васильев И.Ю., Нуриахметова Ч.Б., Яруллина Д.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
terk_tb@mail.ru

Пигменты микробного происхождения могут служить альтернативой широко используемым в промышленности синтетическим пигментам, однако их практическое использование ограничивается стабильностью молекулы окрашенного вещества [1]. Настоящая работа нацелена на анализ стабильности продигозина, красного пигмента энтеробактерий *Serratia marcescens*, предложенного нами к использованию в качестве топливного маркера [2, 3].

Показали, что зависимость величины характеристического пика оптического поглощения при 540 нм от концентрации продигозина носит линейный характер, сохраняющийся при низких значениях концентрации пигмента. Температура слабо влияет на спектральные характеристики пигмента: у образцов топлива, маркированных биомаркером на основе продигозина и выдержанных 10 суток при 25°C, величина пиков оптического поглощения при 540 нм снизилась на 19%, при 50°C - на 29%, при 0°C - на 13% от исходных значений. Установили, что продигозин хорошо растворим в этаноле, гексане, бензоле, ксилоле, толуоле, этилацетате, изобутаноле, ацетоне и петролейном эфире. Подтвердили снижение величины пика оптического поглощения при 540 нм в маркированном топливе при щелочном pH и увеличение его при кислом pH. Полученные нами данные свидетельствуют о наличии у продигозина характеристик, необходимых для использования в качестве маркера топлив: хорошая растворимость в неполярных растворителях и легко выявляемые спектры оптического поглощения, которые сохраняются при различных pH и температурах.

1. S. Namazkar, R. Garg, Z. Ahmad, N. Nordin. Int. J. Chem. Sc. App., 2013, 3, 116-129.
2. Е.Г. Глазунова, Д.Р. Яруллина, О.Н. Ильинская. Уч. зап. Казанск. унив. Сер. Естеств. н., 2011, 153, 96-99.
3. А.З. Гарейшина, Е.В. Петухова, Д.В. Юсупова, Н.А. Лебедев, Т.Н. Чертилина, А.З. Пономарева. Пат. изобр. RU № 2218381, заявл. 22.07.02, опубл. 10.12.2003, Бюл. № 34.

АНАЛИЗ ЭКСПРЕССИИ РЕКОМБИНАНТНЫХ ГЕНОВ GDNF И VEGF ГЕНЕТИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫМИ МОНОНУКЛЕАРНЫМИ КЛЕТКАМИ КРОВИ ПУПОВИНЫ ЧЕЛОВЕКА В ЭКСПЕРИМЕНТЕ IN VIVO

Галиева Л.Р., Санатова Э.Р., Гаранина Е.Е, Мухамедшина Я.О.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
yanakazmedhist1@rambler.ru*

Для стимулирования нейрорегенерации представляются актуальными гены глиального нейротрофического фактора (GDNF) и сосудистого эндотелиального фактора роста (VEGF), которые обладают выраженным нейропротекторным и противоапоптозным действием, поддерживают рост аксонов, миелиногенез и ремиелинизацию. Поэтому для получения значимого терапевтического эффекта трансплантируемые генетически модифицированные клетки должны активно экспрессировать терапевтические гены и обладать повышенной способностью к выживанию.

В настоящей работе с помощью методов молекулярного и иммунофлуоресцентного анализа исследована функциональная активность генно-клеточной конструкции для доставки терапевтических генов в область регенерации. В качестве модели использовали дозированную контузионную травму спинного мозга крыс породы Wistar, которым проводили трансплантацию в область повреждения моноклеарных клеток крови пуповины человека (МККП), генетически модифицированных экспрессионными аденовирусными векторами, кодирующими GDNF и VEGF.

Результаты исследования позволили установить эффективность экспрессии рекомбинантного гена в генетически модифицированных клетках *in vivo*, продолжительность выживания трансплантированных клеток и их миграционный потенциал. Полученные данные свидетельствуют, что генетически модифицированные МККП, трансплантированные в область повреждения сразу после нанесения травмы спинного мозга крысы, способны сохранять жизнеспособность до 30 суток и мигрировать на расстояние более 5 мм от места трансплантации в ростральном и каудальном направлении. При этом экспрессионный вектор на основе аденовируса, содержащего терапевтические гены, активно функционирует в трансплантированных клетках, а секреторный продукт рекомбинантных генов имеет потенциальную возможность секретироваться и воздействовать на клетки-мишени.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ГЕНО-КЛЕТОЧНОЙ ТЕРАПИИ БОКОВОГО АМИОТРОФИЧЕСКОГО СКЛЕРОЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕКОМБИНАНТНЫХ АДЕНОВИРУСОВ AD5-VEGF165 И AD5-NCAM₁

Гаранина Е.Е.^a, Федотова В.Ю.^a, Сафиуллов З.З.^b, Исламов Р.Р.^b, Ризванов А.А.^a

^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

^b Казанский Государственный медицинский университет, Казань
kathryn.cherenkova@gmail.com

Боковой амиотрофический склероз—нейродегенеративное заболевание, характеризующееся поражением центральных и периферических мотонейронов. Одной из причин БАС является мутация в гене Cu/Zn –супероксиддисмутазы (*sod1*), где триплет глицина замещен на аланин в 93 положении.

Существующие методы лечения носят симптоматический характер и не способствуют функциональному восстановлению больного. В предыдущих исследованиях нами было показано, что мононуклеарные клетки пуповинной крови человека (МКПК), трансфицированные плазмидной конструкцией pBud-VEGF165-L1CAM мигрируют в очаг нейродегенерации и синтезируют рекомбинантные белки.

Ранее с использованием технологии клонирования Gateway нами были получены рекомбинантные аденовирусы Ad5-VEGF165 и Ad5-NCAM1. Выделение и генетическую модификацию мононуклеарных клеток пуповинной крови рекомбинантными аденовирусами (MOI 10) проводили по стандартному протоколу. Через 16 часов модифицированные клетки вводили трансгенным мышам, модулирующим фенотип БАС. Параллельно осуществляли культивирование модифицированных и нетрансдуцированных МКПК. Через 120 часов РІ проводили оценку эффективности экспрессии генов *vegfl65* и *ncam1*. Повышенная экспрессия мРНК VEGF165 и NCAM1 наблюдалась при ко-трансдукции рекомбинантными аденовирусами МКПК, по сравнению с модификацией одним аденовирусом Ad5-VEGF165 или Ad5-NCAM1. Экспрессия рекомбинантных белков VEGF165 и NCAM₁ подтверждена методом иммуноблоттинга.

Иммуногистохимический анализ спинного мозга выявил положительную реакцию с поликлональными антителами кролика к VEGF, моноклональными антителами мыши к NCAM1. Дополнительное окрашивание с использованием антител к ядерному антигену человека подтвердило гипотезу о хоуминге мононуклеарных клеток в очаг поражения.

Таким образом, доказана эффективность генно-клеточной терапии БАС с использованием рекомбинантных аденовирусов.

ВЫДЕЛЕНИЕ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ ВИРУСОВ БАКТЕРИЙ *BACILLUS ALTITUDINIS*

Гарифулина К.И., Шах Махмуд Р.

Институт Фундаментальной Медицины и Биологии, КФУ, Казань
katila.garifulina@mail.ru

В связи с резистентностью бактерий к существующим антибиотикам, возрос интерес к бактериофагам. Чтобы детально изучить противобактериальные механизмы вирусов все более интенсивно стали заниматься исследованием генетических материалов бактериофагов. Актуальной темой сейчас является получения нуклеиновых кислот и разрушение поверхностных оболочек вируса – капсида, что и явилось целью нашего исследования.

Материалы и методы исследования: В качестве индикаторных культур в работе использовался штамм *Bacillus altitudinis* из коллекции микроорганизмов кафедры микробиологии КФУ.

Получение фаговой культуры проводилось путем многократных пассажей морфологически однотипных негативных колоний на индикаторной культуре, определение титра происходило методом Грациа и модифицированным методом Фишера [1]. Очищение суспензии бактериофага от бактерий и питательных компонентов происходило при помощи трех способов. 1 способ: использовали обработку исследуемого материала хлороформом, затем прогревали при 58-60°C в течение 30 мин. 2 способ: после тщательного осаждения почвы и больших количеств бактерий путем 30 мин. центрифугирования, суспензию отфильтровали через бумажный фильтр. 3 способ: суспензию очищали фильтрацией через 0, 45 мкм фильтр (Millipore, США). Удаление клеточных Н.К. проводили при помощи ДЕАЕ целлюлозы, фермента неспецифической рибонуклеазы и ДНКазы, затем удаляли низкомолекулярные нуклеотиды. Концентрирование фагов проводили с помощью центрифужного концентратора 10кД (Millipore, США). Разрушение фаговых капсидов происходило модифицированным методом с использованием отдельно ЭДТА-Na, pH 8,0, и в комплексе с протеиназой К и додецилсульфатом натрия. Для выделения нуклеиновой кислоты и осаждения использовали фенол и хлороформный стандартный метод.

Результаты и обсуждение: Индикаторный штамм был заранее проверен на отсутствие профага в геноме. Контроль - посев бактериальной культуры без бактериофага. Этапы изменения количества вирусных частиц *Bacillus altitudinis* в ходе очистки вирусных нуклеиновых кислот показали ожидаемые результаты, а именно, что после концентрирования, количество вирусных частиц увеличилось в 20, 10 и 6 раз по отношению к предыдущим этапам. Известен факт, что после разрушения фаговых капсидов жизнеспособность вируса теряется, поэтому мы не наблюдали появление бляшкообразующих единиц. Снижение количество бактериальных нуклеиновых кислот (Н.К.) в растворе на двух первых последовательных этапах нет, а на третьем этапе происходит резкое уменьшение количества Н.К. После разрушения фага произошел активный выход фаговой Н.К., ее количество в растворе возросло, своего максимума достигло на этапе выделения и осаждения, что говорит о хорошем выходе Н.К. фага. Количество белка максимально на этапе концентрирования фагов, вследствие поглощения света капсидами.

1. Золотухин, С.Н. Молекулярно-генетические исследования по изучению генома новых бактериофагов / С.Н. Золотухин // Вестник УГСХА, 2010. – Т.11. – 65-68 с.

ВЛИЯНИЕ КОРМОВОЙ ДОБАВКИ НАНОРАЗМЕРНОГО ФОСФОРИТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЯСА ПЕКИНСКИХ УТОК

Герасимов А.П.^a, Ежков Д.В.^a, Ежкова А.М.^b

^a ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань,

^b ГНУ Татарский НИИ агрохимии и почвоведения Российской академии сельскохозяйственных наук, Казань
andris.gera@mail.ru

Применение в кормлении сельскохозяйственных животных кормовых добавок, полученных с использованием методов нанотехнологии, предусматривает определение показателей безопасности продукции животноводства.

Целью исследований стало изучение физико-химических характеристик мяса пекинских уток, которым скармливали кормовую добавку наноразмерного фосфорита.

В научно-производственном опыте в фермерском хозяйстве «Рамаевское» Лаишевского района Республики Татарстан применение добавки способствовало повышению живой массы уток на 7,8-34,6% в сравнении с контрольными. При изучении качества мясного сырья установлено, что величина рН мясного экстракта опытных уток была в пределах нормативных границ для созревшего, свежего мяса и колебалась от $5,8 \pm 0,94$ до $6,2 \pm 0,81$. Пероксидаза в мясе опытных уток была такой же высокоактивной, как и в контрольных образцах. Содержание amino-аммиачного азота колебалось в пределах от 1,02 до 1,09 мг/10мл, при показателях контрольной группы – 1,09мг/10мл, аммиак и соли аммония в мясе опытных и контрольных уток не обнаружены. Количество летучих жирных кислот колебалось от $3,34 \pm 0,54$ до $3,52 \pm 0,24$ мг КОН, что было ниже допустимого уровня и показателя контрольной группы – $3,58 \pm 0,34$ мг КОН. При определении продуктов первичного распада белков получены отрицательные результаты, что также свидетельствовало о доброкачественности мяса уток, в рацион которых была введена кормовая добавка наноразмерного фосфорита.

Таким образом, установлено, что применение наноразмерного фосфорита в кормлении пекинских уток способствовало увеличению их живой массы, мясо по показателям доброкачественности соответствовало требуемым нормам и значительно не отличалось от мяса контрольных уток.

ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ГРИМЕЛИЗИНА В ФИЗИОЛОГИИ *PANTOEA VAGANS*

Гилязева А.Г., Марданова А.М.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
adeliyagilyazeva@gmail.com*

Внутриклеточные протеазы представляют интерес в качестве факторов регуляции различных процессов в бактериальной клетке. Известно, что они играют роль регуляторов подвижности, образования биопленок, формирования SOS-ответа, клеточного деления, цитотоксичности и др. Ранее показано, что гримелизин *S. grimesii* A2 специфически расщепляет глобулярный актин, в результате чего он теряет способность к полимеризации; предполагается также, что фермент играет роль в инвазии. Установлено, что гены, гомологичные гену гримелизина, широко распространены в геномах энтеробактерий, что свидетельствует о его консервативности и важности выполняемых им функций.

В секвенированном геноме почвенного штамма энтеробактерии *Pantoea vagans* (Татарстан) обнаружен ген-гомолог гримелизина со степенью идентичности 584/790(74%) при 77% перекрытии сравниваемых генов. Известно, что бактерии рода *Pantoea* являются клинически значимыми возбудителями оппортунистических инфекций, таких как пневмония, бактериемия, дакриоцистит. Для изучения биохимических свойств протеиназы и его мишеней ген металлопротеиназы был клонирован под индуцибельный промотор в коммерческую плазмиду рЕТ161. Получены клоны, в которых показана экспрессия гена и синтез рекомбинантного белка. Для изучения роли металлопротеиназы в физиологии *P. vagans* его ген был инактивирован с помощью замены его на ген устойчивости к хлорамфениколу по механизму гомологичной рекомбинации. Получены мутанты с инактивированным геном. Планируется исследование фенотипа нокауты.

Таким образом, получен рекомбинантный штамм *E.coli*, экспрессирующий ген металлопротеиназы *Pantoea vagans*, и проведена инактивация гена фермента. Понимание молекулярных основ и идентификация мишеней внутриклеточных протеиназ важно для разработки новых методов терапии инфекционных заболеваний.

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

БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ИОДОСОДЕРЖАЩИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

Горенинский С.И., Станкевич К.С., Филимонов В.Д., Твердохлебов С.И.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
semgor93@gmail.com*

Полимолочная кислота (ПМК) – это один из наиболее часто используемых в медицине биоразлагаемых полимеров [1]. Основными его достоинствами являются доступность, биосовместимость, и биоразлагаемость [2]. Однако существенным недостатком этого полимера является низкая биологическая активность, которую можно объяснить отсутствием реакционноспособных групп на поверхности полимера [3].

Целью данной работы было получение биоматериалов на основе ПМК, содержащих молекулы I₂ в поверхностном слое, с использованием смеси «хороший/плохой растворитель», состав которой (толуол/этанол, 3/7 по объему), был подобран нами ранее. Молекулы I₂, сорбированные на поверхности полимера, придают ему антибактериальные свойства. [4] Было проведено сравнение двух методов адсорбции иода, из спиртового раствора и из паров. Для этого пленки из высокомолекулярной ПМК были обработаны смесью «растворитель/нерастворитель», а затем помещены в 0,001 М раствор спирта при комнатной температуре и в пары иода при 65 °С на 10 минут. Методом УФ показано, что сорбция из паров позволяет вводить большие количества иода.

Таким образом, результатом данной работы является разработка нового материала на основе биоразлагаемого полимера, содержащего на поверхности молекулы I₂. Полученный материал планируется использовать в изготовлении хирургических нитей, обладающих антибактериальным эффектом, а так же для получения имплантов, содержащих изотопы ¹²⁵I, для лечения рака простаты.

Кроме того, исследуется модифицирование ПМК с образованием ковалентной связи между атомами углерода и иода на поверхности методами окислительного иодирования с последующим замещением иода на органические и биомолекулы.

1. J.C. Middleton, A.J. Tipton. *Biomaterials*, 2000, 21, 2335-2346.
2. A.J.R. Lasprilla, G.A.R. Martinez, B.H. Lunelli, A.L. Jardini, R. Maciel Filho. *Biotechnol. Adv.*, 2012, 30, 321–328.
3. L.S. Nair, C.T. Laurencin. *Prog. Polym. Sci.*, 2007, 32, 762–798.
4. J.P. Singhal, A.R. Ray. *Trends in Biomaterials & Artificial Organs*, 2002, 16, 46-51.

ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ АНТИАНГИОГЕННОГО ДЕЙСТВИЯ КРИНГ-ФРАГМЕНТОВ ПЛАЗМИНОГЕНА

Гулин Д.А.^a, Мухаметова Л.И.^b, Айсина Р.Б.^b, Варфоломеев С.Д.^b

^a ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва

^b ГУНУ Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

gulin_dm@rambler.ru

Система плазмин/плазминоген, помимо фибринолиза, вовлекается во множество физиологических процессов таких, как ангиогенез, ремоделирование тканей и межклеточный протеолиз, которые необходимы для роста и метастазирования опухоли. Однако фрагменты тяжелой цепи плазмин(оген)а - ангиостатины - проявляют антиангиогенные свойства, препятствуя развитию опухоли.

Цель работы: Изучение влияния различных фрагментов тяжелой цепи плазмина на активацию нативной Glu-формы плазминогена (Pg) эндогенными активаторами урокиназного (uPA) и тканевого (tPA) типа для выяснения механизма их антиангиогенного действия.

Результаты: Получены ангиостатины с различным содержанием крингл-доменов Pg: K1-3, K1-4 и K1-4.5. Показано, что все ангиостатины не влияют на собственные активности плазмина, tPA и uPA, измеренные по скорости гидролиза их специфических субстратов S-2251, S-2288 и S-2444, соответственно. Обнаружено, что в условиях *in vitro* ангиостатины K1-3, K1-4 и K1-4.5 с разной эффективностью ингибируют активацию плазминогена uPA как в отсутствие, так и в присутствии фибрина, в то время как фибрин-стимулированная активация плазминогена tPA ингибируется только ангиостатинами K1-4 и K1-4.5. Ингибирующий эффект ангиостатинов увеличивался в ряду: K1-3 < K1-4 < K1-4.5. На примере действия K1-4.5 показано, что он не влияет на k_{cat} и увеличивает K_m реакции активации плазминогена uPA, но уменьшает k_{cat} и увеличивает K_m фибрин-стимулированной активации плазминогена tPA. Константы ингибирования K_i активаторных активностей uPA и tPA были 0.59 и 0.12 мкМ, соответственно. Предложен механизм конкурентного (для uPA) и смешанного (для tPA) типов ингибирования активации Pg в присутствии K1-4.5.

Выводы: Ангиостатины способны эффективно ингибировать активацию Pg, вытесняя его из комплексов с фибрином и активаторами плазминогена. Наблюдаемое торможение ангиостатинами генерации активного плазмина из плазминогена может быть одним из механизмов их антиангиогенного действия.

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА С ГИДРОФИЛЬНОЙ И ГИДРОФОБНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Даниленко Н.В., Станкевич К.С., Филимонов В.Д., Твердохлебов С.И.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
nvd1@tpu.ru*

Биоразлагаемые полимеры находят широкое применение в медицине. Поликапролактон (ПКЛ), а так же его композиты используются в зубной имплантации, для регенерации костей, связок, хрящей, кожи, нервов, сосудов зуба [1]. Исследуется возможность применения материалов на основе ПКЛ для создания коронарных и венозных сосудов [2]. Целью нашей работы было получение новых материалов на основе ПКЛ, одна часть поверхности которых обладает гидрофильными свойствами, а другая – гидрофобными. Для достижения поставленной цели поверхность материалов на основе ПКЛ была модифицирована путем обработки смесью растворитель/нерастворитель. Полученный набухший слой полимера способен поглощать модифицирующий агент, в результате чего на поверхности материала формируется активный слой, содержащий вещество-модификант. В качестве модифицирующего агента был выбран биосовместимый Tween80. Показано, что в результате обработки одной из сторон пленки из ПКЛ смесью толуол/этанол=2/8 с последующим нанесением на обработанную сторону раствора Tween80 в гексане увеличивается степень гидрофильности поверхности: краевой угол смачивания водой уменьшается с 75 до 13°, а в течение 10 минут происходит полное смачивание поверхности. Придание гидрофобности поверхности ПКЛ достигнуто за счет модификации с помощью Tween80 и других биосовместимых ионогенных и неионогенных ПАВ через разрушения их коллоидных растворов, а также через формирование положительного заряда поверхности ПЛК физическими методами. Такой подход актуален при создании искусственных сосудов, внутренняя и внешняя поверхность которых должны обладать разной степенью гидрофильности.

1. B.D. Ulery, L.S. Nair, C.T. Laurencin, J. Polym. Sci. Polym. Phys., 2011, 49, 832–864.
2. S. de Valence, J.-C. Tille, D. Mugnai, W. Mrowczynski, R. Gurny, M. Möller, B.H. Walpoth, Biomaterials, 2012, 33, 38 – 47.

БАЦИЛЛЯРНЫЕ ПРОТЕИНАЗЫ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ФАКТОРЫ БОРЬБЫ С АТЕРОСКЛЕРОЗОМ

Данилова Ю.В., Шарипова М.Р.

Институт Фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
Danilova146@mail.ru

Предполагается, что при сердечнососудистых заболеваниях специфическая роль принадлежит активности матриксных металлопротеиназ, а в частности желатиназе-ММП-9. Матриксные металлопротеиназы (ММП) - семейство внеклеточных Zn-зависимых эндопептидаз, способные разрушать все типы белков внеклеточного матрикса. Показано достоверное повышение уровня ММП-9 при атеросклерозе. Согласно существующим представлениям, ММП-9 воздействуют на коллагеновые волокна покрышки атеросклеротической бляшки, приводя к ее размягчению и разрыву, что может привести к тромбозу более дистально расположенных участков сосудистого русла. В работе исследовали активность бациллярных протеиназ по отношению к ММП-9 фибробластов мыши (3T3Valb SV40), мезенхимных клеток (МСК) и клеток Hela-M. Объектами исследования явились протеолитические ферменты *B. pumilus* 3-19, относящиеся к разным классам протеиназ. Из них две сериновые протеиназы, субтилизиноподобная протеиназа и глутамилэндопептидаза, и адамализиноподобная металлоэндопептидаза. Все протеиназы выделяли из культуральной жидкости рекомбинантного штамма *B. subtilis* и получали гомогенные белки. Показано, что глутамилэндопептидаза расщеляла ММП-9 всех клеточных линий. Субтилизиноподобная протеиназа и металлоэндопептидаза *B. pumilus* не активны по отношению к ММП-9. Сделали заключение, что глутамилэндопептидаза *B. pumilus* 3-19 может рассматриваться как фактор снижения уровня ММП-9 и потенциально для борьбы с сердечнососудистыми заболеваниями.

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, а также частично за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект №14-83).

PHARMACOLOGY METHOD IN ANIMAL MODEL OF SCHIZOPHRENIA

Do Thi Dung

*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk
zumilaven@gmail.com*

Models of mental illness in animals are concerned and developed by researchers to further research on pathogenesis, intervention studies that can not be done in humans and studies about drug effects. Pharmacology method build animal model of schizophrenia based on using drugs impacted on neurotransmitter systems such as dopamine, glutamate, serotonin and GABA. According to Anokhina (1975) and Meltzer (1976), there were metabolic disorders of dopamine and dopaminergic system in schizophrenia patients. Meltzer (1980) suggested patients with schizophrenia increased not only concentration of dopamine in the brain, but also the dopamine receptor (DA-receptor) and reduced its affinity for the antagonist, which showed a change of the structure of DA-receptor [1]. Glutamate is the primary excitatory neurotransmitter in the central nervous system. Especially, it is the major neurotransmitter in the hippocampus, where it is involved in mechanisms of memory and emotion. Ketamine is a noncompetitive NMDA receptor antagonist like PCP and MK-801 (Dizocilpine). However, ketamine provides a safer experimental tool than PCP as it has been widely used as an anaesthetic agent with an established record of safety in healthy humans [2]. Ketamine can cause the expression of the mental disorder in healthy people and early psychosis in schizophrenic patients in stable phase, including negative and positive symptoms. It is suggested that dose, pharmacokinetics and environmental manipulations may influence the degree to which ketamine effects seem similar to the positive symptoms of schizophrenia.

1. Scraggs P. R., Ridley R. M. (1979), "The effect of dopamine and noradrenaline blockade on amphetamine-induced behaviour in the Marmoset", *Psychopharmacology*, 62, pp.41-45.
2. Tsapakis E. M., Michael J. Travis (2001), "Glutamate and psychiatric disorders", *Advances in Psychiatric Treatment*, 8, pp.189-197.

LOCOMOTOR ACTIVITY IN MICE INJECTED WITH DIFFERENT DOSES OF KETAMINE

Do Thi Dung

*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk
zumilaven@gmail.com*

The authors of researches on schizophrenia not only study about epidemiology, and clinical expression but also explore deeply about genetics, immunology, neurology, biological molecular mechanisms in order to explain the mechanism of pathogenesis, find out the therapeutic methods and construct animal models of schizophrenia [1]. The research was conducted on 120 healthy male mice with average weight of 30 ± 3 grams. All animals were housed in airy cage in environmentally controlled room, with 12:12 light:dark cycle. Mice were divided into 7 groups, in which 6 groups were injected with ketamine dosed 10, 15, 20, 25, 30, 35 mg/kg/day x 14 consecutive days; group 7 (control) was injected with sodium chloride solution 0.9% (10 ml/kg/day x 14 consecutive days). Study process had 4 steps as follows: *Step 1*: Record video 3 consecutive days before injection. The recording time was 10 minutes for each mouse/day. After that, mice were returned in their home cages and the open field was cleaned with 70 % ethyl alcohol and permitted to dry between tests. *Step 2*: Inject sodium chloride solution for control group and ketamine with dose 10, 15, 20, 25, 30, and 35mg/kg for other 6 groups respectively in 14 consecutive days (intraperitoneal injection method was applied). At the first injected day, record videos of open field test 30 minutes after injection to study acute phase. *Step 3*: Record video 3 consecutive days after injection. *Step 4*: Use Any-maze software to analyze the videos. In acute phase, ketamine injected mice showed increased locomotor activity at the dose of 15 mg/kg and decreased exploring capability at the dose of 25 mg/kg. In chronic phase, mice injected with ketamine showed decreased locomotor activity at doses of 30 and 35 mg/kg and decreased exploring capability at doses of 20, 25, 30 and 35 mg/kg.

1. Arguello P. A., Sander Markx, Joseph A. Gogos, and Maria Karayiorgou (2010), "Development of animal models for schizophrenia", *Dis Model Mech*, 3(1-2), pp.22-26.

МУТАГЕННАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОДУКТОВ ГИДРОЛИЗА РНК БИНАЗОЙ

Ибрагимова Н.Р.

*Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань
ibragimovanelya@gmail.com*

Синтетические олигонуклеотиды, содержащие модифицированные фрагменты, являются одним из важнейших молекулярных инструментов исследования направленного регулирования экспрессии генов и преодоления проблем, связанных с полиморфизмом человеческого генома.

Мутагенные олигонуклеотиды, содержащие «неправильные» нуклеотидные блоки, вводятся в клетку, где они соединяются с ДНК и образуют треплекс-структуру. В результате в некоторых участках нуклеотидных последовательностей появляются «неправильные», т. е. некомплементарные пары оснований, что воспринимается клеточной системой репарации ДНК как повреждение. Нуклеотиды в подобной паре заменяются репаративными ферментами таким образом, чтобы она стала «правильной», комплементарной. При этом замена может происходить как в олигонуклеотидной последовательности, так и в самой клеточной ДНК. Происходит изменение генетической информации, т.е. мутация.

Антисмысловые олигонуклеотиды и интерферирующие РНК работают на стадии синтеза белка, воздействуя на матричные РНК. Антигенные олигонуклеотиды, образующие комплексы с ДНК, подавляют образование самих матричных РНК, а олигонуклеотиды-аптамеры могут, подобно антителам, образовывать связи с определенными белками блокируя их.

Целью работы было оценить мутагенную активность олигонуклеотидов, образуемых рибонуклеазой *Bacillus pumilus* 3-19 из высокополимерной дрожжевой РНК. В ходе исследования был получен препарат олигонуклеотидов из растворов РНК и биназы. Генотоксическое действие олигонуклеотидов оценивали в тесте Эймса с использованием *Salmonella typhimurium* TA 98. Мутагенный эффект определяли по появлению колоний ревертантов ауксотрофного по гистидину тестерного штамма на безгистидиновой синтетической среде в опытных вариантах по сравнению с контрольным.

Несмотря на то, что уже установленные экспериментальные данные [1] указывают на способность коротких олигонуклеотидов вносить в генетические программы точечные мутации, в ходе работы мы установили, что олигонуклеотиды, полученные в реакционной смеси рибонуклеазой *Bacillus pumilus* 3-19 из высокополимерной дрожжевой РНК не проявляют мутагенную активность.

1. S. Gillam, M. Smith, Site-specific mutagenesis using synthetic oligodeoxyribonucleotide primers: II. In vitro selection of mutant DNA, 1979, 8, 99-106.

ИЗМЕНЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО СТАТУСА МИТОХОНДРИЙ ПРИ ДЕЙСТВИИ БИНАЗЫ НА КЛЕТКИ ДРОЖЖЕЙ *YARROWIA LIPOLYTICA*

Игтисамова Г.Р.^a, Черепнев Г.В.^{a,b}, Калачева Н.В.^a

^a Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань

^b ГБОУ ДПО «Казанская государственная медицинская академия»

Минздравсоцразвития России, Казань

7gulzada7@mail.ru

В опубликованной ранее работе [1] нами *in silico* установлено, что в молекуле биназы присутствует гидрофобный сегмент (НФ), термодинамические параметры которого свидетельствуют о том, что он способен к термодинамически выгодному взаимодействию с липидным бислоем и стерически доступен для димеризации мономеров биназы. Предложена модель цитотоксичности рибонуклеаз, в частности, биназы, которая включает механизм выхода рибонуклеаз из эндосом и, предлагающий в качестве внутриклеточной мишени действия биназы внешнюю мембрану митохондрий, увеличение проницаемости которой при действии НФ сегмента служит ключевым фактором в инициации апоптоза клеток, в том числе, опухолевых. В связи с предложенной теоретической моделью представляют интерес экспериментальные исследования влияния биназы на функциональный статус митохондрий различных клеток.

Цель настоящей работы - оценить действие биназы на трансмембранный митохондриальный потенциал клеток дрожжей *Yarrowia lipolytica* методом лазерной проточной цитометрии.

Штамм дрожжей *Yarrowia lipolytica*, получен из коллекции музея кафедры микробиологии Казанского (Приволжского) Федерального Университета. Исследования выполняли с клеточной культурой, находящейся в фазе логарифмического роста.

В работе использовали гомогенный препарат биназы - РНКазы *Bacillus intermedius* (новое название этого вида – *Bacillus pumilus* [2]).

Трансмембранный митохондриальный потенциал измеряли с помощью витального радиометрического катионного флуорохрома JC-1 (Catalog No. 70011, *Biotium, Inc. USA*).

В качестве протонифицирующего разобщителя окислительного фосфорилирования использовали карбоанилицианид-3-хлорфенилгидразон СССР (Catalog No. ab141229, *Abcam, UK*).

В результате проведенных исследований установлено, что инкубация *Yarrowia lipolytica* с биназой через 1 час приводила к снижению доли клеток с активными митохондриями и уровня митохондриального потенциала в них в зависимости от концентрации биназы. При этом часовая инкубация *Yarrowia lipolytica* с биназой (400 мкг/мл) не влияла на жизнеспособность клеток в тесте с метиленовым синим, однако приводила к снижению числа колониеобразующих единиц (КОЕ) на 30% по сравнению с контролем.

Цитостатический эффект бактериальной биназы в отношении дрожжей *Yarrowia lipolytica* может быть проявлением биомеханизмов, обеспечивающих видовые конкурентные преимущества в общих экологических нишах.

1. F.V. Shirshikov, G.V. Cherepnev, O.N. Ilinskaya, N.V. Kalacheva. A hydrophobic segment of some cytotoxic ribonucleases // *Medical Hypotheses*, 2013, 81, 328-334.

2. М.Р. Шарипова, А.А. Тойменцева, А.Р. Сабирова. Новое филогенетическое положение штамма *Bacillus intermedius* 3-19 // *Микробиология*, 2011, 80(3), 424-6.

АНТАГОНИСТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ *PANTOEA VAGANS* 3.2

Илюхина Д.Л., Сулейманова А.

Институт Фундаментальной Медицины и Биологии, КФУ, Казань
Laia9301@mail.ru;

Учеными ведется постоянный поиск новых антимикробных агентов, способных подавлять рост фитопатогенных грибов и бактерий, широкое распространение которых является экономической проблемой влияющей на развитие сельского хозяйства.

В связи с этим, цель нашей работы: установить антибактериальные и фунгицидные свойства штамма *Pantoea vagans* 3.2.

В ходе работы методом перекрестного посева [1] установили, что *P. vagans* 3.2 обладает антибактериальными свойствами по отношению к энтеробактериям: *S. enterica*, *E. coli* Dh5a, *M. morgani*, *S. marcescens* Sm6, *S. grimesia*. По отношению к грамположительным бактериям *Bacillus pumilus* 3-19 и представителям идентичного рода (*P. ananatis* Cl-18, *P. agglomerans* U2-22) антибактериального действия штаммом *P. vagans* 3.2 не выявлено.

Установлено, что минимальная ингибирующая концентрация (МИК) культуральной жидкости *P. vagans* 3.2 для подавления роста *E.coli* составила 10^{-5} , для подавления роста *S. marcescens* - 10^{-7} . МИК клеточного экстракта с концентрацией белка равной 1400мкг/мл для подавления роста *E.coli* и *S. marcescens* равна 10^{-9} и 10^{-8} , соответственно. Ингибирующая концентрация контрольного антибиотика (ампициллина) составила 10^{-5} для *E.coli* и 10^{-7} для *S. marcescens*.

В ходе работы установлена фунгицидная активность штамма *P. vagans* 3.2. В качестве тестового объекта изучали 5 изолятов микромицетов рода *Fusarium*, и по одному представителю родов *Bipolyaris* и *Alternaria*, выделенных из пораженных корней листьев салата и петрушки. Луночным методом [2] установлено, что *P. vagans* обладает способностью к ингибированию роста всех изучаемых микромицетов по сравнению с контролем. Максимальный ингибирующий эффект обнаружен по отношению к штамму *Fusarium* sp. 1.1 – рост микромицета ингибировался на 87%. Минимальная способность к ингибированию роста гриба наблюдалась по отношению к роду *Bipolyaris* – 33%. На агаризованной среде Чапека установлено, что микромицеты изменяли морфологию колоний по сравнению с контролем – наблюдается инвагинации мицелия в местах контакта с бактерией.

Таким образом, установлено, что штамм *P. vagans* 3.2 в процессе роста диффундировал в питательную среду соединения, оказывающие фунгицидное действие по отношению к микромицетам родов *Fusarium*, *Alternaria* и *Bipolyaris*. Наличие фунгицидной и антибактериальной активности штамма *P.vagans* 3.2 может служить основой для создания инновационных микробных агробiotехнологий для решения проблем, связанных с заболеваниями растений, вызванных представителями рода *Fusarium*, *Alternaria* и *Bipolyaris* а также энтеробактериями.

1. Toth E.M. Practical Microbiology Mikrobiologiai Laboratoriumi Gyakorlatok / Pheno- and genotypic characterisation of bacterial strains. – 2013. – V.7.4.
2. Petatan-Sagahon I. Isolation of Bacteria with Antifungal Activity against the Phytopathogenic Fungi *Stenocarpella maydis* and *Stenocarpella macrospore* // Int J Mol Sci. 2011-PMC3189730.

ВЛИЯНИЕ НОВОЙ МИКРОБНОЙ ПРОТЕИНАЗЫ НА ОСНОВНЫЕ БЕЛКОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЯСНОГО СЫРЬЯ

Каримов А.З.^a, Пономарев В.Я.^a, Юнусов Э.Ш.^a, Шарипова М.Р.^b

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^b Казанский федеральный университет, Казань

v.y.ponomarev@gmail.com

За последние годы значительно расширились знания о свойствах и механизме действия протеолитических ферментов. Наибольший интерес представляют ферменты микроорганизмов, в частности, среди прокариот наиболее удобными объектами для изучения и промышленного использования являются представители рода *Bacillus*. Сотрудниками Казанского (Приволжского) федерального университета выделена протеиназа, секретлируемая бациллами. По характеру гидролиза специфических хромогенных субстратов и типу ингибирования фермент относится к субтилизиноподобным сериновым протеиназам.

Представлялось интересным изучить этот фермент и оценить возможность его применения в технологии мясных продуктов. Наряду с этим изучение данного препарата пополнит сведения о протеазах, в частности, о сериновых протеиназах, отдельные представители которых изучены еще недостаточно. В процессе проведения эксперимента изучали влияние ферментативной обработки на степень гидролиза белков, процессы убыли субстрата и накопления высоко и низкомолекулярных продуктов (поли-, олигопептиды, аминокислоты). Анализ вели используя белковые фракции водорастворимых (представители: миоглобин, оксимиоглобин, миоальбумин, кельмодулин и др.) и солерастворимых белков мяса (представители: миозин, актин, актомиозин, тропонин, тропомиозин и др.). Оценку вели при методами спектрометрии оценивая состояние основных хромофоров мясного сырья.

Внесение протеиназы привело к снижению интенсивности спектров поглощения всех рассматриваемых белковых фракций. Наблюдалось уменьшение полосы Сорс характеризующей наличие в системе соединений мио- и гемоглобина, снижался общий белковый фон, наблюдаемый при длинах волн 200-300 нм, характерных для соединений имеющих в своем составе пептидную группу, происходил гидролиз оксиглобина. Было установлено накопление в системе свободных аминокислот регистрируемых в диапазоне длин волн 210-280 нм во всех исследуемых фракциях. Следует отметить, что наиболее интенсивно процесс накопления аминокислот протекал в солерастворимых белковых фракциях.

КЛАССИФИКАЦИЯ ПОРАЖЕНИЙ АКСОНАЛЬНЫХ ТРАКТОВ ПРИ ИШЕМИИ ГОЛОВНОГО МОЗГА

Коноплева Л.В.^a, Недопекин О.В.^a, Давлетшина А.Р.^a, Низамова Д.М.^b, Ильясов К.А.^a

^a *Институт Физики КФУ, Казань*

^b *Республиканская Клиническая Больница, Казань*

lidia.konopleva@gmail.com

Параметры диффузии молекул воды, измеряемые *in vivo* методами магнитно-резонансной томографии по диффузии (Д-МРТ) позволяют обнаруживать на ранней стадии ишемическое повреждение клеток мозга, и, в сочетании с аксональной трактографией на базе Д-МРТ, судить о нарушении структурных связей в головном мозге [1].

Как было показано на модельных расчетах, коэффициент вероятности прохождения тракта и параметр энтропии по заданной траектории [2] позволяют обнаружить участки, где трактография вдоль выбранного пути прерывается ввиду либо пересечения трактов, либо при повреждении тканей белого вещества, например, при ишемии. В данной работе этот метод [2] применен для анализа данных Д-МРТ на 8 пациентах с инсультом головного мозга, МРТ измерения были проведены по стандартному протоколу на клиническом 1.5 Т МРТ сканере с последующей обработкой данных Д-МРТ программой „DTI and Fiber Tools“ [1].

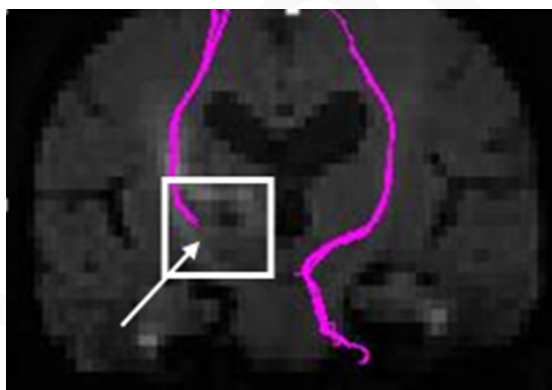


Рисунок. 1 – СЛЕВА – волокна кортикоспинального тракта, проходящие через область поражения, СПРАВА – аналогичный тракт в здоровом полушарии. Стрелкой выделена гипер-интенсивная область, соответствующая зоне инсульта. В зоне инсульта среднее значение энтропии вдоль показанного тракта 3,41; обрыв трактов при $\geq 3,91$, а 2,75 - в здоровом полушарии на симметричном участке тракта.

Нами было установлено, что в зоне инсульта параметры энтропии и коэффициента вероятности увеличивались, что совпадало с невозможностью детектировать прохождение аксональных трактов через данную область. На рис. 1 виден обрыв тракта в зоне поражения, вблизи точки обрыва происходит скачок энтропии, тогда как с другой стороны аналогичные тракты хорошо детектируются. Таким образом, параметры энтропии в зоне инсульта головного мозга хорошо характеризовали повреждения аксональных трактов и полученные результаты были в согласии с ранее полученными данными на численных фантомах [2].

1. Ильясов К.А., дис. д-ра ф-м наук, КФУ, Казань, 2011.
2. Ильясов К.А., Недопекин О.В., Коноплева Л.В., Давлетшина А.Р., Низамова Д.М., тезисы «MR-70», 34, Казань, 2014.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННОГО БИОКАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ ФИЦИНА, ИММОБИЛИЗОВАННОГО НА МАТРИЦЕ ХИТОЗАНА

Холявка М.Г., Королева В.А., Тимошилова А.А., Артюхов В.Г.

*Воронежский государственный университет, Воронеж
e-mail: holyavka@rambler.ru, koroleva_victoria@bk.ru*

Хитозаны являются сополимерами 2-амино-2-дезоксид-β-D-глюкозамина и 2-ацетиламино-2-дезоксид-β-D-глюкозамина. Функциональные свойства этих катионных полиэлектролитов зависят от молекулярной массы, полидисперсности, степени деацетилирования (СД) и микроструктуры (распределения сомономеров по длине цепи). Производные хитозанов характеризуются нетоксичностью, биоразлагаемостью, биосовместимостью и слабой иммуногенностью.

Цель исследования состояла в разработке методики получения гетерогенного биокатализатора на основе фицина, иммобилизованного на матрице хитозана.

В качестве объекта исследования был выбран фицин, субстратом для гидролиза служил бычий сывороточный альбумин (БСА), носителем для иммобилизации – кислоторастворимый высокомолекулярный хитозан ($M_n=350$ кДа, СД=95%). Для сорбции фицина на матрице хитозана мы использовали следующие буферные системы: 0,05 М глициновый, 0,05 М трис-глициновый, 0,2 М ацетатный, 0,1 М фосфатный, 0,1 М цитратный, 0,05 М КСl-буфер, 0,1 М карбонатный и 0,05 М трис-НСl буфер.

Анализ содержания белка в гетерогенных препаратах показал, что наибольшее количество фицина (в мг на г носителя) сорбируется на кислоторастворимом высокомолекулярном хитозане при использовании фосфатного буфера с рН 8,0, трис-глицинового буфера с рН 8,3, КСl-буфера с рН 9,0 и глицинового буфера в диапазоне рН 8,6-10,5. Общая активность (в ед на мл раствора) гетерогенных препаратов оказалась выше при использовании следующих буферов: глициновый 8,6 и трис-глициновый 7,5-8,3.

Максимальную удельную активность (порядка 70 % активности свободного фицина) показал препарат, иммобилизованный при рН 8,6 в глициновом буфере; таким образом, мы считаем, что этот буфер при данном значении рН наиболее перспективен для адсорбции фицина на матрице кислоторастворимого высокомолекулярного хитозана.

ФОТОАКТИВНЫЕ ФТОРИДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ КАК ИНДУКТОРЫ ТОКСИЧЕСКИХ И ГЕНОТОКСИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ У КЛЕТОК ПРОКАРИОТ

Крашенинникова А.О., Зеленихин П.В.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
alina_krash.mail@bk.ru*

Фторидные наноразмерные частицы обладают уникальными химическими и физическими свойствами, благодаря которым их применяют в промышленности и в медицине, в частности, при лечении онкологических заболеваний. Целью настоящей работы являлась характеристика фотоактивных фторидных наночастиц как индукторов токсических и генотоксических эффектов у клеток прокариот.

В работе использовали образцы фотоактивных фторидных наночастиц (ФФН) PrF_3 и LaF_3 , синтезированные в НИЛ «Функциональные программируемые материалы фотоники для биомедицинских и инфокоммуникационных применений» со средним диаметром 30 нм. Данные фотоактивные наночастицы способны интенсивно поглощать энергию светового излучения в диапазоне 450-550 нм. Проводили оценку токсического и генотоксического действия ФФН в отношении *Salmonella typhimurium* TA 98 под действием лазерного излучения с длинами волн 532 нм и 473 нм и без облучения.

Установлено, что наиболее выраженным биологическим действием, проявляющимся в бактерицидной активности обладают ФФН PrF_3 и LaF_3 при облучении рассеянным пучком лазерного излучения с длиной волны 532 нм. При таком варианте обработки выживаемость тестерного штамма составила 28% и 35% для PrF_3 и LaF_3 , соответственно. Бактерицидная активность наночастиц зависит от времени обработки и длины волны лазерного излучения. Выживаемость тестерного штамма составила 39%, 34%, 28% для времени облучения лазером с длиной волны 532 нм 5 мин, 15 мин и 30 мин, соответственно, при использовании наночастиц PrF_3 , в то время как при облучении когерентным светом с длиной волны 473 нм ФФН не обладали значимой бактерицидной активностью. Облучаемые наночастицы оказывают мутагенное воздействие на живые клетки. Обработка клеток *S. Typhimurium* TA98 наночастицами PrF_3 при облучении лазером с длиной волны 532 нм приводила к превышению числа ревертантов в тесте Эймса над контролем в 1,5, 2,3, 2,6 раз для времени облучения 5 мин, 15 мин и 30 мин, соответственно. Наночастицы LaF_3 при всех использованных вариантах обработки не обладали достоверным мутагенным действием.

ПОВЫШЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ И СНИЖЕНИЕ ПОБОЧНЫХ ЭФФЕКТОВ СТРЕПТОКИНАЗЫ КОНЬЮГАЦИЕЙ ЕЕ С ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕМ

Кузнецова Н.В.^a, Гулин Д.А.^b, Айсина Р.Б.^a, Мухаметова Л.И.^a, Гершкович К.Б.^b, Иванова Е.М.^a,
Варфоломеев С.Д.^{a,b}

^a ГУНУ Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

^b ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва
liliya106@mail.ru

Стрептокиназа (СК) является наиболее доступным, эффективным и хорошо изученным в клинической практике тромболитическим агентом. Введение высоких терапевтических доз СК, обусловленное быстрым ее клиренсом, сопровождается истощением уровней фибриногена и плазминогена в плазме крови, а также образованием антител к ней.

Цель работы: Повышение стабильности в плазме и снижение побочных эффектов СК ковалентной модификацией ее молекулы полиэтиленгликолем (ПЕГ).

Результаты: СК была модифицирована по аминокетам низкомолекулярными метокси-ПЕГ (2 и 5 кДа, ПЭГ2 и ПЭГ5). Коньюгаты СК-ПЭГ2 и СК-ПЭГ5, сохраняющие в плазме до 80% исходной активности СК, образуются уже через 2 ч реакции при степени модификации аминокетам белка 54 и 52% соответственно. Контрольные эксперименты показали, что при увеличении времени реакции до 3 и 4 ч стабильность коньюгатов не увеличивается, а их активность снижается.

По сравнению со свободной СК коньюгаты СК-ПЭГ2 и СК-ПЭГ5 сохраняют значительную часть тромболитической активности СК (89 и 72% соответственно) и вызывают значительно меньшее истощение плазминогена (в 3.8 и 4.3 раза соответственно) и фибриногена (в 3.5 и 3.75 раза соответственно) в плазме крови. Важно также, что данные коньюгаты более стабильны в плазме (в 2–2.4 раза), чем свободная СК, что способствует значительному пролонгированию их тромболитического действия.

Выводы: Получены ковалентные коньюгаты СК-ПЭГ2 и СК-ПЭГ5, которые обладают высокой тромболитической активностью, сниженными побочными эффектами и повышенной стабильностью в плазме крови человека, по сравнению со свободной СК.

LEUKEMIA TREATMENT USING ALTERED HIV CELLS

Le Van Tuan

*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk
visaosang89@gmail.com*

The link between leukemia and HIV goes back to 2006, when Timothy Brown, an HIV-positive patient was diagnosed with acute myeloid leukemia. During the course of his treatment, he eventually had a bone marrow transplant from a donor with a rare genetic mutation. The transplant not only treated Brown's leukemia but had also eliminated the HIV from his system, the doctors treating him announced in a study published in the New England Journal of Medicine. Brown, who became known as the Berlin Patient, became the first man to ever be fully cured of HIV[1]. In 2012, in experimental therapy called Immunotherapy T cells, the experts extract billions of T cells (a type of white blood cells from the patient's body) and combines them with HIV virus was "pure goods ". The hazard characteristics of HIV are eliminated but remained their most important characteristic, which is the ability to insert new genes into immune cells. This modification or reprogramming allows them to potentially target and kill their own malignant cells. The modified cells now called CTL019 cells are then grown in the laboratory and re-infused into the patient. When the patient's own T-cells recognize and bind to the malignant cell, they have the ability to become activated and kill it, according to the Abramson Cancer Center. After the completion of the task, the cells CTL019 will "hibernation" in the body, in case the cancer back. It is a revolution in research that focused on using the immune system to kill cancer cells.

The T-cell treatment is a "breakthrough therapy" for relapsed and treatment-resistant acute lymphoblastic leukemia in adults and children. The designation recognizes experimental drugs "that may demonstrate substantial improvement over existing therapies" for life-threatening conditions, and is meant to speed their development and review

1. RT [Electronic resource]. – Access mode: <http://rt.com/usa/204587-jensen-whitehead-hiv-leukemia-remission/>

ПОИСК БАКТЕРИЙ С АНТАГОНИСТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Лутфуллин М.Т., Мочалова Н.К., Марданова А.М.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
lutfullin.marat2012@yandex.ru

Использование биопрепаратов для контроля фитопатогенов сельскохозяйственных культур является эффективной альтернативой применению пестицидов, накапливающихся в растениях и вредных для полезной флоры почвы [1]. Развитие современных экологических методов основано на поиске и создании эффективных биологических препаратов на основе микробных штаммов.

Целью работы является выделение и характеристика бактерий с антагонистической активностью из почвы сельскохозяйственных угодий РТ. Бактерии-антагонисты выделяли методом «скученного посева» из почв после выращивания картофеля (1), пшеницы (2), гороха (3) и почвы из под пара (4). Для выделения бактерий использовали среду МПА, на которую высевали суспензию почв в разведении 1:10 и 1:100. Отбирали колонии бактерий, проявляющих антагонистическую активность. Бактерии идентифицировали на MALDI Biotyper (Bruker Daltonik). Антагонистическую активность исследовали методом перпендикулярных штрихов и блоков.

Были отобраны колонии вокруг которых наблюдали зону подавления роста почвенных бактерий. В результате посева на среде МПА были выделены три изолята в виде чистой культуры, которые идентифицировали как *Bacillus weihenstephanensis* (почва 1), *Acinetobacter calcoaceticus* и *Lysinibacillus fusiformis* (почва 2). Исследовали антагонистическую активность выделенных бактерий по отношению к разным видам бактерий. *B. weihenstephanensis* проявил высокую способность к ингибированию роста *Xanthomonas campestris*, *Pectobacterium atrosepticum*, *Lysinibacillus sphaericus*, также умеренно подавлял рост *Citrobacter freundii* и *Enterobacter cloacae*. Бактерии *A. calcoaceticus* подавляли рост *P. atrosepticum* и *L. sphaericus*. *L. fusiformis* активен в отношении *X. campestris* и *P. atrosepticum*. Выделенные бактерии проявляют антагонистическую активность в отношении микромицетов *p.Fusarium*.

Таким образом, выделенные из почвы бактериальные штаммы имеют потенциал использования в качестве препаратов для подавления роста фитопатогенов.

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

1. I. Petatán-Sagahón, M. Angel Anducho-Reyes. Int. J. Mol. Sci. 2011, 12, 5522-5537.

ПЕРСОНИФИЦИРОВАННЫЙ ПОДБОР ПРЕПАРАТОВ ПРИ ЛЕЧЕНИИ АРТЕРИАЛЬНОЙ ГИПЕРТЕНЗИИ

Маркелов О.А.

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург
OlegMarkelov@gmail.com*

Рядом исследователей было показано [1, 2], что для врачей-клиницистов важным вопросом является определение суточного профиля физиологического ритма, в частности артериального давления (АД). Выделение суточной типичной динамики АД позволит учитывать ее при назначении терапии, а также открывает возможности моделирования изменения физиологического процесса при воздействии лекарственных препаратов: по известным данным о препарате возможно составление типичного профиля воздействия. Типичный суточный профиль определяется путем полиномиальной аппроксимации плексограммы, полученной из многосуточной мониторограммы физиологических параметров сердечно-сосудистой системы, в частности АД.

Для решения задачи оптимизация профиля предложен следующий подход: моделирование фармакологической коррекции суточного профиля АД, которая базируется на фармакокинетических свойствах препаратов. В амбулаторных условиях наиболее удобны для применения пероральные препараты, метаболизм которых, в организме человека описывается двухкомпонентной фармакокинетической моделью [3], задаваемой однородным дифференциальным уравнением, решением которого является $C_{II} = \frac{FK_a}{V(K_a - K_b)} [e^{-K_b t} - e^{-K_a t}]$, где C_{II} – текущая концентрация

препарата в плазме крови; V – объём плазмы крови; K_a, K_b – коэффициенты абсорбции и выведения препарата соответственно; коэффициент F определяется дозировкой препарата и его биодоступностью.

Применение данной модели коррекции профиля АД позволяет реализовать выбор не только типов препаратов (определяет модель воздействия) и их дозировки, но и времени приёма (определяет момент начала действия и время активности), тем самым позволяя клиницисту видеть результат воздействия медикаментов на конкретный индивидуальный профиль АД, и оптимизировать его с учетом действующих рекомендаций.

1. Physiological significance of a peripheral tissue circadian clock / Katja A. Lamia, Kai-Florian Storch, and Charles J. Weitz // PNAS vol. 105 no. 39, pp. 15172–15177.
2. Freerunning and Entrained Circadian Rhythms / Jürgen Aschoff // Biological rhythms, Springer, 1981, pp 81-93.
3. David Bourne. A First Course in Pharmacokinetics and Biopharmaceutics [Электронный ресурс] / Режим доступа <http://www.boomer.org/c/p1/index.html>.

БИОЛОГИЧЕСКАЯ ОЧИСТКА ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОКОВ И ПРИРОДНЫХ СРЕД ОТ БЕЛОГО ФОСФОРА

Миндубаев А.З.^a, Алимова Ф.К.^b, Болормаа Ч.^b, Волошина А.Д.^a, Горбачук Е.В.^b, Миронова Л.Г.^a, Яхваров Д.Г.^a

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН

^b ИФМИБ КФУ, Казань

mindubaev@iopc.ru

Белый фосфор Р₄ является одним из самых опасных загрязнителей окружающей среды. Целью настоящего исследования являлась переработка белого фосфора при помощи микроорганизмов. Использовали смесь уплотненного и обезвоженного осадка сточных вод (ОСВ) МУП Водоканал г. Казани [1, 2]. При содержании Р₄ в субстрате 0.1% по массе, наблюдалось значительное угнетение жизнедеятельности микрофлоры. Тем не менее, даже при такой концентрации токсичного вещества не наблюдалась полная гибель микроорганизмов. При содержании Р₄ в иле 0.01% по массе, наблюдалось значительное угнетение в течение приблизительно 2–3 недель, причем происходило оно не вначале эксперимента, а спустя приблизительно месяц. Из ОСВ с концентрацией Р₄ 0.01% (масс) первая проба для ³¹P ЯМР анализа была взята на 35 день. Спектры продемонстрировали наличие белого фосфора. Вторая проба была отобрана на 63 день. Спектр показал отсутствие сигнала. Таким образом, срок продолжительностью 63 суток оказался достаточным для переработки белого фосфора в концентрации 0.01%. Анализ показал, что концентрация белого фосфора в субстратах обратно пропорциональна активности микробного метаболизма в них. В спектре ³¹P ЯМР проявились сигналы соответствующие фосфиту и гипофосфиту - соединениям, которые, предположительно, являются метаболитами белого фосфора.

На поверхности субстратов с добавлением 0.01% Р₄ наблюдался рост колоний микроорганизмов. Выделенные микроорганизмы идентифицировали как представителей рода *Streptomyces*. Микроорганизмы, устойчивые к 0.1% Р₄ были идентифицированы как *Bacillus*.

Устойчивые бациллы растут очень интенсивно на среде, содержащей фосфат. В среде без источников фосфора признаки жизнедеятельности вообще не наблюдаются. Самый интересный результат демонстрирует среда с Р₄. В ней присутствуют отдельные мелкие колонии. Рост на культуральных средах с белым фосфором наблюдался нами впервые.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 14-08-31091 мол_a).

1. А.З. Миндубаев, Ф.К. Алимова, С.К. Ахосийенагбе, Ч. Болормаа, А.Д. Волошина, Е.В. Горбачук, Н.В. Кулик, С.Т. Минзанова, Л.Г. Миронова, А.В. Панкова, Д.Г. Яхваров. Журнал экологии и промышленной безопасности, 2014, (1-2), 68-72.

2. А.З. Миндубаев, А.Д. Волошина, Е.В. Горбачук, Н.В. Кулик, Ф.К. Алимова, С.К. Ахосийенагбе, С.Т. Минзанова, Л.Г. Миронова, А.В. Панкова, Ч. Болормаа, К.А. Сапармырадов, Д.Г. Яхваров. Бултеровские сообщения, 2014, 39, (8). В печати.

ИЗУЧЕНИЕ ЭКСПРЕССИИ ГЕНА МЕТАЛЛОПРОТЕАЗЫ *MORGANELLA MORGANII* ZM

Миннуллина Л.Ф., Замалютдинова Н.М., Марданова А.М.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
masaco@mail.ru

Бактериальные металлопротеазы привлекают внимание исследователей тем, что играют важную роль в вирулентности патогенных микроорганизмов. Эти ферменты синтезируются большинством бактерий семейства *Enterobacteriaceae*, к которому относится и *Morganella morganii* - возбудитель комплексных инфекций мочевыводящих путей, катетер-ассоциированной бактериурии, раневых инфекций и сепсиса [1].

Ранее нами в геноме клинического изолята *M. morganii* ZM был идентифицирован ген гипотетической металлопротеазы длиной в 1101 н.п., секвенированная последовательность которого обладала 83% гомологией с геном аннотированного штамма *M. morganii* KT [2]. Ген *M. morganii* ZM клонировали в экспрессионные векторы pBAD/Мус-His и pET161 под контроль арабинозного и T7lac-промоторов соответственно. Секвенирование плазмидной ДНК, выделенной из трансформированных рекомбинантными плазмидами клеток *E. coli* DH5 α pBAD/Мус-His и *E. coli* BL21 pLysS pET161, показало, что во всех исследованных клонах вставка гена металлопротеазы прошла корректно. Методом вестерн-блоттинга в лизатах рекомбинантных клеток был выявлен продукт массой ≈ 35 кДа, количество которого нарастало с увеличением времени индукции и концентрации индуктора. Данная полоса обнаруживалась также на электрофореграмме клеточных лизатов. Размер продукта близок к рассчитанной молекулярной массе гипотетического белка (41 кДа), что позволяет предположить, что данная полоса принадлежит процессированной форме клонируемой протеазы, которая сверхэкспрессируется при данных условиях культивирования.

Работа поддержана грантом РФФИ-рег № 13-04-97130.

1. Y.T. Chen, H.L. Peng, W.C. Shia, F.R. Hsu, C.F. Ken, Y.M. Tsao, C.H. Chen, C.E. Liu, M.F. Hsieh, H.C. Chen, C.Y. Tang, T.H. Ku. BMC Genomics, 2012, 13, 13 (Suppl 7): S4.
2. Л.Ф. Миннуллина, Н.М. Замалютдинова, Е.О. Михайлова, М.Р. Шарипова, А.М. Марданова. Вестник Казанского технологического университета, 2013, 16, 143-146.

АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ БАКТЕРИАЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОИЗВОДСТВЕ МЯСНЫХ ПРОДУКТОВ

Мирошник Н.Б., Карамова Н.С.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
tashaa777@mail.ru*

Свободные радикалы, образующиеся при неблагоприятных воздействиях, способствуют развитию различных патологий и преждевременному старению организма. В связи с этим, в настоящее время ведется активный поиск природных антиоксидантов (АО) с целью использования их в профилактике и терапии многих заболеваний.

Целью данной работы явилось исследование антирадикальной активности промышленных бактериальных заквасок и медицинского препарата «Лактобактерин».

Объектом исследования служили промышленные бактериальные закваски CHR Hansen «Safe Pro B-LC-20» (состав: *Pediococcus acidilactici*); CHR «Bactoferm F-SC-111» (состав: *Staphylococcus carnosus*, *Lactobacillus curvatus* H JS); SC Haller «Старт Стар» (состав: *Lactobacillus curvatus*, *Pediococcus pentosaceus*, *Staphylococcus carnosus*); Danisco «Texel DCM-1» (состав: *Staphylococcus carnosus* и *Staphylococcus xylosus*) и медицинский препарат Лактобактерин (состав: *Lactobacillus plantarum* 8P-A3, *Lactobacillus fermentum* 90T-C4). Антирадикальную активность определяли по методу Главинда [Glavind, 1963] по ингибированию радикалов 1,1-дифенил-2-пикрилгидразида (ДФПГ). Были исследованы культуральная жидкость, интактные клетки в фосфатном буфере и супернатант лизата клеток.

В результате исследования было установлено, что молочнокислые бактерии, входящие в состав промышленных заквасок и медицинского препарата «Лактобактерин», обладают антирадикальной активностью, что проявляется в ингибировании свободных радикалов ДФПГ.

Культуральная жидкость препаратов ингибируют свободные радикалы ДФПГ на 90% - 92% у 6-часовых культур, и на 78% - 86% у 24-часовых культур. Интактные клетки препаратов ингибируют свободные радикалы ДФПГ на 17% - 21% у 6-часовых культур и на 14% - 24% у 24-часовых культур. Супернатант лизата клеток 6-часовых культур проявляет слабовыраженные антирадикальные свойства и лишь незначительно снижает оптическую плотность ДФПГ. Антирадикальная активность супернатанта лизата клеток 24-часовых культур составляет 32% - 38%.

Таким образом, антирадикальная активность исследованных бактериальных препаратов зависит от возраста культуры. Культуральная жидкость всех исследованных препаратов проявляет наивысшую антирадикальную активность в экспоненциальную фазу роста, а супернатант лизата клеток - в стационарную фазу роста бактериальных культур.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ РЕГУЛЯТОРНОЙ ОБЛАСТИ ГЕНОВ ПРОТЕИНАЗ *BACILLUS PUMILUS*

Митрофанова О.С., Тойменцева А.А., Шарипова М.Р.

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань
mitrofaolga@gmail.com

В современной медицине применение бактерий рода *Bacillus* является перспективным направлением для конструирования и совершенствования лекарственных препаратов, имеющих ферментативную природу. В частности, протеиназы бацилл применяют в медицинской промышленности (как самостоятельные лекарственные препараты для терапии различных заболеваний органов пищеварения, глаз, сердечнососудистой системы, гнойно-хирургической патологии, онкологических заболеваний), при производстве питательных сред и органопрепаратов. Практическая ценность протеиназ указывает на необходимость получения высокоэффективных продуцентов этих ферментов.

Штамм бактерий *B. pumilus* 3-19 известен как продуцент широкого разнообразия протеолитических ферментов. Существуют разные способы повышения продуктивности бактериальных культур. Одним из подходов является направленное изменение экспрессии гена (например, генная мутация). Кроме того, в зависимости от структуры промотора и его длины, экспрессия гена также может значительно отличаться. Объектом настоящего исследования являются протеолитические ферменты – субтилизиноподобная протеиназа (*AprVp*) и глутамилэндопептидаза (*GseVp*) *B. pumilus* 3-19. Для определения длины и анализа активности промоторов генов протеиназ использовали векторы *pAC6* и *pGFPamyE*, содержащие репортерные гены *lacZ* и *gfp*, соответственно. Тестировали потенциальные промоторные области гена *aprVp* длиной 360, 300, 270, 240, 200, 150, 100 и 50 п.о. и промоторные области гена *gseVp* длиной 200, 150, 100 и 50 п.о. В выбранные вектора (*pAC6* и *pGFPamyE*) клонировали указанные последовательности промоторов так, что они контролировали активность репортерных генов. Репортерные конструкции секвенировали и трансформировали в клетки *B. subtilis* 168. Предварительные данные на основе активности фермента бета-галактозидазы и зеленого флуоресцентного белка показали, что для экспрессии исследуемых генов промотор *PaprVp* должен составлять не менее 300 п.о., а промотор *PgseVp* – 150 п.о. Замечено, что такая длина регуляторной области приводит к наибольшей активности репортерных белков. Количественное определение экспрессии будет проведено методом выделения тотальной РНК из рекомбинантных клеток, дальнейшего получения кДНК и постановки ПЦР в реальном времени. Полученные результаты позволят сделать вывод о зависимости экспрессии изучаемых генов от длины их регуляторной области, а также будут использованы при создании штамма с повышенной продуктивностью протеиназ.

ВЛИЯНИЕ RAB 5 НА ЛОКАЛИЗАЦИЮ НУКЛЕОКАПСИДНОГО БЕЛКА ХАНТАВИРУСОВ В РАННИХ ЭНДОСОМАХ *IN VITRO*

Муйангва М., Ризванов А.А., Хайбуллина С.Ф.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
musalwam@yahoo.co.uk*

Вирус Хантаан относится к семейству хантавирусов. Вирусы этого семейства являются возбудителями геморрагической лихорадки с почечным синдромом у человека. Белок Rab 5, относящийся к белкам Rab ГТФазам, играет важную роль в эндоцитозе. Вирусы при инфицировании используют существующие клеточные системы для завершения своего жизненного цикла. Цель данного исследования: определение влияния Rab 5 в ранних эндосомах на внутриклеточную локализацию нуклеокапсидного белка хантавирусов *in vitro*.

Лентивирусы были получены в культуре клеток НЕК293Т с помощью протокола Tronolab. Исследование на внутриклеточную локализацию нуклеокапсидного белка хантавирусов *in vitro* при мутантной доминантно-негативной формы белка Rab 5 и при дикого типа белка Rab 5 проводились на культуре клеток эпителиальной опухолевой линий А549 [1]. Для визуализации нуклеокапсидного белка хантавируса применяли поликлональные антитела кролика к вирусу Андес, обладающие кроссреактивностью с вирусом Хантаан, и вторичные флуоресцентно меченные (Alexa flour 488) антитела осла к иммуноглобулинам кролика. Флуоресцентный анализ был выполнен в лаборатории лазерной и конфокальной микроскопии МДЦ АМ КФУ на приборе LSM 780 (Carl Zeiss). Директор Осин Ю.Н. оператор Кузнецова С.В.

Уровень флуоресценции нуклеокапсидного белка хантавируса был значительно больше в культуре клеток, экспрессирующих белок дикого типа Rab 5. Мутантная доминантно-негативная форма белка приводит к блокированию процессов эндоцитоза на стадии ранних эндосом. Таким образом, можно сделать вывод, что Rab 5 возможно участвует в транспорте и локализации нуклеокапсидного белка хантавирусов в ранних эндосомах.

1. D.K. Sharma, A Choudhury, et al. J Biol Chem, 2003, 278 (9), 7564-72.

БИНАЗА СНИЖАЕТ МЕМБРАННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ МИТОХОНДРИЙ РАКОВЫХ КЛЕТОК

Муртазина Р.Р., Закирова Я.Н., Зеленихин П.В.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
murtazinarr@gmail.com*

Рибонуклеазы (РНКазы) привлекают внимание исследователей в качестве потенциальных терапевтических агентов в отношении опухолевых клеток. Такими свойствами обладают РНКазы различного происхождения, среди которых и микробная гуанилспецифичная РНКаза *B.pumilus* – биназа. Целью нашего исследования явилась оценка влияния биназы на мембранный потенциал митохондрий злокачественных клеток.

В эксперименте использовали клеточные линии малигнизированной эпителиальной ткани легких человека (A549) и аденокарциномы двенадцатиперстной кишки человека (HuTu80). Клетки A549 и HuTu80 культивировали на средах RPMI-1640 и DMEM соответственно с добавлением 10% сыворотки, глутамина, по 100 ед/мл пенициллина и стрептомицина в атмосфере 5% CO₂. По достижении монослоем клеток 60% конфлюэнтности заменяли среду в лунках на свежую с добавлением биназы в концентрациях 100 мкг/мл и 300 мкг/мл и культивировали в течение 24 часов. Изменения мембранного потенциала митохондрий раковых клеток детектировали на проточном цитофлуориметре BD FACSCanto II при окрашивании клеток флуоресцентным красителем DiOC₆.

Доля клеток HuTu80, обладавших низким митохондриальным потенциалом, достоверно повышалась в присутствии биназы и составила 19,6±2,2% и 41,7±9,9% для концентраций 100 мкг/мл и 300 мкг/мл, соответственно (данный показатель в варианте без обработки ферментом находился на уровне 12,9±3,2%). У клеток линии A549 биназа вызывала снижение мембранного потенциала митохондрий у 8,5±2,8% и 10,3±3,2% клеток, для концентраций РНКазы 100 мкг/мл и 300 мкг/мл, соответственно, в то время как в варианте без обработки РНКазой низкий митохондриальный потенциал был характерен 7,3±1,7% клеток.

Таким образом, установили, что РНКаза *B. pumilus* 3-19 способна индуцировать достоверное снижение митохондриального потенциала у клеток HuTu80 в концентрации 300 мкг/мл. Отсутствие значимого эффекта в отношении клеток линии A549, возможно, объясняется более высокой устойчивостью данных клеток к действию фермента.

ВЫДЕЛЕНИЕ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВОЗБУДИТЕЛЕЙ МИКОЗНО-БАКТЕРИАЛЬНЫХ ГНИЛЕЙ РАСТЕНИЙ КАРТОФЕЛЯ

Мухитова А., Сташевски З., Карамова Н.С.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
Zyzik24@mail.ru*

Развитие бактериальных, грибных и вирусных болезней во время вегетации растений и хранения полученной продукции является актуальной проблемой растениеводства. Большое значение в увеличении вредоносности играют изменения в биологии фитопатогенов, прежде всего связанные с их патогенными и адаптивными свойствами. Показано, что за последние 10 лет произошло резкое изменение в соотношении отдельных патогенов в агроэкосистемах. В связи с вышесказанным, разработка комплексных мер по защите экономически важных сельскохозяйственных культур обуславливает необходимость изучения таксономического состава фитопатогенов. Целью данного исследования явилось выделение и идентификация возбудителей микозно-бактериальных гнилей растений картофеля.

Объектом исследования служили клубни растений картофеля, собранные с опытных полей ТатНИИСХ (Лаишевский район Республики Татарстан). Для изоляции и получения чистых культур возбудителей смешанных гнилей использовали метод посева на питательные среды (мясо-пептонный агар и среда Чапека). Показано, что наиболее часто клубни картофеля поражаются фузариозно-бактериальными гнилями. На основании видовых и морфологических особенностей колоний и таксономического описания было определено 7 изолятов микромицетов рода *Fusarium*. Идентификация чистых культур, выделенных из зараженных клубней, с применением метода MALDI-TOF масс-спектрометрии позволило установить присутствие в гнилях бактерий *Providencia alcalifaciens*, *Lisinibacillus sphaericus*, *Lisinibacillus fusiformis*, *Proteus hauservii*, *Citrobacter freundii*, *Enterobacter cloacae*, *Enterobacter asburiae*, *Enterobacter kobei*, *Myroides odoratus*.

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

РИБОНУКЛЕОЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ БАКТЕРИАЛЬНОЙ МИКРОФЛОРЫ ЭПИТЕЛИЯ ПРЯМОЙ КИШКИ КАК ПРИРОДНЫЙ ФАКТОР ПРОТИВОДЕЙСТВИЯ ОПУХОЛЕОБРАЗОВАНИЮ

Нгуен Тхи Нга

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
nn7189@gmail.com*

С самого рождения человека его желудочно-кишечный тракт (ЖКТ) населен микроорганизмами, преимущественно бактериями, различающимися морфологически, физиологически и структурно. Микрофлора обеспечивает благоприятное, защитное, трофическое питание и обмен веществ, передачи сигналов для хозяина. Но в зависимости от контекста и восприимчивости хозяина она может стать фактором риска для заболевания [1]. На протяжении последних нескольких лет в ряде научно-исследовательских работ кишечный микробиоценоз был определен как один из ключевых факторов развития колоректального рака (КР) [2]. Канцерогенез в кишечнике вызван в присутствии потенциально вредных или отсутствии защитных микробов, производством канцерогенов, генерируемых микробами, и индукцией воспаления и модуляцией иммунной системы [3]. Предполагают, что обнаружение бактерий в пристеночной нише при раке толстой кишки может являться следствием, связанным с патологией изменений в структуре слизи. На основании анализов фекальных образцов трудно получить однозначный вывод о вкладе некоторых микроорганизмов к КР. Комменсальные бактерии находятся в двух компартментах: в просвете толстой кишки – переходные бактерии и в слизи оболочке – укореившиеся тесно-прилегающие бактерии. Важно различать эти два микробных сообщества, так как они могут по-разному относиться к этиологии аденомы [4]. Изучение сообщества тесно-прилегающих со слизистой оболочкой бактерий может обеспечить более глубокое понимание об отношении микробов с КР. Нами были проанализированы биоптаты слизистой оболочки прямой кишки 30 пациентов, подвергшихся хирургическому удалению карцином после установления диагноза «колоректальный рак». Из 30 биоптатов нормального и онкотрансформированного эпителия прямого кишечника выделено и идентифицировано (по базе данных, содержащейся в библиотеке программы прибора BioTyper 2.0. MALDI-TOF спектроскопия) 98 культивируемых микробных изолятов (*Escherichia coli*, *Serratia marcescens*, представители родов *Bacillus*, *Pseudomonas*, *Klebsiella*, *Enterobacter*, *Aeromonas*). Особое внимание было уделено активности секретируемых рибонуклеаз (РНКаЗ) бактерий, поскольку известно [5], что РНКазы обладают противоопухолевым эффектом, противовирусной активностью. Мы установили, что активности РНКаЗ бактерий, выделенных из злокачественного колоректального эпителия выше, чем те микрофлоры из нормальной ткани. На основании имеющихся фактов можно предложить, что активация синтеза внеклеточного РНКазы - один из возможных механизмов микрофлоры борется, чтобы сохранить и защитить свою естественную среду обитания. Современные представления о роли и функции РНКаЗ в клетках позволяют рассматривать эти ферменты как перспективную альтернативу традиционным химиотерапевтическим средствам в шадящей терапии злокачественных новообразований. Мы хотим выделить, очистить и охарактеризовать новую секретируемую РНКазу и рассматривать ее как нового кандидата на роль альтернативных традиционных противоопухолевых препаратов.

1. Shanahan F. The colonic microbiota and colonic disease. *Curr Gastroenterol Rep.* 2012 Oct;14(5):446-52.
2. Caitriona M. Guinane and Paul D. Cotter. Role of the gut microbiota in health and chronic gastrointestinal disease: understanding a hidden metabolic organ. *Ther Adv Gastroentero* (2013) 6(4) 295–308
3. Tlaskalova-Hogenova H., Vannucci L., Klimesova K., Stepankova R., Krizan J., Kverka M. Microbiome and colorectal carcinoma: insights from germ-free and conventional animal models. *Cancer J.* 2014 May-Jun;20(3):217-24.
4. Shen X.J., Rawls J.F., Randall T., Bureal L., Mpande C.N., Jenkins N., Jovov B., Abdo Z., Sandler R.S., Keku T.O. Molecular characterization of mucosal adherent bacteria and associations with colorectal adenomas. *Gut Microbes.* 2010 May-Jun;1(3):138-47.
5. Makarov A.A. Ilinskaya O.N. Cytotoxic ribonucleases: molecular weapons and their targets (review). *FEBS Lett.*, 2003, 540, 15-20

ЭКСПРЕССИЯ ГЕНА МИКРОБНЫХ ФИТАЗ В КОРНЯХ РАСТЕНИЙ КАК РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ НЕДОСТАТКА ФОСФОРА В ПОЧВАХ

Валеева Л.Р., Нямсурэн Ч., Нигматуллина Л.Р., Шакиров Е.В., Шарипова М.Р.

ФГАОУ ВПО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань
nigmatullinalili@mail.ru

Фосфор является одним из главных компонентов энергетического метаболизма, биосинтеза нуклеиновых кислот и клеточных мембран живых организмов. В почве фосфор может находиться в недоступном для растений состоянии. В связи с чем, актуальна проблема преодоления фосфорного голодания растений. Недоступные для растений почвенные соединения фитаты способны утилизировать бактерии за счет выделения специфических ферментов – фитаз, что позволяет переводить недоступные соединения фосфора в доступную для растений форму. Целью работы было получение растений *Arabidopsis thaliana*, экспрессирующих микробную фитазу *Bacillus ginsengihumi*. Ген бациллярной фитазы клонировали в бинарный вектор pСВК05 под контролем растительного промотора Pht1;2. Экспрессия промотора Pht1;2 происходила в эпителиальных клетках корней *A. thaliana* и индуцировалась недостатком неорганического фосфора. Провели трансформацию растений *A. thaliana* рекомбинантными бактериями *Agrobacterium tumefaciens* GV3101. Селекцию трансформантов проводили на среде Murashige-Skoog с добавлением гербицида BASTA. В результате получили 5 независимых чистых линий трансгенных *A. thaliana*. С помощью метода обратной транскрипции определили экспрессию гена бактериальной фитазы на уровне РНК в корнях растений. С помощью иммуоблоттинга установили наличие бактериальной фитазы в белковых экстрактах корней *A. thaliana*. Таким образом, экспрессия гена фитазы происходила на уровне транскрипции и трансляции, дальнейшие исследования направлены на характеристику и изучение жизнедеятельности трансгенных растений в условиях фосфорного голодания.

Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект №14-83).

ЭПИГЕНЕТИЧЕСКАЯ КЛАСТЕРНАЯ РЕГУЛЯЦИЯ ЭКСПРЕССИИ ОНКОГЕНОВ G-КВАДРУПЛЕКС-ОБРАЗУЮЩИМИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯМИ ДНК

Оглоблина А.М.^a, Алексеевский А.В.^b, Якубовская М.Г.^a

^a НИИ Канцерогенеза ФГБУ «РОНЦ им. Н.Н.Блохина» РАМН, Москва

^b МГУ имени М.В. Ломоносова, Факультет биоинженерии и биоинформатики, Москва
ann.ogloblina@gmail.com

Новым направлением молекулярной онкологии является изучение механизмов эпигенетической регуляции экспрессии генов неканоническими структурами ДНК, среди которых наиболее важным является образование G-квадруплексов (G4). При локализации квадруплекс-образующей последовательности (КОП) в промоторной области гена, уровень его экспрессии определяется закономерностями перехода В-ДНК в неканоническую форму. Эндогенные соединения регулируют процесс функционально значимого перехода В-ДНК в G-4, в то время как ксенобиотики способны его нарушать. Эффект воздействия соединения зависит от структуры G4, определяемой КОП. Нарушение регуляции этого процесса приводит к изменению профиля экспрессии белков, к генным и хромосомным перестройкам и, таким образом, вовлечено в патогенез онкологических заболеваний.

Целью нашей работы было выявление групп генов, кооперативно меняющих уровень экспрессии из-за наличия в промоторной области G-4, формируемых КОП, и анализ свойств соответствующих G-4.

Работа проводилась методами компьютерного анализа баз данных генома человека (human genome GRCh39/hg39). Анализ стабильности и структуры G4 проводили методом УФ-плавления и кругового дихроизма.

В результате проведения исследования были выявлены гены, содержащие КОП на расстоянии до 500 пар нуклеотидов от сайта старта трансляции, проведен анализ наиболее распространенных мотивов КОП по числу гуанинов в тракте и нуклеотидов между ними. При анализе учитывали расположение КОП на кодирующей и не кодирующей нитях ДНК. Было установлено, что КОП в 1,4 раза чаще встречаются на не кодирующей нити, и после транскрипции в составе м-РНК участвуют в регуляции трансляции. Было выявлено 10 КОП, каждая из которых предшествует более, чем 20ти генам. Наиболее распространенным КОП является мотив GGGNGGGNGGGNGGG. Он был выявлен в промоторной области 106 генов, большинство из которых обладают пропролиферативной активностью. Была измерена стабильность G-4, формируемых такими КОП, которая составила свыше 87°C. Это значительно превышает термическую стабильность дуплекса и позволяет утверждать, что локусы этой КОП, способны формировать стабильные G4 in vivo.

Таким образом, с помощью УФ-плавления ДНК и кругового дихроизма определены стабильность и тип G4, образуемых одним из распространенных в геноме мотивом КОП, а с помощью биоинформатического анализа продемонстрирована принципиальная возможность кооперативной регуляции экспрессии генов и определены кластеры генов, которые могут подвергаться данному типу регуляции.

ХАРАКТЕРИСТИКА АПОПТОЗИНДУЦИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ БИНАЗЫ В ОТНОШЕНИИ КЛЕТОК КАРЦИНОМЫ МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

Пуховская В.С., Зеленихин П.В.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
viktori540@gmail.com*

Актуальной задачей современной медицины является поиск новых средств терапии онкологических заболеваний, включая рак молочной железы. Известно, что ряд рибонуклеаз (РНКаза) способен избирательно подавлять рост и развитие раковых клеток *in vitro* и *in vivo* [1, 2]. Использование ферментов млекопитающих не оправдано в связи с существующей системой защиты клеток от действия собственных РНКаза, опосредованной наличием специфического цитозольного ингибитора РНКаза [3]. Поэтому более перспективными являются РНказы, филогенетически удаленные от своих аналогов у млекопитающих, в том числе, РНказы микробного происхождения, не подверженные действию ингибитора [1]. К таким ферментам относится биназа - РНКаза *Bacillus pumilus*.

С использованием проточной цитометрии оценивали способность биназы и панкреатической РНказы А индуцировать апоптоз клеток рака молочной железы линий HBL-100, ZR-75-1 и MCF-7.

Установлено, что биназа способна вызывать апоптоз клеток линий ZR-75-1 и MCF-7. Клетки ZR-75-1 были наиболее чувствительны к цитотоксической активности фермента. Биназа в диапазоне исследованных концентраций (100-300 мкг/мл) не индуцировала апоптоз клеток HBL-100.

Основываясь на полученных экспериментальных данных, а также на спектре экспрессируемых клетками линий HBL-100, ZR-75-1 и MCF-7 онкогенов, можно предположить, что апоптозиндуцирующее действие биназы более направлено на клетки, набор онкогенов которых включает в себя мутантные формы генов семейства Ras, и других онкогенов, чья экспрессия приводит к конститутивной активации Ras-зависимых сигнальных путей клетки.

1. A.A. Makarov, A. Kolchinsky, O.N. Ilinskaya. Bioessays, 2008, 30, 781-90.
2. N.L. Mironova, I.Y. Petrushanko, O.A. Patutina. Biochimie, 2013, 12, 2120-31.
3. P. Leland, R. Raines. Chemistry and Biology, 2001, 8, 405-13.

ОПТИМИЗАЦИЯ СРЕДЫ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ РЕКОМБИНАНТНОГО ШТАММА *BACILLUS SUBTILIS*

Рудакова Н.Л., Динь Т.Л., Балабан Н.П., Частухина И.Б., Нигматуллина Л.Р., Камалетдинова Л.Х., Шалавина, М.А., Шарипова М.Р.

ИФМиб КФУ, Казань
natalialrudakova@mail.ru

Адамализины – одно из семейств клана метцинкиновых металлопротеиназ. Эукариотические метцинкины играют важную роль в эмбриональном развитии и дифференцировке тканей, вовлечены в аутоиммунные реакции, в развитие патологических состояний: ревматоидных артритов, воспалительных процессов, атеросклероза, онкологических заболеваний, способствуют миграции клеток, участвуют в органогенезе, дегенерации тканей, а также при делении, проникновении и метастазировании раковых клеток [1]. Важная роль этих ферментов в регуляторных процессах обуславливает активный интерес исследователей к этой группе белков. Адамолизиноподобные метцинкины обнаружены у эукариот и не описаны ранее для бацилл и других грамположительных организмов. Впервые бациллярный фермент выделен казанскими учеными [2]. Для исследования закономерностей биосинтеза адамализиноподобной эндопептидазы бацилл оптимизировали среду культивирования рекомбинантного штамма-хозяина *Bacillus subtilis*. Плазмиду рSA1, несущую ген адамализиноподобной металлопротеиназы *Bacillus pumilus*, трансформировали в протеазодефицитный штамм *Bacillus subtilis* BJ 20-36. Для подбора оптимального соотношения основных компонентов питательной среды рекомбинантного штамма проводили двухфакторные эксперименты, в которых варьировали концентрацию пептона и неорганического фосфата, а так же казеина и неорганического фосфата. Результаты двухфакторных экспериментов показали, что максимальная продукция фермента наблюдается при концентрации в среде пептона 20 г/л, неорганического фосфата 1,45 г/л и казеина – 1 г/л. В результате было установлено, что присутствие в питательной среде сложных органических субстратов оказывает выраженный стимулирующий эффект на биосинтез фермента.

Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также частично за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

1. Sterchi E.E., Stöcker W., Bond J.S., Molecular Aspects of Medicine, 2008, 29, 309-328.
2. Rudakova N.L., Balaban N.P., Danilova Y.V., Rudenskaya G.N., Sharipova M.R., Biochemistry (Moscow), 2010, 75, (10), 1294-1301.

СКРИНИНГ АКТИНОБАКТЕРИЙ-АНТАГОНИСТОВ ФИТОПАТОГЕНОВ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ КУЛЬТУР РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Салахова И.И., Мочалова Н.К., Карамова Н.С.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
nskaramova@mail.ru, iliza-1993@mail.ru

Корневые гнили, поражающие культурные растения, представляют серьезную проблему для сельскохозяйственного производства Республики Татарстан.

Применение эффективных биопрепаратов для искусственного регулирования уровня и направленности действия ассоциации почвенной микрофлоры является наиболее перспективной стратегией развития современного растениеводства с целью получения высококачественной экологически безопасной сельскохозяйственной продукции.

Важная роль в подавлении развития возбудителей болезней растений принадлежит актинобактериям, которые по количеству антагонистических форм занимают первое место среди микроорганизмов.

Целью данной работы явилось выделение и изучение антагонистических свойств почвенных актинобактерий.

В работе были использованы пробы почв с опытных полей ТатНИИСХ (Большекабанское сельское поселение Лаишевского района Республики Татарстан). Количественный анализ микрофлоры показал, что количество актинобактерий в пробах почв составляет 15×10^6 – 48×10^6 КОЕ/г. С применением метода скученного высева почвы было выделено 2 вида актинобактерий-антагонистов, представителей р. *Streptomyces*. Антагонистические свойства выделенных культур были изучены в отношении фитопатогенных грибов р. *Fusarium*, *Alternaria*, *Bipolaris*, *Phytophthora*. Установлено, что актинобактерии наиболее эффективно проявляют антагонистические свойства в отношении грибов р. *Fusarium*, что позволяет рассматривать их как перспективных продуцентов биопрепаратов для защиты растений от болезней грибной этиологии.

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

РОЛЬ ЖЕЛЕЗА В ЖИЗНЕДЕЯТЕЛЬНОСТИ БАКТЕРИЙ РОДА *LACTOBACILLUS*

Салахутдинова А.И.^a, Сизенцов А.Н.^b, Яруллина Д.Р.^a

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
Оренбургский государственный университет, Оренбург
mehammad1@mail.ru*

Железо (Fe) является важнейшим элементом в жизнедеятельности почти всех организмов, дефицит или избыток которого приводит к серьёзным нарушениям метаболических процессов в клетках. Комменсальные лактобациллы, образуя молочную кислоту, стимулируют всасываемость Fe в кишечнике. С другой стороны, они могут внутриклеточно накапливать ионы Fe, проявляя тем самым антагонистические свойства по отношению к патогенным микроорганизмам. Это связано прежде всего с тем, что Fe необходимо для формирования биопленок у ряда патогенных бактерий. При этом сами лактобациллы тоже существуют в кишечнике в виде биопленки. В целом, Fe оказывает влияние на состояние лактобацилл в кишечнике, которые, в свою очередь, способны изменять биодоступность этого элемента для патогенных бактерий и макроорганизма. Цель работы - оценить способность лактобацилл разных видов модулировать биодоступность Fe в растворе, а также установить потребность лактобацилл в этом элементе и влияние Fe на способность лактобацилл образовывать биопленки.

В работе исследовали влияние FeCl₃ на рост лактобацилл и их способность образовывать биопленки. Среди 10 исследованных штаммов лактобацилл способность формировать биопленки обнаружена только у бактерий *Lactobacillus sp.* 1-4, выделенных нами из питьевого йогурта «Bio Баланс» (ОАО Юнимилк), при этом добавление 1000 мкМ FeCl₃ в среду роста приводило к увеличению образования биопленок на 90%. Мы также оценили способность лактобацилл сорбировать Fe (III) из раствора, однако ни у одного из исследованных штаммов лактобацилл существенная сорбирующая активность не была обнаружена. Данная работа имеет несомненное практическое значение, поскольку направлена на выяснение механизма регуляции образования биопленок у биотехнологически ценных лактобацилл и роли в нем Fe.

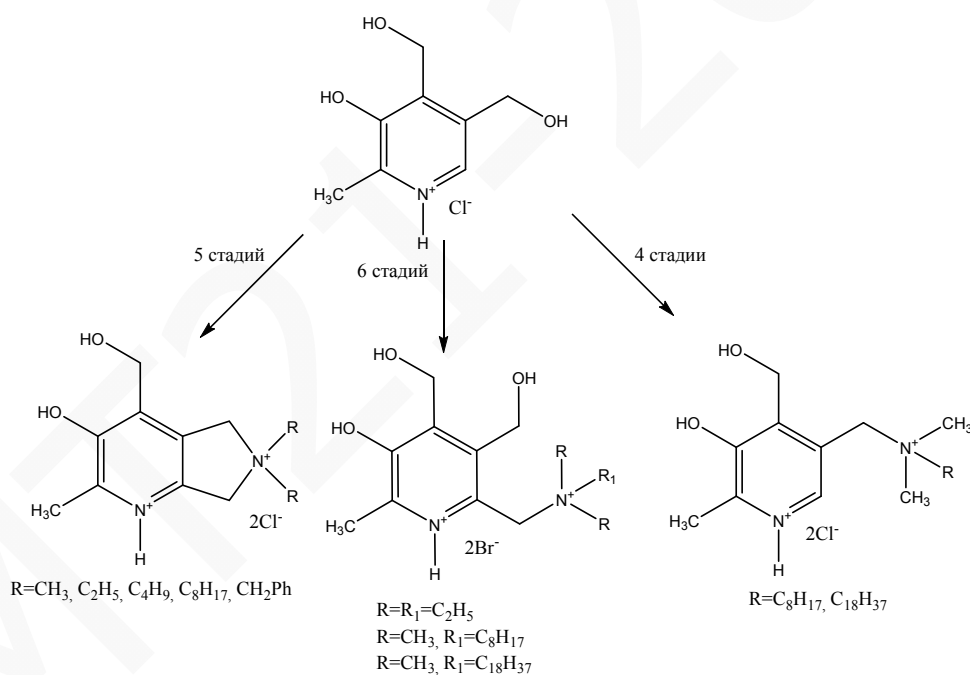
АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА

Сапожников С.В., Нуреева А.А., Габдрахманова А.А., Штырлин Н.В.

НОЦ Фармацевтики КФУ, Казань
Sapozhnikovsergei@gmail.com

Четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) являются одним из важнейших классов антисептических средств и имеют широкую область применения, в частности, в терапии местных гнойно-воспалительных процессов, в дезинфекции неповрежденной кожи перед операциями, консервировании глазных капель, инъекционных растворов, зубных паст, косметических средств, дезинфекции и очистке поверхностей. Современные ЧАС характеризуются широким спектром антимикробной активности по отношению к грамположительным и грамотрицательным микроорганизмам, а также грибам.

В настоящей работе с использованием селективной функционализации пиридоксина в 5-6 стадий был получен ряд четвертичных аммониевых солей. Исследование антибактериальной активности синтезированных соединений *in vitro* на штаммах грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов показало, что некоторые из полученных соединений обладают высокой антибактериальной активностью по отношению к штаммам *M. luteus*, *S. aureus* и *S. epidermidis* (МИК = 4 мкг/мл).



РАЗРАБОТКА НАНОСТРУКТУРНОЙ ОРГАНОМИНЕРАЛЬНОЙ КОРМОВОЙ ДОБАВКИ И ПЕРСПЕКТИВНОСТЬ ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Семакина Е.В.^a, Ежкова Д.В.^a, Ежков В.О.^b

^a ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань

^b ГНУ Татарский НИИ агрохимии и почвоведения Российской академии сельскохозяйственных наук, Казань
kat.semackina2011@yandex.ru

В литературных данных достаточно широко описано применение сапропеля в сельскохозяйственном производстве. Осторожное использование нативного сапропеля в животноводстве обусловлено его микробиоценозом, содержащемся в органической части вещества. Поэтому его в качестве минеральной подкормки животным применяют в термически переработанном виде, где особо ценная органическая часть минерала, содержащая аминокислоты, ферменты, витамины группы В, теряется [1].

Одним из методов, обеспечивающих биобезопасность сырого сапропеля, является ультразвуковое диспергирование, что приводит к деструкции микроорганизмов и обуславливает доступ к их биологически активным веществам.

Материалами исследований стали наноструктурный сапропель, изготовленный из сапропеля месторождения озеро Белое Республики Татарстан (РТ), цыплята-бройлеры. Наноструктурный сапропель с размерами частиц 45.0-180.0 нм изготавливали методом ультразвукового воздействия на минерал, стабилизировали деионизированной водой.

В научно-производственном опыте в КФХ «МАРС» Зеленодольского района РТ применение разного количества наноразмерного сапропеля в кормлении цыплят-бройлеров способствовало повышению их живой массы на 26.3-28.9%, при показателях макроаналога – 6.9%, в сравнении с контролем. Сохранность поголовья цыплят-бройлеров, получавших наноразмерный сапропель составила 95.0-97.0%, против показателей контроля – 92.0% и получавших макроаналог – 94.0%.

1. А.М. Ежкова, Р.Н. Файзрахманов, Ш.К. Шакиров, Р.Н. Файзрахманов мл. Повышение эффективности молочного скотоводства и улучшение качества молока при использовании природных минералов. Вестник КГТУ, 2014, т. 17, № 10, с. 149-152.

НОВЫЕ ГИБРИДНЫЕ БИОМАТЕРИАЛЫ: ШАГ НАВСТРЕЧУ ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННОЙ МЕДИЦИНЕ

Станкевич К.С.^{a,b}, Гудима А.^b, Филимонов В.Д.^a, Твердохлебов С.И.^c, Кжышковска Ю.Г.^{b,d}

^a Кафедра Биотехнологии и органической химии, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

^b Департамент Врожденного Иммуитета и Иммунологической Толерантности, Университет Гейдельберга, Мангейм, Германия

^c Кафедра Теоретической и экспериментальной физики, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

^d Лаборатория трансляционной клеточной и молекулярной биомедицины, Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск
xenia.st88@gmail.com

Имплантаты на основе полимолочной кислоты (ПМК) могут вызывать воспаление. Целью данной работы была разработка метода модифицирования поверхности биоматериалов на основе высокомолекулярной ПМК ($M_w=1646000$ г/моль) и оценка реакций воспалительного характера первичных моноцитарных макрофагов человека на полученные материалы. Предложенный метод представляет собой обработку поверхности биоматериалов из ПМК смесью толуол/этанол с последующим выдерживанием в растворе биомолекул (бриллиантовый зеленый (БЗ), флуоресцирующий амин 5-амино-2-фенил-1,3-бензоксазол и желатин). На материалы, модифицированные желатином, осуществляли ковалентную прививку бифункциональных кросс-линкеров через реакции с арендиазоний трифлатами. Свойства полученных гибридных биоматериалов исследовали с помощью УФ-, Raman- и ИК-спектроскопии, РФА и ТГА/ДТА/ДСК. В качестве тест-системы для оценки реакций воспалительного характера первичных моноцитарных макрофагов человека использовали CD14+ моноциты, выделенные из крови индивидуальных доноров. Проанализировано влияние модифицированных материалов на секрецию провоспалительных цитокинов 1 и 2 типа (TNF- α , CCL18) и экспрессию трансмембранных рецепторов (CD206, Stabilin-1). Концентрацию цитокинов измеряли с помощью ИФА, для оценки экспрессии рецепторов использовали конфокальную микроскопию. Показано, что реакция на биоматериалы является донор-специфичной, и в некоторых случаях пленки с модифицированной поверхностью обладают противовоспалительными свойствами. Предложенная тест-система позволяет провести *in vitro* экспресс-оценку иммунного ответа пациента на биоматериалы. Таким образом, становится возможным индивидуально осуществлять подбор необходимого типа материалов и покрытий имплантатов, решая задачу в контексте персонализированной медицины.

ЭПИГЕНЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД ЛЕЧЕНИЯ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА

Старостина И.Г., Иванова В.В., Ризванов А.А.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
fairin@mail.ru*

Болезнь Паркинсона – нейродегенеративное заболевание, характеризующееся двумя основными формами возникновения: наследственной и спорадической. Как известно, спорадическая форма болезни Паркинсона не передается по наследству. Однако, эпигенетическая программа восстановления и работы нейронов экстрапирамидной моторной системы нарушаются. Современная медицина пока не может излечить заболевание или замедлить его прогрессирование с помощью этиологической или патогенетической терапии, существующие методы консервативного и оперативного лечения позволяют только улучшить качество жизни больных. Но так как это заболевание эпигенетической природы, то данное состояние возможно реверсировать методами генной терапии, а именно корректировкой транскрипции и экспрессии генов кандидатов, с отклонением от нормальной программы реализации экспрессии на клеточном уровне.

На основе этой гипотезы об этиологии болезни Паркинсона, а именно спорадической формы, нами разработаны методы тестирования потенциальных лекарственных препаратов на основе изучения метаболического стресса клеток. Были выявлены комбинации микро-РНК, генопрепаратов и химических веществ с потенциальным терапевтическим эффектом для лечения данного заболевания.

Задачей исследования является разработка тест-системы на основе метаболического стресса клеток, полученных от пациентов со спорадической формой Болезни Паркинсона, для скрининга потенциальных лекарственных препаратов; идентификации комбинаций микро-РНК, генопрепаратов и химических веществ, модулирующих структуру хроматина, для реверсии к нормальному состоянию фибробластов, полученных от пациентов с Болезнью Паркинсона, путем коррекции эпигенетического статуса клеток.

СОЗДАНИЕ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ ПРОДУЦЕНТОВ СЕРИНОВЫХ ПРОТЕИНАЗ БАЦИЛЛ НА ОСНОВЕ LIKE-СИСТЕМЫ ЭКСПРЕССИИ

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

ФГАОУВПО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань
Tihonovaao93@gmail.com

Получение высокоэффективных продуцентов белков является важной задачей современной биотехнологии. Для повышения секреции белков применяют несколько подходов, одним из которых является применение экспрессионных систем. В настоящей работе с целью повышения эффективности секреции субтилизиноподобной протеиназы (AprBp) и глутамилэндопептидазы (GseBp) использовали LIKE-систему экспрессии, которая показала свою эффективность на модельных внутриклеточных белках. Гены протеиназ (*aprBp* и *gseBp*) клонировали под контролем сильного индуцибельного промотора P_{Lial} . Условием для выделения белков в среду культивирования (облегчает дальнейшую очистку белка) является наличие в конструкции сильного сигнального пептида. Следующим этапом работы стала оптимизация LIKE-системы экспрессии путем подбора рекомбинантного сигнального пептида. Тестировали три сигнальные последовательности *B. megaterium* (SP_{Pac} , SP_{Yngk} и SP_{Asp}). Все три показали высокий уровень секреции рекомбинантной внеклеточной гидролазы *Thermobifidafusca*. С помощью компьютерной программы PrediSi (www.predisi.de/) оценивали индекс эффективности секреции (D-score) собственных сигнальных пептидов сериновых протеиназ *B. pumilus* 3-19 (SP_{AprBp} и SP_{GseBp}) и выбранных рекомбинантных сигнальных пептидов. По данным анализа программой PrediSi, индекс эффективности секреции собственных сигнальных пептидов сериновых протеиназ AprBp и GseBp *B. pumilus* составил – 0.6 и 0.67. Индекс эффективности рекомбинантных сигнальных пептидов составил – 0.7 для SP_{Pac} , 0.99 для SP_{Yngk} и 0.81 для SP_{Asp} . Проводили трансформацию рекомбинантных конструкций в беспротеазный штамм *B. subtilis* BG2036. Протеолитическую активность штаммов оценивали на чашках смолочным агаром, в качестве индуктора LIKE-системы экспрессии использовали антибиотик бацитрацин. Протеолитическая активность субтилизиноподобной протеиназы не повышалась в конструкциях с рекомбинантными сигнальными пептидами. Протеолитическая активность глутамилэндопептидазы была выше в 2 раза под контролем рекомбинантного сигнального пептида SP_{Yngk} и при концентрации бацитрацина - 50 мкг/мл. Полученные данные свидетельствуют, что стратегия оптимизации путем подбора рекомбинантного сигнального пептида в сочетании с беспротеазными штаммами является эффективной для повышения секреции глутамилэндопептидазы.

Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также частично за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАЗРАБОТКИ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ ПРОБИОТИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Ткаченко С.В., Китаевская С.В.

*Казанский национальный исследовательский университет, Казань
kitaevskayas@mail.ru*

Молочнокислые бактерии проявляют широкий спектр уникальных биологических эффектов на организм человека, активно участвуют в обменных и регуляторных процессах макроорганизма и представляют интерес как объект изучения для разработки пробиотических препаратов и продуктов функционального питания [1,2].

В настоящее время накоплено большое количество сообщений о полезном влиянии продуктов питания, содержащих культуры микроорганизмов-пробионтов, на организм человека, в том числе способность снижать риск возникновения злокачественных новообразований и выводить токсичные вещества из организма.

Многообразие свойств пробиотических культур, обусловленных главным образом развитием молочнокислых и бифидобактерий, могут быть сведены к усилению секреции ферментов пищеварения, выведению продуктов азотистого обмена, иммуностимулирующему действию, повышению усвояемости кальция, снижению уровня холестерина в крови, антибактериальному действию на патогенные микроорганизмы [3]. Положительное влияние молочнокислых бактерий объясняется в том числе и действием продуктов их метаболизма, таких как молочная, уксусная, муравьиная и др. органические кислоты; углекислый газ; перекись водорода; ацетоин, диацетил; окись азота; короткоцепочечные жирные кислоты; бактериоцины и бактерициноподобные вещества [4].

На кафедре технологии пищевых производств Казанского национального исследовательского технологического университета проводятся работы по выделению, идентификации и исследованию функционально-технологических свойств новых культур молочнокислых бактерий с целью отбора функционально-активных штаммов, перспективных для создания на их основе продуктов питания с пробиотическим действием.

В ходе работы из различных природных источников, микрофлора которых сформирована естественным путем, был выделен ряд молочнокислых микроорганизмов различных таксонов. Изучены физиолого-биохимические и функционально-технологические свойства новых штаммов молочнокислых бактерий, отобраны перспективные штаммы *Lmb. casei* и *Lmb. bavaricus*, характеризующиеся высокой устойчивостью к неблагоприятным факторам среды (таким как низкое значение pH; высокие концентрации желчи, хлорида натрия и фенола) и антибиотикам, а также высокой антагонистической активностью. Выявлено, что применение данных штаммов в качестве стартовых заквасок позволяет обеспечить безопасность ферментированных продуктов питания в отношении развития микробиологических рисков.

1. W.P. Hammes, A. Bantleon, M. Seunghwa. Microbiology Reviews, 1990, 2,165-174.
2. G. Smit [et all]. Microbiology Reviews, 2005, 29,591-610.
3. Шендеров Б. А.. – М.: Грантъ, 2001, 288 с.
4. Ганина В. И.– М.: Изд-во МГУПБ, 2001, 169 с.

ПОИСК ИНГИБИТОРОВ БАКТЕРИАЛЬНЫХ БИОПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ФУРАНОНОВ

Тризна Е.Ю., Хакимуллина Э.Н., Латыпова Л.З., Курбангалиева А.Р., Каюмов А.Р.

ИФМуБ КФУ, Казань
trizna91@mail.ru

В настоящее время многие патогены приобрели устойчивость к действию антибиотиков, что объясняет необходимость поиска новых антибактериальных препаратов. Стафилококки являются одними из основных внутрибольничных патогенов. Это обусловлено образованием биопленок этими бактериями. В составе биопленок они обладают повышенной устойчивостью к иммунной системе человека и антибиотикам[1]. Поэтому актуальной проблемой является поиск препаратов, подавляющих не только рост бактерий, но и образование биопленок. Сейчас показано, что галогенированные фураноны, обладают антимикробными свойствами и подавляют микробную колонизацию на поверхности водорослей.

Целью работы было идентифицировать производные фуранонов, эффективно подавляющих рост и образование биопленок бактериями *Staphylococcus*.

В Химическом институте КФУ были синтезированы галоген-производные фуранонов. Нами был проведен скрининг соединений подавляющих рост и образование биопленок бактериями *S. aureus* и *S. epidermidis*. В результате 6 соединений подавляли рост и образование биопленок бактериями более чем в 3 раза. Это фураноны с условными номерами Ф1, Ф6, Ф8, Ф29, Ф35, Ф83. Ф8, Ф29, Ф83. Для Ф1, Ф6, Ф35 минимальная ингибирующая концентрация была наименьшей - 5 мкг/мл. Также исследовали цитотоксичность соединений, в МТС-тесте на клетках линии MCF7. По полученным данным подсчитывали коэффициент цитотоксичности CC_{50} . Наименьшей цитотоксичностью обладал Ф35.

Таким образом, можно сделать вывод, что Ф35 может быть эффективным агентом, подавляющим образование биопленок стафилококками. Кроме того, Ф35 не оказывает цитотоксического эффекта на клетки эукариот. Следовательно, Ф35 может быть перспективным соединением в сфере медицины, используемым для обработки медицинского оборудования с целью предотвращения образования биопленок.

1. Kayumov A.R., Khakimullina E., Sharafutdinov I., Trizna E., Latypova L., Lien Thi, Margulis A., Bogachev M., Kurbangaliev A. J. Antibiotics. 2014. №143

ФИТАЗА *PANTOEA AGGLOMERANS*: ЭКСПРЕССИЯ В *ARABIDOPSIS THALIANA* ПОД КОНТРОЛЕМ ВИРУСНОГО ПРОМОТОРА

Трошагина Д.С., Валеева Л.Р., Нямсурэн Ч.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
dashunka_@mail.ru

Фосфор является важнейшим биогенным элементом, который необходим для жизнедеятельности всех организмов. Животные получают фосфор с пищей, растения и почвенные микроорганизмы непосредственно из почвы. Однако растения не могут полностью удовлетворить свои потребности в фосфоре, поскольку его большая часть находится в труднодоступной органической форме – фитатов. Способностью к гидролизу фитата обладают бактерии и микромицеты, которые синтезируют внеклеточные ферменты фитазы. В настоящее время проблема дефицита доступного фосфора в почве становится все более актуальной. Один из путей решения этой проблемы – разработка и внедрение новых биотехнологий. Перспективным направлением является получение трансгенных растений, несущих гены фитаз бактериального происхождения.

Целью работы явилось получение трансгенных растений *Arabidopsisthaliana*, содержащих ген фитазы бактерии *Pantoeaagglomerans* (*paPhyC*) под контролем промотора *CaMV 35S*. Растения трансформировали рекомбинантными бактериями *Agrobacteriumtumefaciens* GV3101 с геном фитазы *paPhyC*. Получены линии растений с единичной копией гена, что подтверждали с помощью ПЦР с использованием праймеров к гену бактериальной фитазы. Экспрессию модифицированного гена *PaPhyC* на транскрипционном уровне подтвердили секвенированием продуктов амплификации кДНК. Методом иммуноблотинга установили экспрессию микробной фитазы в тканях трансгенных растений. Молекулярный вес продукта соответствовал молекулярной массе бактериальной фитазы. Создание конструкций, обеспечивающих секрецию микробного фермента в ризосферу, может быть важным этапом для решения проблемы фосфорного питания растений.

Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект №14-83).

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПРИ РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ ВИДОВ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

Тюрина Т.А., Пономарев В.Я., Юнусов Э.Ш., Ежкова Г.О.

Казанский национальный технологический университет, Казань
v.y.ponomarev@gmail.com

Автоматизированные системы управления уже стали неотъемлемым атрибутом успешной деятельности любого предприятия. С появлением вычислительной техники значительно упростились способы хранения, а главное, обработки информации, в процессе обработки, которой выявляются основные требования для разрабатываемых прикладных программ: обеспечение физической и логической независимости данных, а также и их интеграция с созданием динамически обновляемой модели. Выполнение этих требований логично приводит к созданию единого для всех задач блока данных и разработки одной управляющей программы для манипулирования данными на физическом уровне.

Нами была поставлена задача разработки программного комплекса автоматизации технологических расчетов при проектировании новых видов пищевых продуктов на основании компонентного состава и проводимых технологических операций, с возможностью хранения, обновления данных и расчетов норм продуктов. Данная разработка должна быть ориентирована на оперативное решение пользователем необходимых вопросов, касающиеся расчета сырья, подбора пищевых ингредиентов с учетом их соотношений и возможной взаимокompенсации технологических свойств.

В качестве системы управления базой данных нами была выбрана MS SQL. Данная система устойчива в работе и не проблематична в установке. Так как в дальнейшем, после фазы тестирования, ожидается прикрепление базы данных в режиме онлайн, на базе сетевой архитектуры «клиент - сервер», данная система управления базами данных подходит нам по многим параметрам. Для написания приложения выбран язык программирования C#. Разработанное приложение представляет собой форму для расчета норм продуктов, информацию о необходимых пищевых ингредиентах, с выдачей информации о пищевой и биологической ценности готового продукта. Разработанной программой могут пользоваться сотрудники предприятий пищевой промышленности, преподаватели и студенты соответствующих кафедр.

УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ХИРУРГИЧЕСКИХ ИМПЛАНТОВ ИЗ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ

Фархетдинов А.И., Каюмова Э.И.

*Факультет авиационно-технологических систем УГАТУ, Уфа
farkeday@gmail.com*

На сегодняшний день актуальной и практически важной является проблема улучшения медико-биологических и механических свойств медицинских имплантов для ортопедии и травматологии. Материалы медицинских имплантов должны быть биосовместимыми, коррозионно и износостойкими, иметь соответствующие механические свойства для того, чтобы выдержать физиологические нагрузки и, более того, должны быть достаточно биоактивными, для обеспечения прочной связи искусственного материала с костной тканью.

Большое внимание исследователей сегодня фокусируется на влиянии шероховатости поверхности имплантов. Выявлено, что использование гладкой поверхности не может создать прочное контактное взаимодействие имплантов с костной тканью из-за отсутствия возможности протекания остеоинтеграционного процесса и малой фактической площади контакта такой поверхности с окружающей тканью. Поэтому существует необходимость создания имплантов с пористыми поверхностями. Однако пористые поверхности провоцируют усталостные разрушения, от чего возникает задача получения необходимого рельефа на поверхности и сохранения, или повышения усталостных свойств.

Целью данной работы является математическое моделирование концентрации напряжений в образцах с различным рельефом поверхности и разработка метода и режима получения специальной поверхности из порошкообразных частиц ВТ1-0.

Для определения влияния рельефа поверхности на распределение и на величину напряжений использовали математическое моделирование с применением метода конечных элементов. Инструментом исследования выступила программа конечно-элементного анализа ANSYS. Приложенная нагрузка на образцы составляла 50 Н.

Поскольку использовали одинаковую статистическую нагрузку и определенное время нагружения во всех случаях, то допускается сравнение величин концентрации напряжений в максимально нагруженных областях образцов. Анализ результатов моделирования показал, что в случае V-образных (а) и полукруглых надрезов (б) максимальные напряжения концентрируются в вершине надреза, причем наибольшая концентрация наблюдается в случае V-образного надреза. Рельеф поверхности, образованный выступами (в,г) предопределяет более однородное распределение напряжений низкого уровня. Наименьшая концентрация напряжений возникает в случае рельефа (г). Следовательно, оптимальной является поверхность с округлыми выступами с перешейком.

Такая поверхность может быть получена нанесением порошкообразных частиц путем диффузионного спекания. Перешеек должен обладать достаточной прочностью и иметь определенный размер, поэтому, необходимо провести эксперименты по оптимизации температурно-временного режима, при котором происходит соединение.

Эксперименты по диффузионной сварке титанового сплава ВТ6 с порошкообразными частицами ВТ1-0 проводились в установке для изотермической вакуумной формовки и отжига «ФерриВатт», величина вакуума 10^{-5} мм.рт.ст. Сварка проводилась при температурах 700, 800 и 900°C.

ВЛИЯНИЕ ГИПОГРАВИТАЦИИ НА УРОВЕНЬ ИММУНОФЛУОРЕСЦЕНЦИИ FLT-1 В МОТОНЕЙРОНАХ СПИННОГО МОЗГА КРЫС

Федянин А.О., Балтин М.Э.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
baban.bog@mail.ru*

В связи с активными полетами человека в космос на длительное время, в настоящее время существенно возрос интерес к изучению патогенеза гипогравитационного двигательного синдрома (ГДС). Атрофия мышц и апоптоз мышечных волокон, возникающих в ответ на уменьшение одного из ростовых факторов – инсулиноподобного фактора роста (IGF-1) рассматриваются как неблагоприятные симптомы, составляющие ГДС. Сосудистый эндотелиальный фактор роста (VEGF) рассматривается как один из потенциальных агентов, выполняющих нейропротекторные функции, независимые от сосудистого компонента, посредством активации Flk-1 и Flt-1. Поэтому в данном исследовании анализировался уровень иммуноэкспрессии рецептора к ростовому фактору VEGF-A – Flt-1 в мотонейронах поясничного и шейного отделов спинного мозга крыс, находящихся в условиях антиортостатического вывешивания задних конечностей, воспроизводящего эффекты функциональной разгрузки скелетных мышц нижних конечностей, возникающей в организме в ответ на воздействие микрогравитации.

В проведенных экспериментах была выявлена локализация рецептора к васкулоэндотелиальному фактору роста VEGF/Flt-1 в ядрах мотонейронов поясничного и шейного отделов спинного мозга крыс как контрольной, так и подопытной групп животных, что согласуется с результатами других исследователей. Однако интенсивность иммунофлуоресцентного окрашивания была более выражена в мотонейронах поясничного отдела спинного мозга крыс после 35-суточного «вывешивания», то есть в клетках иннервирующих мышцы задних конечностей, подверженных действию функциональной разгрузки.

Таким образом, моделирование гипогравитации может приводить к изменению уровня экспрессии факторов, обеспечивающих трофические и протекторные функции в мотонейронах, осуществляющих морфо-функциональный контроль свойств скелетных мышц.

Исследование поддержано грантами: Президента РФ НШ, РФФИ, Программа №7 Президиума РАН.

ПОЛИМЕРНЫЕ ТРЕКОВЫЕ МЕМБРАНЫ В БАРЬЕРНОЙ КЕРАТОПЛАСТИКЕ

Филиппова Е.О.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
katerinabosix@mail.ru*

Эпителиально-эндотелиальная дистрофия роговицы (ЭЭД) - прогрессирующее заболевание, патогенез которого связан с декомпенсацией эндотелиального слоя роговой оболочки. Низкая эффективность традиционных методов лечения обуславливают поиск и разработку новых способов лечения ЭЭД роговицы [1]. Наиболее перспективным является использование пористых мембран небиологического типа на основе полимера, например, полиэтилентерефталата (ПЭТФ).

Цель исследования - изучить в эксперименте возможность применения полимерной трековой мембраны в хирургическом лечении ЭЭД роговицы. Техника получения пористых трековых структур основана на облучении полимера высокоэнергетичными тяжелыми ионами, которые индуцируют узкие латентные треки на всю толщину полимерного материала. Выполнена серия экспериментов на 8 кроликах породы Шиншилла массой 2,5-4,0 кг. Спустя 3 недели после индуцированного повреждения роговой оболочки и развития заболевания осуществляли барьерную кератопластику с использованием полимерной трековой мембраны диаметром 10,0 мм. Через 5 недель после имплантации трековых мембран животных выводили из эксперимента, глазные яблоки энуклеировали. В ходе экспериментальных исследований установлено, что имплантация трековых пористых мембран в строму роговицы при ЭЭД протекает без отторжения имплантата и способствует стабилизации патологического процесса в роговой оболочке. Предлагаемый метод хирургического лечения ЭЭД с применением полимерных трековых мембран может быть рекомендован к апробации в клинических условиях.

1. А.А. Каспаров Вестник офтальмологии, 2000. Т. 116. - № 2. - С. 5-7.

ВЛИЯНИЕ АУТОЛОГИЧНЫХ МОНОНУКЛЕАРОВ КРОВИ НА РЕГЕНЕРАТОРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ИНДУЦИРОВАННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЯХ ЭНДОТЕЛИАЛЬНОГО СЛОЯ РОГОВИЦЫ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Филиппова Е.О.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
katerinabosix@mail.ru*

Эпителиально-эндотелиальная дистрофия роговицы (ЭЭД) является тяжелым, прогрессирующим заболеванием, связанным с декомпенсацией эндотелиального слоя роговой оболочки. Недостаточная эффективность традиционных методов консервативного и хирургического лечения обуславливают поиск и разработку новых способов лечения ЭЭД роговицы [1].

Цель исследования: в эксперименте изучить регенераторные процессы при индуцированных повреждениях эндотелиального слоя роговицы на фоне локального введения аутологичных моноклеаров крови. Выполнена серия экспериментов на свиных глазах. Моноклеары, взятые из крови экспериментального животного непосредственно перед манипуляцией, выделяли методом фракционирования в градиенте плотности (1,067-1,077 г/мл) на разделяющем растворе фиколл-верографин. Моделирование заболевания проводилось путем механического повреждения и удаления эндотелиального слоя роговицы. Через корнеосклеральный разрез на границе внутренней поверхностью роговицы и пузырьком воздуха наложена суспензия аутологичных моноклеаров крови. Забор материала производился на вторые сутки эксперимента. Полученный материал фиксировали для световой микроскопии. После приготовления парафиновых срезов препараты окрашивали гематоксилином и эозином и по методу Ван Гизона. По результатам гистологического исследования отмечались дистрофические изменения переднего эпителия, неравномерно выраженный отек основного вещества (преимущественно под боуменовской оболочкой) и повышено извитой ход коллагеновых волокон. Задняя пограничная мембрана также характеризуется изменением тинкториальных свойств, задний эпителий проявляет признаки регенерации.

1. А.А. Каспаров Вестник офтальмологии, 2000. Т. 116. - № 2. - С. 5-7.

ПОЛУЧЕНИЕ НОВОЙ ЭКСПРЕССИОННОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ФИТАЗНОГО ГЕНА *PANTOEA AGGLOMERANS*

Хабилова Н.Н.^а, Зайнуллина А.Р.^а, Частухина И.Б.^а, Шакиров Е.В.^б, Шарипова М.Р.^а

^а ИФМуБ КФУ, Казань

^б University of Texas at Austin, Austin, TX, USA

khabipova@list.ru

Одной из задач современной биотехнологии является изучение бактериальных ферментов фитаз, способствующих утилизации в почве труднодоступной для растений органической формы фосфора.

Фитаза бактерии *Pantoea agglomerans* (PaPhyC) обладает высокой специфической активностью, причем pH- и температурный оптимумы фермента соответствуют условиям кислых почв умеренных широт. Таким образом, использование данной фитазы перспективно для широкого применения в сельском хозяйстве, в частности для улучшения роста и урожайности сельскохозяйственных культур.

Цель работы – получение экспрессионной системы в рекомбинантном штамме *E. coli* BL21 pLysS на основе вектора pET28b, продуцирующей фитазу *P. agglomerans*.

Химически синтезированный ген фитазы *P. agglomerans* клонировали в молекулярный вектор pET28b. Полученную конструкцию pET28b paPhyC трансформировали в штамм *E. coli* DH5λ. Наличие целевого гена в полученных трансформантах показано ПЦР с использованием праймеров к гену фитазы. Результаты секвенирования подтвердили полное соответствие гена paPhyC на плазмиде pET28b рекомбинантного штамма гену фитазы *P. agglomerans*. Для получения экспрессионной системы рекомбинантную плазмиду трансформировали в клетки *E. coli* BL21 pLysS. Селекцию трансформантов проводили на среде LA с добавлением маркерных антибиотиков канамицина и хлорамфеникола. Трансформация подтверждена ПЦР и секвенированием.

Таким образом, нами получен рекомбинантный штамм *E. coli* BL21 pLysS, несущий ген фитазы *P. agglomerans*. Изучение экспрессии данного фермента станет решающим этапом в решении фундаментальных проблем, связанных с регулированием фосфорного обмена на клеточном уровне.

ВЫДЕЛЕНИЕ ЭПИФИТНОЙ И РИЗОСФЕРНОЙ МИКРОФЛОРЫ С АНТАГОНИСТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Хадиева.Г.Ф., Мочалова Н.К., Марданова А.М.
Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
g.h95@mail.ru

Растения населены широким спектром различных микроорганизмов, обладающих антагонистической и/или рост-стимулирующей активностью, что вносит важный вклад в формирование резистентности растений к различным фитопатогенам. Одним из перспективных направлений повышения продуктивности сельскохозяйственных культур является регуляция жизнестойкости и стрессоустойчивости растений за счёт использования естественных помощников – эпифитных и ризосферных микроорганизмов [1].

Целью работы было выделение из эпифитной и ризосферной микрофлоры картофеля бактерий с антагонистической активностью в отношении различных микроорганизмов. Для выделения микрофлоры листья и корешки картофеля раскладывали на среде МПА и культивировали в течение 24 часов. Отбирали колонии бактерий, выросшие вблизи листовой пластинки и корешков. Чистые культуры бактерий идентифицировали на MALDI Biotyper (Bruker Daltonik). Антагонистическую активность по отношению бактерий исследовали методом перпендикулярных штрихов.

Выделили 3 изолята с грамотрицательным и 3 изолята с грамположительным морфотипом. Чистые культуры штаммов бактерий идентифицировали как *Serratia liquefaciens*, *Lysinibacillus fusiformis*, *Bacillus pumilus* (из листьев), *Enterobacter ludwigii*, *Acinetobacter calcoaceticus*, *Bacillus cereus* (из корней). *S. liquefaciens*, *E. ludwigii* и *A. calcoaceticus* проявили высокую антагонистическую активность в отношении фитопатогенных бактерий *Xanthomonas campestris*, *Pectobacterium atrosepticum* и *Lysinibacillus sphaericus*. *B. cereus* подавлял рост *P. atrosepticum*, *L. sphaericus*, *E. cloacae*, *Citrobacter freundii*, *M. morgani* и *L. fusiformis*. *B. pumilus* проявил высокую активность в отношении *X. campestris* и *P. atrosepticum*.

Таким образом, выделены штаммы бактерий, ингибирующих рост и развитие различных фитопатогенных микроорганизмов.

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

1. S. J. Xu¹, S. J. Hong, W. Choi, B. S. Kim. Plant Pathol. J., 2014, 30, 102-108.

БИОПЛЕНКА

Хлапова А.А., Середняк А.А.

*Оренбургский государственный педагогический университет, Институт Естествознания и
Экономики, Оренбург
nastia.hlapova@yandex.ru*

Современный этап развития микробиологии характеризуется новыми открытиями. Основными открытиями следует считать установление факта существования бактерий в составе различных сообществ, получивших общее название биопленки.

Биоплёнка – множество (конгломерат) микроорганизмов, расположенных на какой-либо поверхности, клетки которых прикреплены друг к другу с помощью внеклеточного полимерного вещества – матрикса. Способность формировать биопленки является составной частью жизненного цикла большинства микроорганизмов и успешной стратегией защиты бактерий от неблагоприятных факторов среды [1]. Среди всех инфекционных поражений около 65-80% вызываются бактериями, формирующими биопленки. Свойства бактерий в биопленках отличаются от таковых у изолированных клеток, что сказывается на всех аспектах взаимодействия микроорганизма и окружающей среды [2]. Примером защитной функции полимерной пленки является выживание *Salmonella* при хлорировании, что доказывает устойчивость биопленки к данному способу дезинфекции. На сегодняшний день, достоверно доказана роль микробных биопленок в возникновении и развитии таких распространенных заболеваний, как инфекции, связанные с катетеризацией сосудов, вызванные *Staphylococcus aureus* и другими грамположительными микроорганизмами; инфекции сердечных клапанов и суставных протезов, вызываемые стафилококками; пародонтит и тд.

1. Николаев Ю.А., Плакунов В.К., Биопленка – «город микробов» или аналог многоклеточного организма? Микробиология, 76 (2), 2007, С. 149-163.
2. Тец В.В., Артеменко К.Л., Кнорринг Г.Ю., Засловская Н.В. Оценка влияния ферментов и антибактериальных препаратов на бактерии. Российская научно-практическая конференция « Узловые вопросы борьбы с инфекцией» Санкт-Петербург 2004.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ БИОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ТРИПСИНА, ИММОБИЛИЗОВАННОГО НА МАТРИЦЕ ИОНООБМЕННЫХ ВОЛОКОН, И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Холявка М.Г., Сазыкина С.М., Артюхов В.Г.

*Воронежский государственный университет, Воронеж
holyavka@rambler.ru*

Исследования в области создания новых биокатализаторов на основе иммобилизованных ферментов приобретают все большую актуальность. Цель исследования: разработать методику получения гетерогенных биокатализаторов на основе трипсина, иммобилизованного на матрице ионообменных волокон. В качестве объекта исследования был выбран трипсин быка, субстратом для гидролиза служил БСА, носителями для иммобилизации – ионообменные волокна ВИОН КН-1 и АН-1.

Установлено, что на матрице катионита ВИОН КН-1 максимальная сорбция трипсина происходила при использовании 0,05 М трис-глицинового буфера (рН 8,5), 0,05 М трис-НСl буфера (рН около 8,0), 0,05 М глицинового буфера (рН 9,0). Для анионита ВИОН АН-1 оптимальными оказались следующие буферные системы: 0,1 М карбонатный буфер (рН 9,5), 0,05 М глициновый буфер (рН 8,6 и 9,0).

Максимальную удельную активность проявлял препарат трипсина, иммобилизованного на ВИОН КН-1 в 0,1 М карбонатном и 0,05 М КСl-буфере (рН 9,0). При иммобилизации на ВИОН АН-1 удельная активность была максимальна при использовании карбонатного буфера (рН 10,0).

Известно, что оптимум функционирования свободного трипсина соответствует диапазону 37-40 °С и рН 7-8. При иммобилизации на ВИОН АН-1 температурный оптимум соответствовал диапазону температур 42-47 °С, на ВИОН КН-1 (при использовании обоих буферов) – диапазону 40-47 °С. После иммобилизации оптимальный диапазон рН для трипсина, иммобилизованного на ВИОН АН-1, расширялся и составлял 6,0-10,5 с максимумом при 9,5. После сорбции на ВИОН КН-1 также происходило расширение оптимального диапазона функционирования с тенденцией к максимумам при рН 7,0 и 9,0. В обоих случаях наблюдался сдвиг оптимумов рН в более щелочную сторону по сравнению со свободным ферментом.

G-КВАДРУПЛЕКСЫ КАК АГЕНТЫ МУЛЬТИТАРЕНТНОЙ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ

Христич А.Н.^a, Оглоблина А.М.^b, Якубовская М.Г.^b

^a МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва

^b НИИ Канцерогенеза ФГБНУ «РОИЦ им. Н.Н.Блохина», Москва
khristich.a@gmail.com

Новой парадигмой в лечении опухолевых заболеваний является мультитаргетная терапия, принцип которой заключается в использовании препаратов, способных одновременно блокировать несколько сигнальных путей, активированных в опухолевых клетках. Перспективными кандидатами на роль мультитаргетных агентов являются олигонуклеотиды, способные образовывать альтернативные вторичные структуры ДНК: G4-квадруплексы (G4). Многие белки и ферменты имеют сродство к данным структурам, поскольку G4 ДНК и РНК образуются *in vivo* в геномной ДНК, сохраняются после транскрипции на м-РНК и играют важную роль в протекании различных биологических процессов. Целью нашего исследования является поиск G4-олигонуклеотида, способного одновременно ингибировать активность ряда жизненно важных белков, активность которых в опухолевых клетках повышена.

В ходе анализа литературных данных были выявлены такие белки, способные ингибироваться G4: ферменты метаболизма ДНК (Топоизомераза I [1] и Теломераза [2]), сигнальная фосфатаза (Shp2 [3]), ряд транскрипционных факторов (Stat-3 [4], Sp1 [5], Нуклеолин, NF- κ B [6]) и фактор роста сосудов (VEGF).

Также были отобраны G4-олигонуклеотиды, имеющие наименьшие K_d и IC_{50} к вышеперечисленным белкам. После анализа их первичной структуры, были созданы новые G4-олигонуклеотиды с усредненной нуклеотидной последовательностью. Далее мы планируем измерить IC_{50} для всего пула отобранных G4 (24 последовательности) и выбранных белков-мишеней с целью выявить наиболее перспективные олигонуклеотиды. В качестве первого шага была измерена способность каждого G4 ингибировать топоизомеразу I. Исследуемые олигонуклеотиды имели микро- и наномолярные значения IC_{50} ; многие из них оказались более сильными ингибиторами топоизомеразы, чем олигонуклеотид, описанный в вышеупомянутых исследованиях.

1. Li Shuai, Minggang Deng, Dan Zhang, Yangyang Zhou & Xiang Zhou. *J. Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids*, 2012, 29, 841-853.
2. Mergny, J.L., Riou, J.F., Mailliet, P., Teulade-Fichou, M.P. Gilson, *J. Nucleic Acids*, 2002, 30, 839-865.
3. Jia Hu, Jie Wu, Cong Li, Ling Zhu, Wei Yun Zhang, Guiping Kong, Zhongxian Lu, Chaoyong James Yang. *J. ChemBioChem*, 2011, 12, 424-430.
4. Naijie Jing, Yidong Li, Xuejun Xu, Weil Sha, Ping Li, Lili Feng, David J. Tweardy. *J. DNA and Cell Biology*, 2003, 22, 11.
5. Eun-Ang Raiber, Ramon Kranaster, Enid Lam, Mehran Nikan, Shankar Balasubramanian. *J. Nucleic Acids Research*, 2012, 40, 1499-1508.
6. Allicia C. Girvan, Yun Teng, Lavona K. Casson, et al. *J. Mol Cancer Therapy*, 2006, 5, 1790-1799.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОДУКЦИИ ПИОЦИАНИНА БАКТЕРИЕЙ *PSEUDOMONAS AERUGINOSA* НА СРЕДАХ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

Худеева К.А., Токарева Д.Н., Чубик М.В.

Национальный исследовательский Томский Политехнический Университет, Томск
hudeeva@mail.ru

Из-за неконтролируемого приема многие из антибиотиков потеряли свою терапевтическую активность вследствие появления у бактерий резистентности к ним. Поэтому необходим поиск новых антибиотических субстанций. Одной из таких является пиоцианин, темно-синий пигмент, продуцируемый бактерией *Pseudomonas aeruginosa* в процессе естественной жизнедеятельности. Для максимального выделения данного метаболита необходим подбор оптимальных условий пигментообразования.

Цель данного исследования – подобрать оптимальную питательную среду, содержащую вещества, стимулирующие продукцию пиоцианина.

В работе использовался спектрофотометрический метод [1] для определения зависимости концентрации пиоцианина от времени культивирования продуцента. Нами было установлено, что максимальная концентрация пиоцианина достигается на 2 сутки роста *Ps.aeruginosa* (рисунок 1).

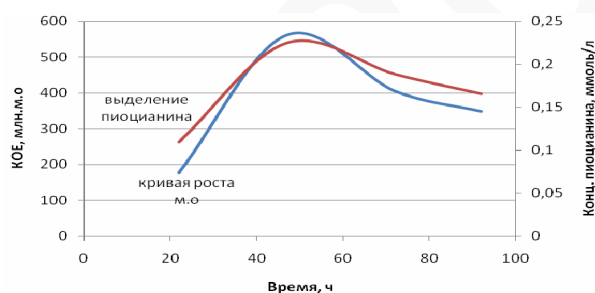


Рисунок 1. График корреляции роста культуры и выделения пиоцианина в зависимости от времени.

Следующим этапом исследования стал подбор подходящей питательной среды. В работе использовались среды различного состава. Концентрация пиоцианина в биомассе определялась фотометрически при длине волны 690 нм. Наиболее оптимальные по составу среды представлены в таблице 1.

Таблица 1. – Продукция пиоцианина в зависимости от состава среды.

№ среды	Состав среды	Концентрация пиоцианина, моль/л
1	ГРМ-бульон	0,210
4	ГРМ+глицин, лейцин, аланин (далее Gly, Leu, Ala) (по 100 мкл)	0,221
13	Среда на глицерине №3 [2]+вода	0,252
16	Среда на глицерине №3+ГРМ	0,238
17	Среда на глицерине №3+вода+Gly	0,321
18	ГРМ+Gly, Leu, Ala (по 300 мкл)	0,214
19	ГРМ+Gly, Leu, Ala (по 200 мкл)	0,227

Для культивирования продуцента пиоцианина в работе были использованы 19 сред различного состава. При культивировании на среде, содержащей глицерин, глицин, аланин и лейцин, концентрация пиоцианина в биомассе оказалась максимальной (0,321 моль/л). Вероятно, что композиция аминокислот в сочетании с глицерином, содержащаяся в питательной среде является стимулятором для продукции пиоцианина.

- Кузнецова М.В., Карпунина Т.И., Щербакова Ю.К., Сторчеус Л.Н. // МедиАль. 2013. №2. 7. 12-15
- MacDonald J.C.// Canadian Journal of Microbiology. 1966. № 12. 771-774

МОДИФИКАЦИЯ РЕГУЛЯТОРНЫХ ОБЛАСТЕЙ ПРОМОТОРА ГЕНА СУБТИЛИЗИНОПОДОБНОЙ ПРОТЕИНАЗЫ *BACILLUS PUMILUS* 7P

Черёмин А.М., Шарипова М.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
andrey4eremin@mail.ru

Сериновые протеиназы бактерий играют важную роль в жизнедеятельности микроорганизмов, а также представляют интерес в использовании в промышленности и медицине. Бактерии *Bacillus pumilus* при истощении питательных веществ секретируют в среду сериновую субтилизиноподобную протеиназу, которая составляет 70% от общего количества всех внеклеточных протеиназ. Синтез ферментов деградации контролирует двухкомпонентная система сигнальной трансдукции DegS-DegU. Целью настоящей работы явилось повышение экспрессии гена *aprBp* субтилизиноподобной протеиназы *B. pumilus* путем модификации его промотора. Методом сайт-направленного мутагенеза в промоторе гена *aprBp* были изменены два потенциальных регуляторных сайта взаимодействия с фактором транскрипции DegU-P до известной консенсусной последовательности – GNCATTTAn(n)GNCATTTA. Нативный (неизмененный) промотор использовали в качестве контроля. Модифицированные промоторы клонировали в вектор, содержащий репортерный ген *lacZ*, и трансформировали в реципиентный штамм *B. subtilis* 168. Методом ПЦР в режиме реального времени было показано, что при модификации одного из регуляторных сайтов уровень мРНК гена *lacZ* увеличился в 53 раза относительно контроля. Таким образом, в результате модификации промоторной области гена субтилизиноподобной протеиназы *B. pumilus* получили повышение экспрессии этого белка. Разработанный метод с модификацией промоторной области гена может быть применен при создании штаммов с повышенной экспрессией гетерологичного белка без изменения его первичной структуры. Работа выполнена в рамках государственной программы повышения конкурентоспособности Казанского (Приволжского) федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект №14-83).

РОЛЬ И ЗНАЧЕНИЕ БИОТЕХНОЛОГИЙ В МЕДИЦИНЕ

Чигрин Е.А.

*Волгодонский институт (филиал) ЮФУ, Волгодонск
sun.feel.ice@mail.ru*

Развитие биологии с середины XX столетия привело к глубочайшим переменам, которые обусловлены появлением биотехнологий. **Биотехнология** – это совокупность методов для придания биологическим объектам заданных свойств с целью использования в разных отраслях производства [3].

Сегодня круг приложений биотехнологии достаточно широк и включает такие **направления**, как [1]: пищевая, фармацевтическая, химическая, нефтегазовая промышленность; сельское хозяйство; экология; энергетика. Особое значение имеет применение биотехнологий в медицине. В этой отрасли они базируются на использовании генно-инженерных микроорганизмов или клеток многоклеточных растений и животных [2]. С помощью биотехнологий получают такие важнейшие продукты, как витамины, аминокислоты (валин, гистидин, лизин), органические кислоты (уксусная, лимонная, D-глюконовая), а также антибиотики (пенициллин), стероиды, гормоны (инсулин) и ферменты (энзимы).

Немаловажную роль биотехнологии играют и в получении микробных иммунобиологических препаратов – вакцин, иммунных сывороток и диагностикумов. **Диагностические сыворотки** (диагностикумы) представляют собой взвесь убитых бактерий определенного вида (напр., брюшнотифозный диагностикум). Диагностикумы предназначены для качественного и количественного определения соответствующих иммуноглобулинов в сыворотке крови с диагностической целью [3].

С развитием биотехнологии тесно связано новое направление медицинской науки – **молекулярная наномедицина**. С ней связывают такие уникальные вещи, как: лаборатории на чипе; адресная доставка лекарств к пораженным клеткам; новые бактерицидные и противовирусные средства; диагностика заболеваний с помощью квантовых точек; нанороботы для ремонта поврежденных клеток [3]. Например, мысль о создании специальных медицинских нанороботов принадлежит Роберту Фрайтасу. Предполагается, что они будут сделаны из алмазоида или другого биосовместимого материала, а биологическое питание будут получать из глюкозы и кислорода. Задача будущих нанороботов – это и борьба с болезнетворными микробами, и регулярная «чистка» и укрепление сосудов, предотвращающая болезни типа атеросклероза, варикозного расширения вен и т.д., и автоматическое лечение поврежденных клеток, и даже замена больных генов здоровыми. Фрайтас разработал несколько проектов медицинских нанороботов: **респироциты** (аналоги эритроцитов), **клоттоциты** (аналоги тромбоцитов), **микрофагоциты** (искусственные иммунные клетки) [3].

Таким образом, сегодня биотехнологии помогают решать ряд проблем практического характера в медицине (и не только), они все смелее входят в нашу жизнь как важнейший элемент общечеловеческой культуры.

1. Егорова Т.А. Основы биотехнологии. – М.: Издательский центр «Академия», 2003. С. 5-6.
2. Иванищев В.В. От биотехнологии к нанотехнологии. Известия Тульского государственного университета, 2008. С. 208-215.
3. Рыбалкина М. Нанотехнологии для всех. Большое – в малом, 2005. С. 276-292.

МЕТИЛЕНОВЫЙ ГОЛУБОЙ КАК СЕНСИБИЛИЗАТОР ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ: МОЛЕКУЛЯРНО-КЛЕТОЧНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ДЕЙСТВИЯ

Шабанов Д.И., Лысенко Ю.А., Артюхов В.Г.

Воронежский государственный университет, Воронеж
am7d@mail.ru

Синтезированный в конце XIX века Г. Каро и впервые примененный в области биологии и медицины П. Эрлихом тиазиновый краситель – метиленовый голубой (МГ) – претерпел «второе рождение» в конце XX – начале XXI века [1]. В настоящее время это соединение рассматривают, в частности, в качестве эффективного сенсibilизатора для фотодинамической терапии ряда заболеваний, в том числе опухолевой этиологии. Одним из препятствий на пути его системного применения является способность МГ легко восстанавливаться до фотохимически неактивной лейкоформы (ЛМГ) путем окисления восстановительных эквивалентов (НАД(Ф)Н и др.) при введении в кровь. Однако это не исключает его местного и аппликационного применения. Также разрабатываются различные способы инкапсулирования этого вещества с целью уменьшения образования ЛМГ и обеспечения направленной доставки в клетки-мишени. С целью детализации механизмов сенсibilизирующего действия МГ нами исследованы изменения структурно-функциональных свойств биологических макромолекул основных классов (белков-ферментов – на примере лактатдегидрогеназы), нуклеиновых кислот – ДНК, выделенной из клеток асцитной карциномы Эрлиха (АКЭ), РНК из дрожжей), а также клеток различных типов (АКЭ, спленоциты, эритроциты и их компоненты) в условиях их темновой инкубации в присутствии МГ и облучения красным светом (665 нм) в различных дозах в смеси с фотосенсibilизатором. Помимо этого исследованы изменения: кинетики роста в организме мышей АКЭ, облученной перед имплантацией; а также параметров крови в процессе пролиферации фотомодифицированной опухоли. Нами показано, что облучение вышеназванных биообъектов в присутствии МГ вызывает инактивацию ферментов, индуцирует гибель клеток, а также способствует модуляции иммунного ответа мышей с инокулированной фотомодифицированной суспензией АКЭ.

1. P.R. Ginimuge, S.D. Jyothi. J. Anaesthesiol. Clin. Pharmacol., 2010, 26(4), 517-520.

УСТОЙЧИВОСТЬ ЭНТЕРОБАКТЕРИЙ К ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА

Шайдуллина Э.Р., Марданова А.М.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
aoisora86@gmail.com*

Устойчивость патогенных бактерий к активным формам кислорода может быть обусловлена различными механизмами. Помимо участия ферментов класса пероксидаз и каталаз предполагается, что важный вклад в антиоксидантную защиту могут вносить различные эффлюкс системы бактерий и в частности MacAB-система, играющая роль в вирулентности *E.coli* и *Salmonella*.

Настоящая работа посвящена сравнительному анализу устойчивости к H₂O₂ различных видов условно-патогенных энтеробактерий: *Providencia stuartii*, *Proteus mirabilis*, *Pantoea vagans*, *Morganella morganii*. Бактерии культивировали на среде LB с добавлением H₂O₂ в конечных концентрациях 0,5-20 мМ и определяли оптическую плотность культуры. Об устойчивости судили по продолжительности лаг-фазы и способности бактерий восстанавливать рост в течение 6-часового культивирования.

Было выявлено, что наименее устойчивым штаммом является *P. stuartii*, рост которого полностью ингибировался после внесения 2 мМ H₂O₂. Бактерии восстанавливали рост на 3-й час при внесении 0,5 мМ H₂O₂. Рост бактерий *P. vagans* восстанавливался на 3-й час при внесении 1 мМ H₂O₂ и полностью ингибировался в присутствии 5 мМ H₂O₂. Наиболее устойчивыми являются штаммы *P. mirabilis* и *M. morganii*, которые восстанавливали рост на 3-й час при внесении в среду 2 мМ H₂O₂. Рост *P. mirabilis* полностью ингибировался в присутствии 15 мМ H₂O₂. Показана высокая выживаемость *M. morganii*, рост которых не ингибировался полностью даже в присутствии 20 мМ H₂O₂. Проведен биоинформационный поиск гомологов белков MacA и MacB эффлюкс системы *S. Tiphimurium* LT-2 с помощью баз данных ASAP (<https://asap.genetics.wisc.edu/asap>) и NCBI (<http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi>) и программы BLAST. Показали, что в геномах *P. stuartii*, *P. mirabilis* и *M. morganii* имеются гены, кодирующие белки с идентичностью 55-59% к MacA *S. Tiphimurium* LT-2. В геноме *P. vagans* обнаружен гомолог с 25% идентичностью по аминокислотной последовательности. Гомология белков-ортологов MacB составила 63-65% для *M. morganii*, *P. stuartii* и *P. mirabilis*. В геноме *P. vagans* гомолог MacB *S. Tiphimurium* LT-2 не обнаружен.

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА(III) С 2,6-ДИОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТОЙ В ОРГАНИЗОВАННЫХ СРЕДАХ

Шайымова Ю.Р., Каримова Г.Р., Солодов А.Н., Зиятдинова А.Б., Амиров Р.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
annette_zb@mail.ru*

В последнее время все большее распространение получили биосенсоры на основе комплексов металлов, закрепленных на поверхности электродов за счет множественных нековалентных взаимодействий. В качестве модельных металлокомплексных частиц в таких супрамолекулярных структурах удобно использовать комплексы железа(III) с производными салициловой кислоты, для которых возможно контролировать состав в зависимости от кислотности среды и соотношения металл:лиганд по их оптическим спектрам.

В докладе представлены результаты исследования системы Fe(III) - 2,6-диоксибензойная кислота в воде и в присутствии органических катионов. В качестве последних использовали катионные полимеры (полиэтиленимин PEI и хлорид поли-(диаллил-N,N'-диметиламмония PolyDADMAC), а также ПАВ на основе четвертичных солей аммония (DPyB, DePyB, СТАВ). В качестве основного метода исследования выбран метод спектрофотометрии (UV-mini 1240, Shimadzu). В качестве дополнительного инструмента использовали метод ЯМР-релаксации (ЯМР релаксometре Minispec MQ20 Bruker, рабочая частота 19.75 МГц). В ходе работы определены константы устойчивости, СФ- и ЯМР-релаксационные параметры комплексов состава $[FeHL]^+$, $[Fe(HL)_2]^-$, $[Fe(HL)_3]^{3-}$. Установлено, что добавки PolyDADMAC «стимулируют» образование бис- и трис-комплексов 2,6-DHB с Fe(III) в более кислой среде, по сравнению с водой. Для PEI в кислой области обнаружен прямой переход комплекса $[FeHL]^+$ в $[Fe(HL)_3]^{3-}$. В щелочной среде вследствие потери катионного характера полиэтиленимина обнаружено замещение одного аниона 2,6-DHB хелатным фрагментом PEI (NN) с образованием разнолигандного комплекса $[Fe(HL)_2(NN)]^-$.

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

КЛОНИРОВАНИЕ ГЕНА ПРОТЕИНАЗЫ HtrA В СИСТЕМУ pGP382

Шарафутдинов И.С., Гайнутдинова З.Р., Чернова Л.С., Каюмов А.Р.

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
irwad@yandex.ru

В настоящее время одной из актуальных проблем в современной медицине является создание перевязочных средств с применением, в виде активного вещества, иммобилизованных протеиназ. Одним из перспективных решений этой задачи является использование температурозависимой протеиназы HtrA, имеющей высокую специфичность к поврежденным или неправильно локализованным белкам. В связи с этим, была поставлена задача клонировать ген белка HtrA из клеток *B.subtilis* 168 в экспрессирующий шаттл-вектор pGP382, который способен к транскрипции в клетках, как *E.coli*, так и *B.subtilis*. Данный вектор несет сильный конститутивный промотор P_{degQ}, поддерживающий постоянную гиперэкспрессию белка. Таким образом, полученная конструкция позволит изучить роль белка HtrA в клетках *B.subtilis* 168 с одной стороны, и синтезировать данный белок в препаративных количествах для изучения его свойств *in vitro* в клетках *E.coli*, с другой стороны.

Методом ПЦР синтезировали фрагмент ДНК, несущий кодирующую часть гена *htrA*, фланкированный рестрикционными сайтами HindIII. Полученный фрагмент ДНК клонировали в вектор pJET1.2 blunt, откуда затем вырезали и получали ген-вставку с «липкими» концами. Плазмиду pGP382, после рестрикции по сайту HindIII, дефосфорилировали, чтобы во время лигирования предотвратить залипание вектора самого на себя. Далее, полученные фрагменты лигировали, и трансформировали лигазной смесью клетки *E.coli* XL-1 blue. Селекцию клеток трансформантов проводили на питательной среде с ампицилином. Также методом ПЦР проверяли наличие и направление вставки гена *htrA* в плазмиде pGP382.

Таким образом, была получена генетическая конструкция, обеспечивающая гиперпродукцию белка HtrA в клетках *E.coli* и *B.subtilis* 168.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-04-31635 мол_а.

АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ МИКРООРГАНИЗМОВ РОДА *LACTOBACILLUS*

Шаяхметова З.Т.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
sabirova91@bk.ru*

Лактобациллы являются важным компонентом нормальной микрофлоры человека и животных. Кроме того, лактобациллы находят применение в производстве продуктов функционального питания, в сельском и домашнем хозяйстве. В настоящее время получены данные, свидетельствующие об антигенотоксических и антиоксидантных свойствах представителей рода *Lactobacillus*.

Целью настоящей работы явилось исследование антиоксидантной активности представителей рода *Lactobacillus*, применяемых в производстве молочнокислых продуктов.

В работе использованы 6 штаммов лактобацилл, выделенных из кисломолочных продуктов («Простокваша Мечниковская», «Віо Баланс», «Actimel», «Ацидофилин», «Наринэ») и препарата «Лактобактерин сухой».

Объектами исследования служили образцы культуральной жидкости, интактных клеток в фосфатном буфере, супернатанта суспензии клеток лактобацилл, разрушенных ультразвуком. Для оценки зависимости антиоксидантной активности от возраста культуры исследуемые образцы готовили на 4-ый и 16-ый часы культивирования штаммов.

Антиоксидантную активность исследуемых образцов определяли согласно методу Главинда по ингибированию свободных радикалов 1,1-дифенил-2-пикрилгидразида (ДФПГ).

Установлено, что все 6 штаммов рода *Lactobacillus*, исследованные в работе, обладают антиоксидантной активностью. Наивысшая антиоксидантная активность (85%) обнаружена у культуральной жидкости штамма *Lactobacillus sp.* 10, выделенного из простокваши Мечниковской (ОАО Валин Татарстан).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что антиоксидантный потенциал штаммов лактобацилл зависит от возраста культуры. Самый высокий процент ингибирования свободных радикалов 1,1-дифенил-2-пикрилгидразида (72-85%) обнаружен у образцов 16-часовых культур исследованных штаммов лактобацилл.

РОЛЬ ЭФФЛЮКС-СИСТЕМЫ MACAB В ЗАЩИТЕ *SERRATIA MARCESCENS* ОТ АНТИБИОТИКОВ

Ширшикова Т.В.^a, Шарипова М.Р.^a, Богомольная Л.М.^b

^a Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань

^b Техасский Аграрно-Технический Университет, г. Колледж Стейн, Техас, США
tatyana-shirshikova@yandex.ru

Представители рода *Serratia* способны вызывать полный спектр клинических заболеваний. Лечение таких инфекций часто затруднено из-за множественной антибиотикоустойчивости бактерий [3]. Одним из механизмов, обеспечивающих клеткам *S. marcescens* повышенную устойчивость к широкому спектру антибиотиков, является их удаление из клеток с помощью эффлюкс систем. Проведенный биоинформационный анализ геномной последовательности *S. marcescens* позволил выявить новую эффлюкс систему ABC-типа [1]. Эта система не изучена у представителей рода *Serratia*, но гомологична MacAB системе *E. coli*, защищающей клетки от эритромицина и других антибиотиков класса макролидов [2].

Целью нашего исследования стало определение устойчивости к антибиотикам дикого штамма *S. marcescens* и мутанта по генам *macAB* с помощью диско-диффузионного метода.

Чувствительность к антибиотикам определялась с помощью коммерческих стандартизированных дисков (производство ФБУН НИИ эпидемиологии и микробиологии имени Пастера, г. Санкт-Петербург). Использовали бактериальную суспензию ночной культуры плотностью 0.5 единиц по стандарту Мак-Фарланда. После аппликации дисков чашки инкубировали при температуре 37 °С в течение 18-24 ч. Учет результатов проводили при измерении зон полного подавления видимого роста [МУК 4.2.1890-04; 2004].

По данным литературы, штаммы *S. marcescens* являются устойчивыми к нитрофурантоину и имеют переходную устойчивость к аминогликозидам [3]. Нами было показано, что мутантный штамм *S. marcescens* SR41-8000 стал, по сравнению с переходным по чувствительности диким типом, чувствительным к таким АБП, как канамицин, гентамицин, которые относятся к классу аминогликозидов I и III поколения, соответственно; а также к нитрофурантоину, относящегося к классу нитрофуранов.

Таким образом, в отличие от MacAB эффлюкс системы *E. coli*, ее гомолог в *S. marcescens* защищает бактерии от аминогликозидов и нитрофуранов.

1. Bogomolnaya, L.M. An ABC-type efflux pump MacAB is involved in protection of *Salmonella enterica* serovar Typhimurium from Oxidative stress [Text] / L. M. Bogomolnaya, K. D. Andrews, M. Talamantes, A. Maple, Y. Ragoza, A. Vazquez-Torres, H. Andrews-Polymeris // mBio. – 2013. – V. 4 (5). – e00630-13. – Doi:10.1128;
2. Kobayashi, N. Novel macrolide-specific ABC-type efflux transporter in *Escherichia coli* [Text] / N. Kobayashi, K. Nishino, A. Yamaguchi // J. Bacteriol. – 2001. – V. 183. – P. 5639-5644;
3. Mahlen S. D. *Serratia* infections: from military experiments to current practice [Text] / S. D. Mahlen // Clin. Microbiol. Rev. – 2011. – V. 24. – N.4. – P. 755-783.

МОДЕЛЬ БИОРЕАКТОРА ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД

Шистерова Ю.Б., Шистеров Р.В., Пономарев В.Я., Юнусов Э.Ш.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань
v.y.ponomarev@gmail.com*

Очистка сточных вод от органических загрязнений является одной из важнейших проблем современной цивилизации. Биологические методы удаления загрязнений общепризнанно считаются наиболее экономически эффективными и экологически приемлемыми.

Целью работы является разработка программного комплекса, математически описывающего динамику накопления биомасс в биореакторе, потребления соответствующих субстратов и выделения биогаза на примере реакторов в которых осуществляется пространственное разделение стадий кислого и метанового брожения.

На основании модифицированной математической модели Эндрюса-Граефа нами был разработан программный продукт, позволяющий описывать частные аспекты динамики процесса анаэробной переработки сточных вод. Модель позволяет рассмотреть два типа нарушения режима работы метантенков: органическую и гидравлическую перегрузки. Если величина возмущения достаточно мала, то система вскоре переходит в новое устойчивое стационарное состояние, параметры которого близки к параметрам начального стационарного состояния. Более глубокие изменения состава или количества поступающего в систему субстрата вызывают серьезные нарушения хода процесса, а также резкое повышение концентрации летучих кислот в конечном продукте.

Согласно используемой модели в процессе анаэробной очистки сточных вод с пространственным разделением стадий на первой стадии (первая ступень очистки) происходит быстрое накопление кислотогенной биомассы и вымывание метаногенной биомассы. Начальный субстрат потребляется кислотогенной биомассой и накапливается продукт жизнедеятельности кислотогенной биомассы – ацетат. На второй стадии, благодаря поддержанию в системе скорости разбавления, не превышающей скорость роста метанобразующих бактерий, происходит прирост метаногенной биомассы. Кислотогенная биомасса на второй стадии прирастает не так интенсивно, что связано с изменениями факторов среды и потреблением кислотогенного субстрата на первой стадии. На второй стадии происходит резкий первоначальный скачок концентрации метаногенного субстрата, соответствующий его накоплению в системе, а затем его потребление развивающейся метаногенной биомассой, а также продуцирование биогаза метанобразующими бактериями. Активное продуцирование биогаза происходит только на второй стадии, что хорошо согласовывается с теорией фазового разделения.

ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НОВЫХ СТАРТОВЫХ КУЛЬТУР ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ПРОЦЕССА СОЗРЕВАНИЯ ФЕРМЕНТИРОВАННЫХ КОЛБАС

Шниц Е.О., Пономарев В.Я., Китаевская С.В.

Казанский национальный технологический университет, Казань
v.y.ponomarev@gmail.com

Целенаправленное использование микроорганизмов способствует получению стабильного качества готового продукта. Технологическое действие микроорганизмов связано с образованием специфических биологически активных компонентов: органических кислот, ферментов, витаминов и других, что способствует улучшению санитарно-микробиологических, органолептических показателей готового продукта, а также позволяет интенсифицировать производственный процесс.

Несмотря на достаточно обширный теоретический и экспериментальный материал, накопленный в настоящее время исследователями, применение стартовых культур при производстве мясопродуктов, представляет научный и практический интерес.

Целью данной работы являлась разработка перспективных направлений применения стартовых культур микроорганизмов для повышения качества мяса с признаками DFD и изготовленных из него мясопродуктов.

Объектами исследования служили опытные образцы колбасных изделий. В качестве контрольных образцов использовали образцы колбасных изделий, полученные с использованием коммерческого препарата стартовых культур, используемого при выработке ферментированных мясопродуктов.

Для исследований было выбрано три вида молочнокислых заквасок – *Lactobacillus plantarum*, закваски на основе штаммов микроорганизмов *Bifidobacterium bifidum*, *Lactobacillus casei*.

большинство исследуемых бакпрепаратов при введении их в рецептуру сыровяленых мясных изделий дали положительное эффективное влияние на технологические и органолептические характеристики готового продукта. Наилучшим образом показала себя закваска молочнокислых микроорганизмов *Lactobacillus casei*. Показано, что внесение данной закваски значительно интенсифицирует процесс сушки, что немаловажно для процесса созревания сыровяленых колбас и благоприятно сказывается на качестве готовой продукции. Следует отметить, что для мяса DFD этот штамм микроорганизмов показал наилучшие результаты, что позволяет использовать его при выработке сыровяленой продукции из мясного сырья с изначально высокими значениями рН. Данные результаты представляют особую ценность, учитывая то, что мясное сырье с признаками DFD в настоящее время не рассматривается как сырье для ферментированных мясопродуктов, так как его использование не гарантирует высокого качества готовой продукции.

**СЕКЦИЯ 2 НЕФТЕРАЗРАБОТКА,
НЕФТЕПЕРЕРАБОТКА И НЕФТЕХИМИЯ**

ПРЕДОТВРАЩЕНИЕ ВЫНОСА ПЕСКА НА СКВАЖИНАХ ПХГ

Абсатдаров Р.Н.

*РГГРУ имени Серго Орджоникидзе, Кафедра современных технологий бурения скважин, Москва
absatdarov.ramil@mail.ru*

В работе рассматриваются причины, последствия, а также наиболее эффективный способ предотвращения выноса песка на скважинах ПХГ.

Из экономических соображений темп закачки-отбора газа предельно высокий, ПХГ закладываются в высокопроницаемых пластах. Но, как правило, эти пласты сложены мелкозернистым слабосцементированным песчаником и алевролитами. При циклическом характере эксплуатации возникают знакопеременные градиенты давления, приводящие к разрушению структуры породы. Коллектор ПХГ сообщается с наземным транспортным узлом через эксплуатационные скважины. Пространство вокруг этих скважин, называемое призабойной зоной пласта (ПЗП), разрушается в первую очередь, а продукты разрушения в виде песка могут поступать в ствол скважины, что ведет к абразивному износу оборудования, эрозии фонтанной арматуры, пробкообразованию в стволе скважины.

Кроме того, проблема предотвращения выноса песка вследствие разрушения пласта-коллектора в призабойной зоне имеет первостепенное значение в комплексе мероприятий по увеличению дебита скважин, повышению эффективности эксплуатации скважин, сокращению затрат на текущий и капитальный ремонт скважин.

За рубежом и в России используются различные методы и средства по предотвращению выноса песка и закреплению призабойных зон скважин.

К средствам и методам предупреждения разрушения призабойной зоны и выноса песка, используемым на скважинах ПХГ, предъявляются более высокие требования, чем в скважинах на газовых месторождениях. Это объясняется циклической работой скважин, сопровождающейся резкими изменениями давления, температуры и влажности.

Для защиты скважины от проникновения продуктов разрушения наибольший эффект дает установка гравийных фильтров, которые весьма успешно работают в добывающих скважинах. В работе рассматривается эффективность использования гравийных фильтров на скважинах ПХГ.

СЕЙСМОГЕОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АНАЛИЗ ИСТОРИИ ТЕКТОНИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ ЮБИЛЕЙНОГО И ЯМСОВЕЙСКОГО ПОДНЯТИЙ

Агашева М.А.

*Московский государственный университет, Москва
Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А.Трофимука СО РАН, Новосибирск
mariyaagasheva@gmail.com*

Работа посвящена изучению структурно-тектонических особенностей Юбилейного и Ямсовейского поднятий, расположенных в пределах Ямало-Ненецкого АО. Актуальность работы заключается в разработке сейсмических и тектонических критериев газоносности меловых отложений в Западной Сибири и в дальнейшем применении их на слабоизученных площадях. В ходе работы была получена авторская модель строения Юбилейного и Ямсовейского поднятий, к которым приурочены одноименные крупные газовые месторождения.

Основой работы послужили 130 профилей МОГТ, данные ГИС по 45 скважинам. В ходе исследования выполнена корреляция основных отражающих сейсмических горизонтов (Б, М, Г, С), разделяющих сейсмологические комплексы: берриас-аптский, альб-туронский, коньяк-раннепалеоценовый, палеоцен-четвертичный [1].

Анализ структурно-тектонического строения и истории тектонического развития района исследований показал, что Ямсовейская и Юбилейная структуры не приурочены к древним эрозионно-тектоническим выступам. Они начали формироваться только в конце сеномана и окончательно были сформированы в кайнозойское время.

1. Конторович В.А. Мезозойско-кайнозойская тектоника и нефтегазоносность Западной Сибири, Геология и геофизика, 2009, т. 50, № 4, с. 461-474.

УСЛОВИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕСЧАНЫХ ПОРОД ПЛАСТА ПК1 ПОКУРСКОЙ СВИТЫ НА ЗАПОЛЯРНОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ (ЯНАО)

Баркалова А.М.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
V.Alexandra1992@yandex.ru*

Цель исследований – уточнение геологического строения и выяснение особенностей формирования продуктивного пласта ПК1 на Заполярном газоконденсатном месторождении, расположенном на территории Тазовского района Ямало-Ненецкого автономного округа Тюменской области.

По литологическому составу и условиям образования отложения пласта ПК1 разделены на пять песчаных пропластков, разделенных глинисто-углистыми прослоями и проиндексированных снизу вверх по разрезу как ПК₁⁵ – ПК₁¹. В каждом пропластке описана последовательность изменения литологического и гранулометрического состава, выявлены и охарактеризованы генетические признаки пород.

Генетическими особенностями отложений являются: терригенный состав; в нижней части (пласты ПК₁⁵ и ПК₁⁴) – сочетание косой разнонаправленной и волнистой слоистости; обилие углефицированного растительного детрита, корневых остатков, и донных животных; в верхней части (пласты ПК₁³, ПК₁² и ПК₁¹) – в основном волнистая слоистость, следы жизнедеятельности донных животных. Выявленные признаки свидетельствуют о морском режиме бассейна осадконакопления

Морской режим доказывается расположением фигуративных точек песчаников пластов ПК₁⁵ и ПК₁⁴ на динамогенетической диаграмме Г.Ф. Рожкова (асимметрия – эксцесс) в пределах поля 8, что связано с прибрежными фациями открытых акваторий, выходом волн на мелководье, мощным накатом-прибоем, где скорость динамической пересортировки превышала скорость привноса обломочного материала; пластов ПК₁² и ПК₁¹ – в поле 7, свидетельствующее о том, что формирование осадков связано с прибрежно-морскими фациями, накопление песчаного материала осуществлялось в пределах нейтральной полосы побережья, в условиях действия волновых процессов на мелководье. На диаграмме Р. Пассеги большинство точек попадает в зону 10, что также отражает динамические условия прибрежно-морских фаций – приподнятых частей шельфа.

На основании вышеизложенного установлены прибрежные (пласты ПК₁⁵ и ПК₁⁴) и прибрежно-морские (пласты ПК₁³, ПК₁² и ПК₁¹) условия формирования отложений.

СЕДИМЕНТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ НИЖНЕПЕРМСКИХ КАРБОНАТНЫХ РЕЗЕРВУАРОВ ИШИМБАЙСКОЙ ПЛОЩАДИ ЗАПАДНОГО БОРТА ПРЕДУРАЛЬСКОГО КРАЕВОГО ПРОГИБА

Баяндиева А.Б.

*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, геологический ф-т, кафедра Геологии и геохимии горючих ископаемых, Москва
abayandieva@gmail.com*

Стерлитамакские шиханы в связи с открытием нефтегазоносных месторождений Ишимбайского типа, заинтересовали геологов, как естественное обнажение пород, которые в погребенных рифах являлись коллекторами. Ведь понимание особенностей формирования шиханов, отраженных в латеральной и вертикальной фациальной зональности рифовых тел, является основой прогноза архитектуры, состава и свойств их погребенных аналогов, содержащих залежи нефти и газа [1].

И поэтому цель моей работы на основе изучения особенностей формирования шиханов, объяснить неравномерное распределение коллекторских свойств в Ишимбайском месторождении.

На Ишимбайском нефтяном месторождении промышленно нефтеносными являются органогенные карбонатные коллектора. Продуктивные пачки по строению крайне неоднородные, прослой коллекторов представляют собой линзы различной конфигурации и простирания, в теле рифового массива распространены хаотично, также хаотична гидродинамическая связь между линзами [2]. Для понимания распределения коллекторов и их прогнозирования, необходимо понять особенности формирования этой рифовой постройки. Для этого мы изучили аналог этой постройки на поверхности – шихан Тратау.

Во время полевой экскурсии в Башкирии с шихана Тратау были отобраны образцы вдоль профилей, профилей было пять: четыре профиля параллельно гребню рифа, и один поперек него.

Проанализировав эти профили были выделены ландшафтно-морфологические элементы шихана Тратау, которая основана на фациальной изменчивости различных по структуре известняков шихана, такие же зоны были выделены в Ишимбайском месторождении и сделаны некоторые выводы: наилучшими коллекторами в рифогенных нефтегазоносных объектах являются фации рифового плато, по нескольким причинам: во-первых, в этих фациях процентное содержание цементирующих организмов меньше чем каркасостроителей, и сами каркасостроители представлены более ветвистыми видами, чем в других частях рифа, за счет чего образуется больше первичной пористости. Во-вторых, из-за кратковременных обмелений и осушений, которые характерны именно этой части рифа, образуются трещины усыхания и микроразмывы.

1. Ахманов Г.Г., Жемчугова В.А., Коробова Н.И. и др. Типовые разрезы девона, карбона и перми на западном склоне Южного Урала: Путеводитель полевой экскурсии, Москва, 2013.
2. Утяшев А.М. Проекты разработки нефтяных месторождений: Уточненная технологическая схема разработки Ишимбайского нефтяного месторождения, Уфа, Башнипинефть, 2010.

УТОЧНЕНИЕ МОДЕЛИ ГЕОЛОГИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ УРЕНГОЙСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ ПЕСЦОВОЙ ПЛОЩАДИ

Бокова Н.В.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань
natalya_bokova@bk.ru*

Уренгойское газовое месторождение – супергигантское газовое месторождение, третье в мире по величине газовых запасов, которые превышают 10 триллионов м³, расположено в ЯНАО.

Исходные материалы: данные методов ГИС[4]; структурные карты продуктивного пласта сеноманского яруса[1]; карты и заключения по положению газодляного контакта (ГВК) с 2010 по 2013 года[3]; данные дебита и пластового давления[2]; топографическая карта Лист Q-43-044. По данным интерпретации каротажных диаграмм и по данным инклинометрии были построены модели скважин, в которых стволы скважин отображают не только геометрию скважин, но и послойное строение разреза по стратиграфии, по литологии, по коллекторскими свойствам. Первичный скважинный материал также использовался для построения карт дебита и пластового давления. В пределах небольшого участка наблюдается значительные колебания пластового давления и дебитов, что свидетельствует о сложности геологического строения и неодинаковых условиях эксплуатации скважин.

По геофизическим данным был собран материал по положению ГВК за 4 года после эксплуатации месторождения. По поверхностям ГВК прослеживается разница между максимальным и минимальным положением порядка 20м. Обобщая все модели, выделяются две аномальные зоны:

1. В центральной части аномальное положение ГВК выделяется в виде минимума уже на второй год эксплуатации и к 2013 году опускание увеличивается. Причина: в данном месте проводятся нагнетание воды в скважину для увеличения притока газа и поддержания пластового давления. По картам дебита и пластового давления оба параметра на данном участке имеют максимальное значение.

2. Аномальное положение ГВК в восточной части площади с самого начала эксплуатации выделяется в виде стабильного минимума. Такое поведение закачкой и поддержкой пластового давления объяснить невозможно. Совмещая с данными геоморфологического анализа можно предположить, что это отдельный тектонический блок, который опущен по отношению к соседним, соответственно ГВК становится глубже. Таким образом, в пределах площади газовые залежи нельзя считать единым целым, а представления о модели месторождения требуют уточнения.

В результате была построена модель с учетом неотектонических построений, в которой залежь разбита на блоки, один из которых опущен. ГВК также претерпевает разрыв.

1. Геологический отчет по Уренгойскому месторождению Песцовой площади, 2013 г.
2. Отчет о научно-исследовательской работе: Проект разработки газоконденсатных залежей и нефтяных оторочек нижнемеловых отложений Уренгойского нефтегазоконденсатного месторождения (раздел «Геолого-геофизическая характеристика месторождения»), Тюмень 2007 г.
3. Проблемы освоения месторождений Уренгойского комплекса. Москва Недр 2003 г.
4. Промыслово-геофизические исследования скважин Песцовой площади, 2010 г.

ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК АЛЮМООКСИДНОГО НОСИТЕЛЯ НА СВОЙСТВА НАНЕСЕННЫХ ЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ И ИХ АКТИВНОСТЬ В РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ 1,3-БУТАДИЕНА

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

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
ger-avg91@mail.ru*

Каталитические системы, как правило, представляют собой нанесенный на оксид алюминия палладий. При этом свойства нанесенных частиц металла в таких системах определяются в основном двумя факторами: собственно размер самих частиц и взаимодействие «металл-носитель». Последнее возникает на стадии нанесения металлокомплекса и его закреплении на кислотно-основной поверхности алюмооксидного носителя.

Целью данной работы является изучение влияния кислотно-основных характеристик алюмооксидного носителя на механизм формирования электронных и геометрических свойств нанесенных частиц палладия.

В качестве способа изменения силы и количества кислотно-основных центров носителя был выбран метод модифицирования гидроксида алюминия псевдобемитной морфологии уксусной кислотой, с последующей термообработкой для получения γ -оксида.

Согласно результатам текстурного анализа, модификация исходного гидроксида алюминия приводит к увеличению доли мелких пор с одновременным увеличением удельной поверхности и порометрического объема пор. Суммарная кислотность образцов оксидов алюминия, оцененная методом термопрограммированной десорбции аммиака, увеличивается для модифицированного образца в 1,5 раза, что обусловлено ростом дефектности кристаллической структуры оксида. Это приводит, согласно результатам метода термопрограммированного восстановления водородом, к более сильному взаимодействию кислотно-основных центров обработанного носителя с нанесенными частицами палладия с формированием электронно-дефицитных поверхностных атомов активного компонента. Это обуславливает рост конверсии диенового углеводорода и уменьшение селективности его превращения до соответствующего алкена в результате более высокой прочности закрепления ненасыщенных молекул углеводородов.

ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ ИСТОРИИ РАЗРАБОТКИ – НЕОТЪЕМЛЕМЫЙ ЭТАП МОДЕЛИРОВАНИЯ

Гайсина Г.А.

*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа
gaysina.gulnaz1991@mail.ru*

Высокая степень неопределенности исходной информации при построении модели пласта делает необходимым этапом моделирования адаптацию модели по данным наблюдений. На этом этапе путем решения обратной задачи осуществляется идентификация основных фильтрационно-емкостных параметров пласта, заложенных в модель. Этот процесс называется воспроизведением истории разработки [1]. Корректируются обычно те параметры, которые имеют наибольшую неопределенность и при этом сильнее влияют на решение - абсолютные и фазовые проницаемости, объем законтурной области, коэффициент сжимаемости пор, коэффициенты продуктивности и приемистости скважин. Четких правил, руководствуясь которыми можно было бы быстро и качественно воспроизвести историю, не существует, однако при решении задачи идентификации модели важно понимать, как тот или иной параметр пласта влияет на наблюдаемые показатели:

- средний уровень пластового давления - определяется в основном суммарным поровым объемом V_p , в том числе объемом законтурной области, и сжимаемостью пластовой системы. Поровый объем пласта - не может сильно варьироваться при воспроизведении истории.
- распределение давлений в пласте-формируется в результате фильтрации и определяется полем проводимостей. Для его корректировки можно модифицировать абсолютную и относительные проницаемости.
- распределение насыщенности- изменяется в результате работы добывающих и нагнетательных скважин и влияет на текущие значения обводненности и газового фактора.
- забойные давления - воспроизведение забойного давления при заданных дебитах скважин осуществляется путем подбора коэффициентов продуктивности или приемистости скважин, определяющих их пропускную способность.

1. Каневская Р. Д. Математическое моделирование гидродинамических процессов разработки месторождений углеводородов. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 140 стр, 122-124

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕХНИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ СКВАЖИНЫ НА ПРИМЕРЕ ЗНАМЕНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Галлямов И.И., Кемалов Р.А.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
Lyamov777@list.ru*

В результате прохождения практики были закреплены пройденные в университете теоретические знания, приобретены практические навыки.

В данной научной работе представлены материалы по Знаменскому месторождению: геолого – геофизическая изученность района, геологическое строение месторождения, гидрогеология, нефтенасыщенность, а так же указаны методики проведения полевых работ, методика интерпретации данных, полученных при полевых исследованиях.

Целью научной работы было определить техническое состояние скважин, а именно определение заколонных перетоков (ЗКЦ) сверху и снизу по данным термометрии при компрессорном опробовании скважин.

Термические исследования действующих скважин позволяют решать задачи по выявлению заколонных перетоков, на основе анализа распределения температуры по стволу скважины. Заколонные перетоки приводят к изменению закономерностей формирования температурного поля вследствие влияния эффектов смешивания потоков в подошве (при ЗКЦ снизу) и кровле (при ЗКЦ сверху), дроссельному разогреву в интервале перетока жидкости и изменению градиента температуры.

В результате выполнения научной работы: были подробно рассмотрены и изучены методы определения заколонного перетока в скважине; освоена методика и технология интерпретации материалов и данных ГИС в определении затрубной циркуляции жидкости; была выполнена практическая часть - интерпретация нескольких скважин Знаменского месторождения, целью которой являлась определение заколонных перетоков.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В КОНВЕРСИИ ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ РЕСУРСОВ

Гуссамов И.И.^a, Абделсалам Я.И.И.^a, Киселев А.А.^a, Петров С.М.^a, Каюкова Г.П.^b

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

ildarspost94@mail.ru

В течение ближайших 50 лет углеводородное сырье останется главным источником энергии для транспорта и энергетики, основой большинства синтетических конструкционных материалов и химических продуктов. Во всем мире наблюдается возрастающий интерес к разработке запасов альтернативных видов углеводородных ресурсов, газогидратов, сланцевой нефти и газа, тяжелых нефтей и природных битумов, мировые запасы последних по оценке Организации Объединенных Наций, составляют 260 млрд. т.

В качестве объекта в работе была выбрана битуминозная нефть Ашальчинского месторождения Республики Татарстан с плотностью 0,9715, и вязкостью 2771 мПа при 20°C. Также были выбраны минеральные добавки, входящие в состав нефтемещающих пород с соединениями переходных элементов: карбонатная добавка, каолин, Al_2O_3 (в грубодисперсном состоянии до 25 мкм), соли Ni и Si , Ni (в нано размерном состоянии до 100 нм стабилизированный поли- α -олефинами (ПАО)), Al_2O_3 (в нано размерном состоянии до 40 нм, стабилизированный 4-метил-2-пентаноном), ZnO (в нано размерном состоянии до 40 нм), магнетит Fe_2O_3 (в нано размерном состоянии до 250 нм). Исследования по конверсии высоковязкой нефти проводили в лабораторном каталитическом реакторе в интервале температур 280-375°C и выдерживали при заданной температуре 2,5 ч. Соотношение нефть : вода во всех экспериментах составляло 3 : 1.

В ряде экспериментов под воздействием термобарических и каталитических факторов происходит образование легких углеводородов. В составе преобразованной нефти эксперимента 1 в присутствии добавок карбонатной породы и грубодисперсного Al_2O_3 , увеличивается выход фракции до 200°C, вместе с этим происходит резкое снижение содержания, более чем в 2 раза фракции 200-350°C, с увеличением вязкости нефти более чем на 50% что может свидетельствовать о высокой скорости реакции поликонденсации. По сравнению с исходной нефтью, в составе преобразованной нефти в присутствии наноразмерных частиц металлов увеличивается содержание диситиллатной фракции н.к.-200°C с 12 до 14,5 %, фракции 200-350°C с 18 до 26 %, конверсия тяжелых углеводородов нефти кипящих выше 350°C в легкие углеводороды составила 17%.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2054.2014.5

РЕКУЛЬТИВАЦИИ НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ ПОЧВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОБЕНТОНИТА И КОНСОРЦИУМА АБОРИГЕННЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ- ДЕСТРУКТОРОВ УГЛЕВОДОРОДОВ

Давлетшина А.Я., Мотина Т.Ю.

*ГНУ Татарский НИИАХП Россельхозакадемии, Казань
kindness2006@mail.ru*

Целью исследований являлось изучение влияния нанобентонита и консорциума микроорганизмов-деструкторов на процесс рекультивациинефтезагрязненных почв.

Вегетационный опыт был заложен на темно-серой лесной почве по схеме: 1) контроль – почва незагрязненная; 2) почва + дизельное топливо (ДТ); 3) почва + ДТ + бентонит; 4) почва + ДТ + бентонит + консорциум; 5) почва + ДТ + нанобентонит; 6) почва + ДТ + нанобентонит + консорциум. Почву загрязняли ДТ в концентрации 5% от массы почвы. Бентонит вносили из расчета 12,0 т/га, нанобентонит (размер частиц 5,0-95,0 нм) – 0,3 т/га. В ходе эксперимента (90 сут) растения гороха поливали деминерализованной водой. Пробы почв отбирали в динамике на 10, 21, 30, 45, 60, 90 сут. Определение концентрации углеводородов в почвенных образцах проводили в соответствии с ПНД Ф 16.1:2.2.22-98 [1].

В наших исследованиях содержание углеводородов на 90 сут при внесении бентонита и нанобентонита снижалось на 45,6 и 59,2%, в то время как при внесении консорциума микроорганизмов-деструкторов совместно и с макроаналогом, и с наноразмерным бентонитом – на 64,4 и 70,5% соответственно. На процесс ремедиации внесение нанобентонита оказало более выраженный эффект по сравнению с бентонитом. Считаем, что сорбирование нефтепродуктов происходило за счет проникновения молекул углеводородов в межслоевые пространства наноразмерного бентонита, а свободные химически активные структуры обеспечили удерживание углеводородов в его составе. Применение наноразмерного бентонита при меньшей в 40 раз дозе внесения по сравнению с макроаналогом повышает эффективность очистки загрязненных почв на 6,1-13,1%.

Таким образом, перспективным является комплексное использование сорбента нового поколения – наноразмерного бентонита и эффективного консорциума микроорганизмов-деструкторов, при котором процесс ремедиации ускоряется в 3-4 раза.

УПРУГО-ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ПОРОД БАЖЕНОВСКОЙ СВИТЫ

Доценко А.А.

*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва
Институт Физики Земли РАН им. О.Ю. Шмидта, Москва
core2-duo@yandex.ru*

Целью данного доклада является, в основном, демонстрация методов изучения упруго-прочностных свойств, таких как модуль Юнга, коэффициент Пуассона, напряжение разрушения (предел прочности) и других, пород баженовской свиты (как нефтеносных сланцев, так и прочих, представленных в разрезе исследуемого региона (Западная Сибирь) и конкретных месторождений). Была также поставлена следующая задача в рамках написания данной работы: исследование поведения скоростей упругих волн, продольных и поперечных, в теле пород; наблюдение расхождения их значений (и объяснение этого явления) в зависимости от метода и характера проводимых (лабораторных или скважинных – *in situ*) исследований. Построение графиков и наблюдение зависимостей одних упругих параметров от других для разных литологических типов пород, группирование пород по этим параметрам, их разделение на упругие и хрупкие (определение относительной хрупкости изучаемых горных пород) - представляет научный интерес в области петрофизики, и в данной работе также является одной из задач. Очередная цель данной научной работы состояла в проведении статистического анализа по всему объему обработанных данных; вычислении регрессии и коэффициента корреляции по совокупности графиков.

Проведённый анализ позволил сделать следующие основные выводы:

1. Эффективные упругие и прочностные свойства пород баженовской свиты анизотропны. При этом хорошим приближением можно считать VTI-анизотропию
2. Выраженных зависимостей свойств от литотипа не наблюдается, исключая известняки для которых характерны большие значения модуля Юнга, скоростей сейсмических волн и предела прочности.
3. Квазистатические упругие модули пород баженовской свиты (определяемые по кривым напряжение-деформация, полученным в ходе медленного нагружения образцов в прессовой установке) ниже по значению, в сравнении с динамическими упругими модулями.

СТРОЕНИЕ И ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ НЕФТЕГАЗОНОСНОСТЬ РИФЕЙСКИХ И ВЕНДСКИХ ОТЛОЖЕНИЙ ПРЕДУРАЛЬСКОГО ПРОГИБА

Евдокимов Н.В.

*Московский ордена Ленина, ордена Октябрьской Революции и ордена Трудового Красного Знамени Государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Геологический факультет, Москва
Nik.evdokimov@mail.ru*

Актуальность работы. В настоящее время, в связи со значительной выработанностью месторождений Волго-Уральского НГБ и падением добычи в регионе, особую роль начинают играть нетрадиционные источники углеводородного сырья, а так же глубокозалегающие горизонты, представленные рифей - вендским комплексом отложений и кристаллическим фундаментом, которые могут дать бассейну вторую жизнь.

На данный момент технологии добычи сланцевой и тяжелой нефти сложны и крайне дороги. В связи с этим глубокозалегающие отложения в ближайшей перспективе более интересны. Суммарная мощность рифея и венда на территории Предуральского прогиба колоссальна и может достигать 10-12 километров. Однако, до сих пор на территории бассейна не найдено полноценных месторождений, связанных с протерозойскими отложениями. Присутствуют только сведения об отдельных незначительных залежах. Этот факт можно объяснить крайне большими мощностями протерозоя, неоднородностью его строения и сложностью исследования.

Цель работы. Выделение наиболее перспективных толщ протерозойских отложений на территории Предуральского прогиба, поиск закономерностей их распространения и общая оценка потенциала нефтегазоносности рифейских и вендских отложений на исследуемой территории на основании отобранного фактического материала и многочисленных литературных данных.

Основные задачи:

1. Проведение литологических и петрофизических исследований образцов протерозойского возраста, отобранных на территории западного склона Южного Урала (Башкирский антиклинорий).
2. Изучение литературного материала, в том числе данных исследования ядра параметрической скважины, расположенной на территории Предуральского прогиба.
3. Корреляция протерозойских отложений Башкирского антиклинория и их возрастных аналогов из Предуральского прогиба.
4. Общая оценка перспективности рифея и венда на исследуемой территории на основании полученных петрофизических, литологических и литературных данных.
5. Выделения наиболее перспективных с точки зрения нефтегазоносности горизонтов и свит для их дальнейшего изучения.

Проведённые исследования. Была проанализирована большая коллекция, насчитывающая более 400 образцов протерозойского возраста, собранных на территории западного склона Южного Урала (Башкирский антиклинорий). Проведен комплекс петрофизических, микроскопических и литологических исследований отложений. Кроме этого использованы данные петрофизических, литологических и геохимических исследований ядра, полученного из параметрической скважины, расположенной на территории Предуральского прогиба, проанализирована опубликованная литература.

Результат работы. Итогом проведённого исследования стало выделение свит рифея и венда, способных выступать в роли коллекторов, построение схем корреляции протерозойских отложений Предуральского прогиба и карт их распространения. Выделены наиболее перспективные зоны для дальнейшего исследования.

ВЛИЯНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО АКВАТЕРМОЛИЗА НА ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ АШАЛЬЧИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Ерохин А.А.^a, Галухин А.В.^b, Нургалиев Д.К.^b

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

^b Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань
erokhinanton73@gmail.com

Важную роль в добыче высоковязких нефтей и битумов играют термические методы извлечения, обладающие значительными преимуществами по сравнению с другими методами: высокая степень извлечения нефти, универсальность, улучшение ее характеристик вследствие термически инициированных химических процессов [1, 2]. В рамках термических методов может быть реализован процесс каталитического акватермолиза, в ходе которого протекают реакции крекинга, удаления гетероатомов, улучшающие свойства нефти.

Важной задачей является разработка катализаторов, позволяющих повысить глубину превращения нефти и, тем самым, сделать процесс акватермолиза экономически более привлекательным. Особое внимание уделяется нефтерастворимым катализаторам, способным распределяться по объему нефтяной залежи и эффективно катализировать процесс акватермолиза [3].

Нами было исследовано влияние каталитического акватермолиза на свойства и состав нефти Ашальчинского месторождения республики Татарстан. В качестве катализатора был использован нефтерастворимый комплекс железа (III). Было показано, что использование данного катализатора значительно понижает содержание высокомолекулярных компонентов нефти, вызывая улучшение фракционного и элементного состава нефти.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

1. V. Alvarado, E. Manrique. *Energies*, 2010, 3, 1529–1575.
2. Z. Fan, F. Zhao, J. Wang. *Journal of Fuel Chemistry and Technology*, 2006, 34, 315–318.
3. Y. Chen, C. Yanga, Y. Wang. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2010, 89, 159–165.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ПЛОТНЫХ И ПОРИСТЫХ ДОЛОМИТОВ В ОТЛОЖЕНИЯХ КАМЕННОУГОЛЬНОГО ВОЗРАСТА ЮЖНО-ТАТАРСКОГО СВОДА

Ескин А.А., Морозов В.П., Королёв Э.А., Кольчугин А.Н.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
Eskin.Aleksey@gmail.com

Доломитизация известняков и их илистых осадков имеет широкое распространение в процессах литогенеза пород. Она может реализоваться при диагенезе, катагенезе или благодаря вторичным изменениям наложенного характера. Обзор литературы [1], также собственные наблюдения, показывают, что образовавшиеся при этом породы могут быть либо плотными, либо пористыми образованиями. В последнем случае доломиты относятся к практически значимым карбонатным породам-коллекторам.

Целью работы являлось изучение кристаллохимических особенностей вторичных доломитов, с последующим выявлением механизмов формирования различных морфологических типов.

Фактический материал исследований представлен вторичными доломитами турнейского и башкирского ярусов, а также тульского горизонта ряда месторождений, расположенных на территории Республики Татарстан. Для решения поставленных в работе задач был задействован широкий арсенал методов минералогического исследования. Полученные экспериментальные данные свидетельствуют, что образования доломитов осуществлялось при дефиците ионов магния в минералообразующей среде. В пористых доломитах тульского горизонта визейского яруса недостаток магния компенсировался ионами железа, в аналогичных образцах турнейского и башкирского ярусов – ионами кальция.

Согласно экспериментально полученным данным, можно предположить, что плотные доломиты формируются в условиях достаточной концентрации ионов магния для полного заполнения пространства зернами этого минерала, когда процессы кристаллизации доломита доминировали над процессами растворения кальцита. Тогда как в условиях их недостатка в среде зерна вторичных доломитов должны заполнять пространство не полностью, т.е. при формировании последних преобладают процессы выноса растворенных компонент. В этом случае в структуре доломита должен наблюдаться относительный «дефицит» ионов магния и тогда «его место» должен занять какой-либо другой химический элемент, изоморфный ему, согласно закономерностям компенсационного изоморфизма [2].

Из сказанного следует, что механизмы формирования плотных и пористых доломитов как в изученных отложениях одинаковы. Однако установленные различия изоморфизма ионов магния и железа и кальция в кристаллической структуре доломита обусловлены различным составом флюидов, приводящим к доломитизации известняков. Такие флюиды имеют элизийную природу и относятся к восходящим [3].

1. Фортунатова Н.К., Карцева О.А., Баранова А.В., Агафонова Г.В., Офман И.П. Атлас структурных компонентов карбонатных пород. М.: ВНИГНИ. 2005. 440 с.
2. Щербина В.В. Основы геохимии / В.В.Щербина. – М.: Недра, 1972. – 295 с
3. Карцев А.А. Нефтегазовая гидрогеология / А.А.Карцев, С.Б.Вагин, В.П.Шугрин. – М.: Недра, 1992. – 208 с.

ЛИТОЛОГО-ПЕТРОГРАФИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ, УСЛОВИЯ ФОРМИРОВАНИЯ И КОЛЛЕКТОРСКИЕ СВОЙСТВА ПЕСЧАНЫХ ПОРОД ПЛАСТА Ю₁³ ЮЖНОЙ ЧАСТИ КАЙМЫСОВСКОГО СВОДА (ЗАПАДНАЯ СИБИРЬ)

Жэнь Сюйцзин, Недоливко Н.М.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Институт природных ресурсов, кафедра Геологии и разведки полезных ископаемых, Томск
renxujing@foxmail.com*

В результате литолого-фациальных, гранулометрических и петрографических исследований ядра терригенных отложений пласта Ю₁³ продуктивного горизонта Ю₁ (васюганская свита, оксфорд) установлен прибрежно-морской генезис отложений и приуроченность коллекторов к подошвенным, склоновым и центральным частям регрессивных вдольбереговых баров мелководного шельфа. Породы-коллекторы залегают в основании пласта Ю₁³, имеют постепенные переходы с подстилающими мелководно-морскими глинистыми осадками нижневасюганской подсвиты (келловей), представлены разнозернистыми биотурбированными песчаниками с преимущественно волнистой и косоволнистой слоистостью и увеличением зернистости отложений снизу вверх по разрезу. По вещественному составу обломков они относятся к граувакково-полевошпато-кварцевым разностям, породообразующая часть в которых состоит из кварца (30–49 %), полевых шпатов (17–36 %), обломков пород (23–36 %). По фильтрационно-емкостным характеристикам (открытая пористость 14,1–15,9 %, проницаемость от 0,28 до $24,3 \times 10^{-3}$ мкм²) песчаники представляют коллекторы IV, V и VI классов (по А.А. Ханину) со сложным строением пустотно-порового пространства, представленного сочетанием межзерновых, внутризерновых пор и микропор в каолиновом цементе.

Показано, что емкостно-фильтрационные параметры пород-коллекторов различных классов обусловлены условиями осадконакопления, гранулометрическим составом, степенью отсортированности обломочного материала, составом обломков, количеством и типом цемента; типом, размерами и распределением порового пространства.

ЭКОЛОГОСБЕРЕГАЮЩАЯ СОВРЕМЕННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ СЕЙСМОРАЗВЕДКИ В ТРУДНОДОСТУПНЫХ РАЙОНАХ УДМУРТИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ НЕФТИ

Зорин Д.И., Истомина Н.Г.

*Институт нефти и газа им. М.С.Гуцериева УдГУ, Ижевск
zorinNF@ya.ru*

Проведение сейсморазведочных исследований на территории Удмуртии связаны со значительными трудностями: высокая залесенность (50% всей территории покрыто лесным массивом), развитая речная сеть, заболоченность и отсутствие достаточного количества дорог, пригодных для проезда техники. Работы по технологии «Экологосберегающая сейсморазведка» проводят с использованием малогабаритных буровых установок УБШМ-1-13 на базе малогабаритного шасси шириной до 1 м, с возможностью бурения одиночных или групповых скважин малого диаметра до 60 мм и глубиной 3-10 метров. Она может использоваться в труднопроходимых районах. Снижает затраты на сейсморазведку в природоохранных зонах за счет уменьшения ширины просеки.

Данная технология имеет положительные стороны, выгодно отличающих её от вибрационной сейсморазведки: прекращение вырубki леса под просеки шириной 4 – 5 метров; сохранение структуры почвенного слоя; отсутствие воздействия на грунтовые воды; минимальное отклонение фактического положения профилей от проектного. Еще большее снижение вредных воздействий на окружающую среду достигается применением зарядов малой массы (до 0,1-0,2кг). Особенно важна отработка площадей с регулярной системой для съемок 3D, где от равномерности наблюдений зависит точность отображения геологической среды, что, в дальнейшем, влияет и на эффективность разработки месторождений. Также, получение качественных полевых материалов позволяет применять современные методы прогнозирования геологического разреза (ПГР) и емкостных свойств продуктивных пластов (ФЕС), в настоящее время активно используемые при оценке (переоценке) запасов или формировании рейтинга эксплуатационного бурения.

Таким образом, применение «экологосберегающей технологии» сейсморазведки является экономически выгодной технологией и при геологоразведочных работах позволяет получить более качественную и достоверную информацию на тех участках, в пределах которых стандартная (вибрационная) методика имела ряд ограничений.

ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ЗАВОДНЕНИЯ НИЗКОПРОДУКТИВНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ ВИЗЕЙСКОГО ОБЪЕКТА ВЯТСКОЙ ПЛОЩАДИ АРЛАНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Зямбахтина В.Н.

*Удмуртский государственный университет, Ижевск
wik.t0rija@yandex.ru*

Для Вятской площади Арланского месторождения характерна высокая выработка пластов с высокой продуктивностью [1]. При разработке месторождения возникают следующие проблемы: 1) потеря приёмистости нагнетательных скважин, работающих на пластах С1-II и С1-IV вследствие плохого качества воды и ограничения по давлению; 2) одновременно ведётся закачка на высокопродуктивные и низкопродуктивные пласты, что влечёт за собой падение давления на общих гребёнках. Данные проблемы можно решить с помощью увеличения давления закачки нагнетательных скважин, работающих на низкопродуктивные пласты, и улучшения качества закачиваемой воды. Нагнетательная скважина №8291 при запуске не принимала при давлении 140 атм. (давление на КНС), когда подняли давление до 190 атм., то скважина стала принимать. Нужно организовать водозаборные скважины (перевод неработающего фонда скважин в водозаборный и Серпуховский объект) и произвести обвязку на скважинах, где имеются невыработанные запасы. Технически реализуемо провести эти мероприятия на следующих скважинах: 8241, 8327, 8235, 8883, 6781, 6745+6724, 8288. В результате появится возможность регулировать давление от закачки, улучшится качество закачиваемой воды (вода Серпуховского объекта с отсутствием нефтепродуктов). Путём изменения давления на вышеперечисленных скважинах дебит нефти в среднем увеличится на 3-8 м³/сут, будет происходить наиболее полная выработка пластов С1-II и С1-IV.

В данной работе произведена экономическая оценка, вычислена эффективность применения оптимизации системы заводнения низкопродуктивных коллекторов Визейского объекта Вятской площади Арланского месторождения.

1. Отчет «Дополнение к проекту разработки Вятской площади Арланского месторождения». ООО «РуссНефть – Научно-технический Центр». Москва, 2007.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ЯМР РЕЛАКСАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕФТИ РАЗЛИЧНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ В ЛАБОРАТОРНЫХ УСЛОВИЯХ

Иванов Д.С., Зарипов Т.А., Лозовой А.Р., Мельникова Д.Л.

*Институт Физики КФУ, Казань
f.ma.dima@mail.ru*

На сегодняшний день необходимо разрабатывать эффективные способы добычи тяжелой нефти. Повышение эффективности разведки и добычи нефти требует проведения исследований и разработки методов анализа вязкостных свойств флюидов в коллекторах.

Целью представленной работы является получение корреляционных зависимостей характеристик ядерной магнитной релаксации и реологических свойств нефти различного происхождения.

Изучался ряд образцов нефти, которые по плотности ρ были разделены на две группы: лёгкие нефти ($\rho \leq 0,84$ г/см³) и тяжёлые нефти ($\rho > 0,84$ г/см³)[1].

Для получения значений времён ядерной спин-спиновой релаксации T_2 был использован ЯМР спектрометр Тестаг Apollo с частотой резонанса на протонах 1H 300 МГц с применением импульсной последовательности КМПГ [2,3]. Коэффициент вязкости μ был измерен на ротационном вискозиметре Fungilab V.1.0 EXPERT SERIES.

Релаксационные затухания для всех образцов нефти имели мульти-экспоненциальный характер. Спектр времён релаксации вычислялся из мульти-экспоненциального релаксационного затухания методом регуляризации Тихонова.

Была также измерена зависимость вязкости флюида от температуры, из которой наблюдаем, что в образцах нефти проявляется Аррениусовская температурная зависимость с энергией активации E_m , зависящей от состава нефти.

Наблюдается корреляция вязкости образца μ с характерными величинами $\langle T_2 \rangle$ и $\langle \ln T_2 \rangle$, вычисленными из спектров времён спин-спиновой релаксации T_2 . Была предложена модель, которая объясняет существование данной корреляции: сдвиговая вязкость, как коэффициент переноса импульса чувствительна к характерным временам τ_a вращения молекул.

1. ГОСТ Р 51858–2002 «Нефть Общие технические условия» // М., Госстандарт России, 2002, 7 с.
2. CARR H. Y., PURCELL E. M. “Effects of diffusion on free precession in nuclear magnetic resonance experiments” // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 94. – P. 630.
3. MEIBOOM S., GILL D. “Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times / // Rev. Sci. Instrum. – 1958. – Vol. 29. – P. 688

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ СЕЛЕКТИВНОЙ ВОДОИЗОЛЯЦИИ ПЕННЫМИ СИСТЕМАМИ В КАРБОНАТНЫХ ПЛАСТАХ

Исламов И.А.

*Альметьевский Государственный Нефтяной Институт, Альметьевск
islamov.ilshat@mail.ru*

Опыт проведения РИР показывает, что наиболее перспективные методы изоляции водопритока основаны на комбинации двух или нескольких тампонажных материалов.

Известен способ закачки аэрированного водного раствора поверхностно-активного вещества с кратностью аэрации не ниже 4,5 при пластовых условиях. [1]

Известны способы воздействия на пласт, включающие композиции полиакриламида с различными видами сшивателей.

Предполагается создать на основе выше изложенных изобретений новый состав: аэрированный полимерный раствор ПАВ.

Поскольку ремонтно-изоляционные работы преимущественно проводят в скважинах, эксплуатирующих сильно дренированные пласты, пенный раствор, закачиваемый в пласт, должен закупорить высокопроницаемые прослои вследствие прилипания пузырьков к поверхности водопроводящих каналов и возникновения начального давления сдвига, так как пена является вязкопластичной упругой системой, обладающей структурно-механическими свойствами. [2]

При выборе основы аэрированного полимерного раствора ПАВ, желательно использовать высокоэффективные технологии на основе применения дешевых и недефицитных материалов, легко окупаемых экономически.

Гели на основе полиакриламида (ПАА) со сшивателем позволяют создавать большие гелевые экраны и производить изоляцию трещиноватых пластов. В высокопроницаемом интервале (в трещине) частицы способствуют существенному упрочнению геля.

1. Патент №2184835. Способ обработки призабойной зоны скважины пенными системами для ограничения водопритока.
2. В.А. Амиян, А.В. Амиян, Л.В. Казакевич. Применение пенных систем в нефтегазодобыче, 1987, 175-197.

ГЕЛИ И ЗОЛИ ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ЗАЛЕЖЕЙ ВЫСОКОВЯЗКИХ НЕФТЕЙ

Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Кувшинов И.В., Козлов В.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск
kozlov_vv2004@mail.ru*

Представлены результаты лабораторных исследований, промысловых испытаний и промышленного использования новых физико-химических технологий увеличения нефтеотдачи месторождений на поздней стадии разработки, в том числе залежей высоковязких нефтей, с использованием термотропных гелеобразующих и золеобразующих композиций. В основе технологий лежит концепция использования энергии пласта или закачиваемого теплоносителя для генерации непосредственно в пласте химических интеллектуальных систем – гелей, золь и нефтewытесняющих композиций, сохраняющих в пласте длительное время комплекс свойств, оптимальный для целей нефтewытеснения и регулирования фильтрационных потоков.

В ИХН СО РАН созданы гель-технологии, увеличивающие охват пласта заводнением и паротепловым воздействием. В технологиях используются термотропные золе- и гелеобразующие системы, которые в поверхностных условиях являются маловязкими водными растворами, в пластовых – превращаются в гели или золи под действием тепловой энергии пласта или закачиваемого теплоносителя, без сшивающих агентов. При этом коллоидно-химические свойства можно регулировать путем изменения химического состава композиций или порядка закачки реагентов и их объемов, в зависимости от конкретных геолого-физических условий и стадии разработки месторождений. В 2008-2013 гг. на пермокарбоновой залежи Усинского месторождения по технологиям ИХН СО РАН при паротепловом воздействии обработаны 172 скважины. Прирост дебита по нефти составил от 3 до 24 тонн в сутки на скважину, дополнительная добыча нефти 980 тонн на скважино-обработку. Результаты геофизических исследований в паронагнетательной и пароциклической скважинах в до и после закачки гелеобразующих композиций показали, что происходит перераспределение фильтрационных потоков и увеличение охвата пласта паротепловым воздействием. Показана перспективность комплексных технологий чередующейся закачки пара, гелеобразующих и нефтewытесняющих композиций.

Работа выполнена при поддержке Гранта ФЦП № 14.607.21.0022 от 05.06.2014.

КОНЦЕНТРАЦИЯ БОРА В ПЛАСТОВЫХ ВОДАХ ЗАПАДНО-СИБИРСКОЙ И ВОЛГО-УРАЛЬСКОЙ ПРОВИНЦИЙ КАК ИНДИКАТОР СОВРЕМЕННОЙ МИГРАЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ

Кокорев О.Н., Горюнов Е.Ю., Игнатов П.А.

Российский Государственный Геологоразведочный Университет им. С.Орджоникидзе (МГРИ-РГГРУ), Москва

Kokorev.podzemgazprom@yandex.ru

Одним из информативных геохимических параметров, указывающих на глубинность флюидов, как убедительно показано Т.А.Киреевой [1], является относительное содержание в пластовых водах бора. На карте бороносности юрского комплекса Западной Сибири (рисунок 1а) отчетливо видна пространственная корреляция зон повышенной бороносности с нефтегазоносными площадями.

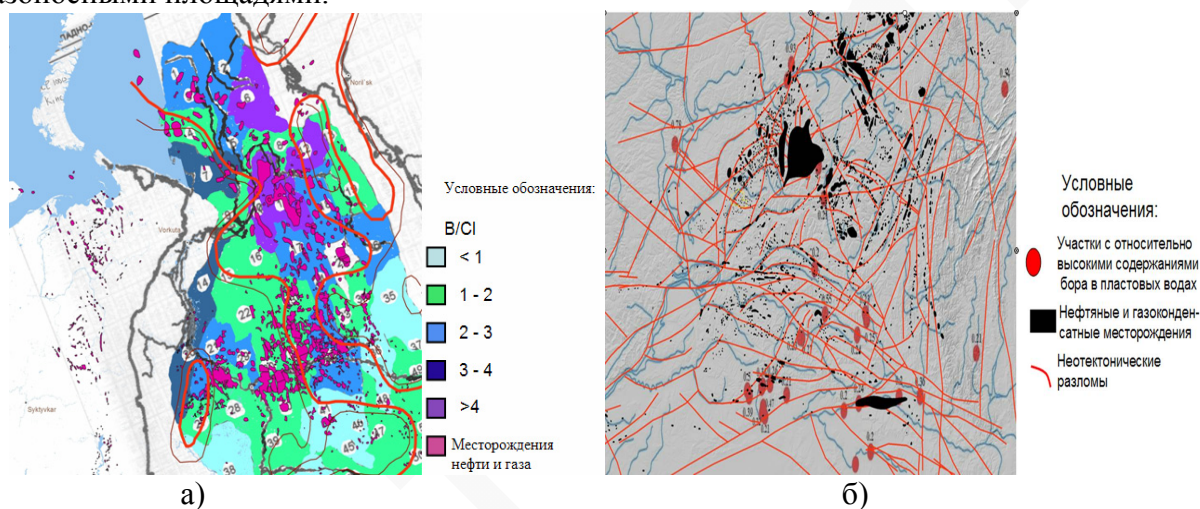


Рисунок 1. Карта бороносности а) Западной Сибири б) водоносных горизонтов Волго-Урала.

Авторами были проанализированы данные по содержанию бора в водоносных горизонтах Волго-Урала используемые для хозяйственно питьевого водоснабжения. На общем фоне низких значений, выделяются зоны повышенной бороносности (рисунок 1б).

В отличие от Западной Сибири, в Волго-Уральской нефтегазоносной провинции зоны повышенной бороносности распространены более локально, но также пространственно совмещены с рядом нефтеносных площадей.

1. Киреева Т.А. К методике оценки эндогенной составляющей глубоких подземных вод //Вестник МГУ, сер.4, Геология, №1 2009, с.54-57.

ПОСТСЕДИМЕНТАЦИОННАЯ ИСТОРИЯ КАРБОНАТНЫХ ПОРОД-КОЛЛЕКТОРОВ БАШКИРСКОГО ЯРУСА ЮГО-ВОСТОКА РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Кольчугин А.Н.

*Институт геологии и нефтегазовых технологий, КФУ, Казань
Anton.Kolchugin@gmail.com*

Проблема постседиментационных изменений пород-коллекторов всегда волновала геологов. При этом подходы к изучению терригенных и карбонатных пород несколько различны. Так терригенные породы чаще значительно более полиминеральные по своему составу, нежели карбонатные. Это позволяет порой более детально распознавать историю преобразований терригенных коллекторов в условиях постседиментационного литогенеза. Тогда как карбонатные породы, в значительной мере более «чистые» образования по минеральному составу, и редко содержат значимые примеси глинистого материала или зерна обломочных пород, особенно если это органогенные карбонаты. К тому же в условиях постседиментационных изменений карбонатный материал может неоднократно подвергаться перекристаллизации, растворению и переотложению, различные виды пустотного пространства заполняться кальцитом разных генераций. Даже эта лишь небольшая часть огромного многообразия трансформаций карбонатных пород существенно затрудняет интерпретацию событий постседиментационной истории «жизни» пород.

На примере одно из месторождений нефти РТ, в карбонатных породах-коллекторах башкирского яруса была проведена попытка восстановления в деталях истории диа-, катагентических преобразований пород, включая период сопутствующий миграции нефти, ее накопления в породах резервуарах и существования пород в зоне стабилизировавшегося водо-нефтяного контакта. Таким образом, методом изучения оптических шлифов и катодоллюминесцентной микроскопии, в совокупности с данным геохимическими исследованиями пород было выделено по меньшей мере 6 типов генетических кальцитов и 2 типа доломитов. Пространственное положение кальцитов и доломитов относительно друг друга, их положение в каверно-поровом пространстве, включая сутуростиллолитовые швы, позволило провести интерпретацию основных постседиментационных событий в истории преобразований карбонатных пород. Методом катодоллюминесцентной микроскопии надежно выделяются: 1) кальцит, формирующий первичные компоненты известняка (форменные элементы); 2) раннедиагенетический кальцит; 3) позднедиагенетический кальцит; 4) катагентический кальцит предшествующий этапу нефтенакпления; 5) кальцит с включениями углеводородов (нефть и битум), образованный на стадии миграции и аккумуляции углеводородов; 6) друзовидный крупнокристаллический кальцит, выполняющий стенки крупных каверн и каверновых каналов. Место доломита в данной относительной временной шкале постседиментационных преобразований карбонатных пород установить довольно не просто. Однако, по мнению автора, на основе анализа пространственных взаимоотношений минералов и положения доломитов в последовательности образования разных генераций кальцитов, доломит следует относить к этапу предшествующему нефтенакплению и возможно его началу, так как иногда краевые зоны роста крупнокристаллических доломитов содержат включения углеводородного материала.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ПРИ ОЦЕНКЕ НЕФТЕПЕРСПЕКТИВНОСТИ ТЕРРИТОРИЙ

Кондратенко А.В., Шишкова И.И.

*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины,
Гомель, Республика Беларусь
phacops14@mail.ru*

Эффективность дистанционных зондирований Земли в геологии определяется не только их информативностью, но и полнотой и обоснованностью рекомендаций на дальнейшие исследования, степенью использования вновь полученных данных при последующих геолого-геофизических работах.

Для получения и обработки геологической информации все в большей степени привлекаются новые методики и средства, в том числе современные географические информационные системы, электронно-вычислительная техника и результаты дистанционного зондирования.

Дистанционные исследования предназначены для обеспечения геологических исследований на этапе подготовительных и полевых работ, электронной дистанционной основой рационального размещения геофизических профилей, съемочных маршрутов, выбора участков детальных исследований, уточнения мест заложения параметрических и поисковых скважин, оптимального выбора мест базирования полевых отрядов. На этапе камеральных работ дистанционная основа служит каркасом для структурных построений, уточнения границ картируемых геологических объектов, обеспечивает повышение информативности обзорности и достоверности геологических карт.

Изучение геологического строения территорий является основой создания минерально-сырьевой базы государства. Рациональное использование финансовых ресурсов направляемых на геологические исследования является одной из основных и достаточно сложных задач геологической службы Республики. Разрабатываемые в настоящее время геологической службой нормативные документы, регламентирующие производство геологоразведочных работ, их стадийность, масштабы, рациональное комплексирование методов исследований предназначены обеспечить эффективное использование этих ресурсов.

РАСЧЕТ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И ОПТИМАЛЬНОЙ КОНСТРУКЦИИ ЭЛЕКТРОЦЕНТРОБЕЖНОГО НАСОСА ПРИ ПЕРЕКАЧКЕ ГАЗОЖИДКОСТНЫХ СМЕСЕЙ В НЕФТЯНЫХ СКВАЖИНАХ

Конюхов И.В.

*Институт вычислительной математики и информационных технологий КФУ, Казань
IvanKonyukhov@yandex.ru*

Для расчета характеристик нестационарного течения водонефтегазовой смеси в каналах многоступенчатого электроцентробежного насоса (ЭЦН) разработаны дифференциальная и численная модели [1], учитывающие непрерывное изменение параметров работы отдельных ступеней вдоль насосного узла от приема к выкиду вследствие сжатия и нагрева перекачиваемой продукции, а также растворения свободного газа в нефти. Для пересчета напора, мощности и КПД ступеней с воды на неоднородную смесь используются полуэмпирические зависимости, построенные в результате модификации общепринятой методики П.Д. Ляпкина и позволяющие выполнять вычисления без итераций.

Разработан программный комплекс OilRWP, позволяющий проводить расчеты процессов теплопереноса в ЭЦН. С его помощью выполнена апробация квазистационарной модели на данных известных промысловых экспериментов Игrevского В.И., Золова В.И., Шарипова А.Г., Минигазимова М.Г. и других авторов, в которых объемное расходное газосодержание водонефтегазовой смеси на входе в первую ступень ЭЦН варьируется от 10 до 35%. Показано, что расчеты хорошо согласуются с экспериментами.

Поставлена и решена задача оптимизации конструкции электронасоса за счет его сборки разнотипными ступенями различной производительности, увеличивающейся в направлении от приема к выкиду насоса. Показано, что насосы с такой "конической" конструкцией имеют повышенные эксплуатационные характеристики по сравнению с однотипными ЭЦН. Этот эффект обусловлен тем, что более производительные ступени, интенсивно диспергируя и сжимая газожидкостную смесь, подготавливают тем самым благоприятные условия для работы последующих менее производительных ступеней.

1. В.М. Конюхов, И.В. Конюхов, С.В. Краснов, ВАНТ. Сер. Матем. моделирование физ. процессов, 2012, 3, 34-44.

СЕЙСМОГЕОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ПЕРСПЕКТИВЫ НЕФТЕГАЗОНОСНОСТИ ЦЕНТРАЛЬНОЙ ЧАСТИ СРЕДНЕВАСЮГАНСКОГО МЕГАВАЛА

Кушней А.Ю.

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск
Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН, Новосибирск
d.mc11@mail.ru*

В географическом отношении Среднеvasюганский мегавал находится в Западной части Томской области, на правом берегу среднего течения р. Васюган, левого притока р. Оби. В административном отношении - в Каргасокском районе, неподалеку от поселка Средний Васюган. Согласно тектонической карты мезозойско-кайнозойского платформенного осадочного чехла Западно-Сибирской плиты Среднеvasюганское месторождение нефти расположено в центральной части Среднеvasюганского мегавала и приурочено к Красноярскому локальному поднятию (структура III порядка). В соответствии со схемой нефтегазоносного районирования Среднеvasюганское месторождение нефти находится в Среднеvasюганском нефтегазоносном районе Васюганской нефтегазоносной области. Основными продуктивными отложениями являются песчаники горизонта Ю1 (оксфорд) васюганской свиты. Актуальность работы, направленной на изучение геологического строения и нефтегазоносности исследуемой территории на основе комплексной интерпретации сейсморазведки, ГИС и данных бурения, не вызывает сомнения.

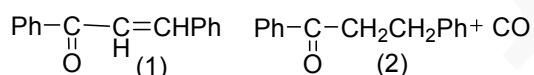
Основной задачей исследования является прогноз нефтегазоносности на основе построения геологической модели и восстановления истории тектонического развития. В результате дана структурная характеристика района исследования, восстановлена история тектонического развития территории. В целом рельеф развивался унаследовано. Большинство современных локальных поднятий сформировались над эрозионно-тектоническими выступами доюрского основания, которые испытывали тенденцию к росту на протяжении юры и продолжали унаследовано развиваться в постюрское время. На основе комплексного анализа полученных данных выявлены особенности перспектив нефтегазоносности в продуктивных отложениях оксфордского резервуара.

НОВЫЕ ДАННЫЕ О МЕХАНИЗМЕ РЕАКЦИИ СОЧЕТАНИЯ АЛКЕНОВ С АНГИДРИДОМ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Лагода Н.А., Ларина Е.В., Курохтина А.А., Шмидт А.Ф.

Химический факультет ИГУ, Иркутск, Россия
nalagoda@yandex.ru

Алкены, содержащиеся в продуктах переработки нефти и природного газа, являются привлекательным сырьем для реакций кросс-сочетания. При исследовании модификации катализируемой палладием реакции Хека стирола и ангидрида бензойной кислоты, нами с помощью хромато-масс-спектрометрии было обнаружено образование неописанных ранее в данных условиях продуктов (1) и (2), первый из которых представляет собой карбонилсодержащий продукт реакции Хека, а второй - продукт его восстановления.



Образование аналогичных продуктов было неоднократно зафиксировано в реакции Хека между арилгалогенидами и алкенами с применением в качестве дополнительного реагента монооксида углерода (при давлении 5 атм и выше) [1]. Ранее предполагалось, что образования карбонилсодержащих алкенов в реакции Хека с ангидридами ароматических кислот не происходит из-за элиминирования молекулы CO из продукта стадии окислительного присоединения ацильного фрагмента к палладию. На основании полученных экспериментальных данных, а также анализа литературных данных по реакции Хека с карбонилированием в работе предложена новая схема механизма реакции Хека между ангидридом бензойной кислоты и алкенами. Кроме того, с использованием метода, базирующегося на измерениях дифференциальной селективности реакции в условиях конкуренции нескольких одготипных субстратов были получены подтверждения протекания реакции по гомогенному механизму катализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке задания № 4.353.2014/К в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки России (код проекта: 627)

1. X.-F. Wu, H. Neumann and M. Beller, *Angew. Chem. Int.Ed.*, 2010, 49, 5284-5288.

THE FIRST OIL REFINERY DUNG QUAT IN VIETNAM

Le Van Tuan

*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk
visaosang89@gmail.com*

Dung Quat refinery, which located in Quang Ngai Province, is the first oil refinery in Vietnam. The idea of Dung Quat refinery project started already in 1980s. The refinery was planned to be built about 100 kilometres away from the offshore oil fields, near the port in Vung Tau,. In 1988, the clearance of the construction was started, but in 1991 the refinery project was suspended. In 1998, a joint venture between Vietnam and Russia was established VietRoss. The intergovernmental contract on the construction and operation of the Dung Quat was signed on 25 August 1998. The Front End Engineering Design (FEED) Contract was decided between Petrovietnam, Zarubezhneft and Foster Wheeler Energy.[1] First, the Refinery was planned to start work in 2000, but it several times postponed. On 25 December 2002, the intergovernmental contract between Vietnam and Russia was ended, and the project continued as a project of Petrovietnam.[2] In 2003, the project management consultancy services agreement was decided with Stone & Webster, and in 2004 the contract for front end engineering design (FEED) development was signed with Technip. The construction started on 28 November 2005. In 2009, industrial gross output in Quang Ngai Province increased by 144.7% and the share of industry in the province's GDP surged from 36.2% in 2008 to 46.3% in 2009. On 16 August 2009, refinery's operations were suspended due to a "technical repair" in the residue fluid catalytic cracking unit. The unit was expected to be repaired by 9–10 September 2009. The refinery is outfitted to process oil from Bạch Hổ oil field, which is expected to run dry before 2020. Petrovietnam has a preliminary contract with BP for supplies of similar quality to use own until 2011.

1. Blagov, Sergei (1999-12-03). "Russians tough it out in Vietnam's oilfield of broken dreams". Asia Times. Retrieved 2010-10-24.
2. "Dung Quat Refinery Project, Vietnam". Hydrocarbons Technology. Net Resources International. Retrieved 2008-04-26.

ХАРАКТЕР РАСПРОСТРАНЕНИЯ МЕЖРЕЗЕРВУАРНЫХ ПЕРЕМЫЧЕК ЮЖНО-ОСТАШКОВИЧСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ НЕФТИ

Левченко В.Д.

*Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель, Республика Беларусь
phacops14@mail.ru*

Особенности строения межсолевой толщи Южно-Осташковичского месторождения не позволили проследить по площади и в разрезе породы-коллекторы и породы-неколлекторы. На основе проведенного анализа развития коллекторов в разрезах и по площади распространения было выделено три (P3, P2, P1) наиболее выдержанные и выразительные пачки пород-неколлекторов (обозначенные как межрезервуарные перемычки). Стоит отметить, что выделены они условно, нередко без стратиграфической привязки.

Перемычка P3 (внутритонежская перемычка) приурочена к отложениям задонского горизонта. Прослеживается практически во всех разрезах, разделяя выше и ниже лежащие пачки тонежских коллекторов. В своде структуры ее толщины минимальны и составляют первые метры.

Границы перемычки P2 (елецко-задонская перемычка) весьма неоднозначно прослеживаются на разных стратиграфических уровнях в соседних скважинах. Она объединяет в своем составе отложения вишанско-тремлянско-го возраста, иногда породы-неколлекторы нижней части туровских и верхней части тонежских слоев. Максимальные значения сосредоточены в северной и южной частях месторождения. В зоне развития рифогенных образований толщины перемычки минимальны. В районе развития биогермных образований, вытянутом вдоль зоны отсутствия межсоли, петриковские коллектора практически сливаются с ниже лежащими дроздовскими, образуя единый гидродинамический резервуар. На остальной территории, где в разрезе преобладают слоистые глинистые породы, коллектора развиты без определенной закономерности на разных уровнях. В таких случаях они отделяются от ниже лежащего резервуара непроницаемыми глинистыми образованиями петриковского и низкочемки карбонатами елецкого горизонтов. Это определило возможность определить здесь перемычку, обозначенную как петриковско-елецкая (P1). Толщины P1 изменяются без определенной закономерности в северной и северо-восточной частях месторождения.

ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТЬ БУРЕНИЯ ВТОРЫХ СТВОЛОВ ПРИ РАЗРАБОТКЕ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ПРИПЯТСКОГО ПРОГИБА

Ломоносов И.И.^a, Бобикова Т.В.^b

^a РУП «Производственное объединение «Белоруснефть», Гомель, Республика Беларусь

^b Кафедра геологии и разведки полезных ископаемых ГГУ им. Ф.Скорины,
Гомель, Республика Беларусь
bobikovat@mail.ru

Большинство месторождений Припятского прогиба промышленной группы находятся на 3 и 4 стадиях разработки, характеризующихся высокой степенью выработки запасов и обводненностью. Бурение вторых стволов имеет своей целью решение трех главных задач: восстановление проектной сетки скважин; бурение второго ствола на участке залежей, где изоляционные работы не давали эффекта; восстановление ликвидированных поисковых и разведочных скважин, не бывших в эксплуатации [1]. Увеличение эффективности нефтедобычи можно осуществить за счет более полной выработки остаточных запасов нефти в застойных зонах продуктивных пластов. Строительство вторых стволов из ранее пробуренных скважин является одним наиболее перспективных методов повышения нефтеотдачи пласта, поскольку из-за сложности, неоднородности и неизвестности геометрии карбонатных коллекторов при эксплуатации первых стволов возникают недоступные для гидродинамического воздействия зоны, содержащие нефть. К эффекту в виде дополнительно добытой нефти следует добавить большой объем полученной геологической информации. Так, в результате бурения второго ствола на проектный семилукский горизонт (подсолевые отложения) Тишковского месторождения нефти была открыта задонская нефтяная залежь (межсолевые отложения). На данный момент в РУП «ПО «Белоруснефть» из восстановленных скважин методом бурения второго ствола добыто более двух миллионов тонн нефти, что составляет 20 % от всей добычи.

1. Н.К. Карташ, Н.П. Повжик, А.А. Кудряшов. Вторые стволы как способ доизвлечения остаточной нефти. Критерии выбора объектов и перспективные конструкции // Потенциал добычи горючих ископаемых в Беларуси и прогноз его реализации в первой половине XXI века: Материалы междунар. науч.-практ. конф., 25-27 мая 2011 г. – Гомель: РУП «ПО «Белоруснефть», 2012. – С. 362–370.

НЕФТЕГАЗОНОСНОСТЬ ЮЖНОГО СКЛОНА БАЙКИТСКОЙ АНТЕКЛИЗЫ

Максютова А.В.

*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, геологический ф-т, кафедра
Геологии и геохимии нефти и газа, Москва
alina.maksiutova@gmail.com*

Изучение нефтегазоносности Байкитской антеклизы актуально в настоящее время, поскольку здесь открыты крупнейшие нефтяные месторождения, в которых продуктивны рифейские отложения. Также в районе этих месторождений пробурена скважина Шушукская-1 с непромышленным притоком в вендских отложениях, географически расположенная на южном склоне Байкитской антеклизы, но в геологическом плане располагающаяся между двумя генерационными очагами: Енисей-Байкитским с рифейскими материнскими толщами и Курейским с венд-кембрийскими материнскими породами [2]. Важно определить источник генерации, из которого шли перетоки в данный район.

Решением этого вопроса может быть комплексный геохимический и литологический анализы предположительных нефтегазоматеринских толщ и коллекторов рифейского, вендского и кембрийского возраста и сравнительный анализ с известными данными близких к ним нефтегазоматеринских очагов. В результате исследований оказалось, что рифейские аргиллиты и кембрийские доломиты содержат синбитумоиды и относятся нефтематеринским породам различной зрелости. В вендских песчаниках и кембрийских доломитах растворены эпибитумоиды, мигрировавшие из одного источника УВ. Скорее всего, это более древние рифейские или вендские отложения Курейской синеклизы. Для более корректного прогноза нужно провести бассейновое моделирование и проследить путь миграции на этих участках.

1. Анциферов А.С., Бакин В.Е., Варламов И.П. и др. Геология нефти и газа Лено-Тунгусской провинции. - М: Недра, 1977, с. 205;
2. Конторович В. А., Беляев С.Ю., Конторович А. Э. Критерии классификации платформенных структур // Геология, геофизика и разработка нефтяных и газовых месторождений, 2004, № 1, с. 47-58;

АДАПТАЦИЯ УПЛОТНЕННЫХ СЕЙСМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Малышев М.В.

ОАО СНГЕО, Самара

Malyshev_mv@bk.ru

Актуальность данной работы подтверждается быстро растущим интересом со стороны компаний-заказчиков сейсморазведочных работ на повышение производительности и эффективности сейсморазведки. Одной из методик, позволяющих увеличить производительность сейсморазведочных работ, является высокопроизводительная сейсморазведка slip-sweep [2]. Однако, речь в докладе пойдет не о самой методике, а о модификации данных, полученных с ее использованием, для упрощения дальнейшей работы с ними.

В производственном режиме одной из первых в использовании методики проведения высокопроизводительной сейсморазведки 3Д с уплотнением ПВ на единицу площади стала компания ОАО СНГЕО. Работы проводились в 2012 году на трех лицензионных участках ОАО «Самаранефтегаз» общей площадью 455 км². В результате чего удалось повысить производительность сейсморазведочных работ на 60%, а также повысить качество сейсмических данных за счет уплотнения систем наблюдения без падения производительности работ [1].

Несмотря на все плюсы данной методики у нее есть и свои недостатки. Вследствие уплотнения системы наблюдения в 4 раза, увеличивается и объем получаемых данных. Для примера, по площади 200 км² полевой сейсмический материал, отработанный по стандартной методике, будет занимать порядка 250Гб дискового пространства, а по высокопроизводительной методике с уплотнением – 1000Гб, что значительно усложняет последующие процедуры присвоения геометрии и обработки, и увеличивает время на обработку на вычислительных центрах геофизических компаний, а также делает практически невозможной обработку нескольких крупных площадей одновременно.

Для решения этой проблемы были поставлены следующие задачи:

- сгруппировать полевой материал по специальной методике;
- выполнить переобработку оптимизированного полевого материала;
- проанализировать полученные результаты.

По окончании выполнения поставленных задач стало очевидно, что за счет уменьшения объема данных почти в 4 раза значительно сократится и время, затрачиваемое на расчеты на серверах вычислительных центров геофизических компаний. Также предлагаемая методика группирования позволяет повысить качество обработки и улучшить прослеживаемость отражающих горизонтов на сейсмических разрезах. Немаловажным является и то, что внедрение данной методики группирования в производственный процесс не требует никаких материальных вложений и позволит сэкономить средства геофизических компаний.

1. Опыт проведения сейсморазведочных работ МОГТ-3D по методике Slip-Sweep / Г.Г. Гилаев, А.Э. Манасян, И.Г. Хамитов, А.Ф. Исмагилов, В.С. Жужель, В.Н. Кожин, В.И. Ефимов // Нефтяное хозяйство. 2013. № 4. - С. 82-85.
2. Высокопроизводительный Вибросейс / Дени Мужно // Приборы и системы разведочной геофизики. 2009. №3.
3. Шнеерсон М.Б., Жуков А.П. Сейсморазведка с вибрационными источниками. – Тверь, ООО «Издательство ГЕРС», 2011. – 412с.

МОБИЛЬНЫЙ СОЛНЕЧНЫЙ ПАРОГЕНЕРАТОР ДЛЯ ТЕПЛООВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ В УСЛОВИЯХ НЕФТЕПРОМЫСЛА

Мамедов Фуад

*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия, Баку, Азербайджан
fm.solarpower@gmail.com*

В настоящее время на некоторых месторождениях, осуществляются тепловые методы воздействия на нефтяной пласт и призабойную зону скважин [1].

Для получения водяного пара высоких параметров и закачки его в пласт, спроектированы и изготовлены традиционные мобильные парогенераторы на основе природного газа или термоэлектрического нагревателя, производительностью 3-5 т пара в 1 ч, давлением до 100-120 ат и температурой 300-400°C [2]. Для продолжительной работы таких парогенераторов необходимо иметь коммуникации и общую сеть. Эти парогенераторы используют огромное количество традиционного топлива. При сгорании этих энергоносителей загрязняется окружающая среда.

Решение этой проблемы можно осуществить с помощью высокопотенциальных энергоустановок использующих тепло солнечной энергии. Разработанные нами установки параболических и параболицилиндрических зеркал фасетного типа, дает возможность сэкономить 75 – 80 % условного топлива. Для получения пара с вышепоказанными параметрами, требуется зеркальной поверхности с площадью 45 м². Полученные нами экспериментальные результаты на пилотной установке показывают что, зеркальную высокопотенциальную установку можно эффективно эксплуатировать 280 – 310 дней в году. При этом, срок окупаемости получается 4 – 6 лет. Кроме того, для работы солнечных установок не требуется дополнительных текущих и сервисных затрат.

Для применения и эффективного использования солнечных парогенераторов в условиях нефтепромыслов, надо учесть потенциал солнечной энергии и параметры технологического процесса.

1. Мирзаджанзаде А.Х., Аметов И.М. Прогнозирование промысловой эффективности методов теплового воздействия на нефтяные пласты. М.: Недра, 1983.-222 с.
2. Бернштейн М.А. 1971. Тепловые методы разработки нефтяных месторождений и обработки призабойных зон пласта. ВНИИОЭНГ, 325 с.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДВУМЕРНОГО ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЁН РЕЛАКСАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ФЛЮИДОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ КЕРНОВ

Мельникова Д.Л., Дорогоницкий М.М., Гизатуллин Б.И., Зарипов Т.А.

*Институт Физики КФУ, Казань
melndaria@gmail.com*

В последнее время предложен ряд новых методик исследования нефти и нефтяных коллекторов на основе метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [1]. Одной из перспективных направлений изучения нефтяных коллекторов на молекулярном уровне является новая методика, позволяющая получить информацию о типе пластовых флюидов по 2D-картам совместного распределения времён спин-решёточной и спин-спиновой магнитной релаксации [2].

2D-измерения времён ядерной магнитной релаксации производились на спектрометре Testag Apollo с частотой резонанса на протонах ^1H 300 МГц на кафедре физики молекулярных систем Института физики КФУ. Была применена комбинированная последовательность инверсии-восстановления с последовательностью Карра-Парселла-Мейбума-Гилла (ИВ-КПМГ) [2, 3].

О подвижности флюидов, насыщающих керн, можно судить по отношению измеренных времён релаксации T_1 и T_2 . Существует два характерных предельных варианта этого поведения. В случае когда $T_1 \approx T_2$, можно утверждать, что в породе содержится высокоподвижный флюид с малой вязкостью. В другом случае, когда $T_1 \gg T_2$ можно говорить о присутствии малоподвижных тяжёлых компонент в составе флюида.

Полученные результаты показывают, что на основе анализа 2D-карт распределений T_1 - T_2 возможно проведение количественной типизации флюид в кернах посредством определения характерного времени спин-решёточной релаксации $T_{1\text{cutoff}}$. Отметим, что величина $T_{1\text{cutoff}}$ должна быть предварительно определена по глинистости породы.

1. Yi-Q. Song “Recent Progress of Nuclear Magnetic Resonance Applications in Sandstones and Carbonate Rocks” / Yi-Qiao Song [Электронный ресурс] //2010, vol. 9, pp. 828-834.
2. Yu-Q. Song, L. Venkataramanan, M.D. Hurlimann, M. Flaum, P. Frulla, C. Straley “ T_1 - T_2 correlation spectra obtained using a fast two-dimensional Laplace inversion” / Yu-Q. Song, [Текст] // J. Magn. Reson., 2002, n.154, pp.261–268.
3. H. Peemoeller, R. K. Shenoy, and M. M. Pintar, “Two-dimensional time evolution correlation spectroscopy in wet lysozyme” // J. Magn. Reson., 1981, n.45, p.193.

ИНГИБИТОРЫ КОРРОЗИИ ПРОЛОНГИРОВАННОГО ДЕЙСТВИЯ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ ВЫНОСОМ

Палей Р.В.^a, Никитин А.А.^a, Зайков Е.Н.^b, Солодов В.А.^a

^a ООО «Миррико менеджмент», Казань

^b ООО «Миррико», Казань

palei_r_v@mirrico.com

Эксплуатация удаленных месторождений с низкими дебитами и ограниченной доступностью сопровождаются значительными затратами на вспомогательную работу, которая включает доставку техники, реагентов, специалистов, и обеспечение их бесперебойной работы.

Научно-инжиниринговым центром ГК «Миррико» разработаны новые формы ингибиторов коррозии с контролируемым выносом активных компонентов, обеспечивающие защиту оборудования в течение продолжительного межремонтного интервала работы скважины. Данный тип реагента имеет вид насыпных гранул различной формы, диаметром от 3 до 15 мм. Гранулы представляют собой полимерную матрицу, наполненную активными компонентами ингибиторов коррозии, и модификаторами размеров пор. Модификаторы размера пор предоставляют возможность варьировать скорость высвобождения активных компонентов с поверхности гранул, обеспечивая равномерную и продолжительную во времени работу реагента.

Данная технология позволяет гибко подходить к таким условиям эксплуатации скважин как температура, дебит, обводненность, а также регулировать скорость и время высвобождения активных компонентов.

Для обеспечения эффективной работы реагента существует два вида доставки реагента в рабочую зону:

-рассчитанное количество реагента загружается через затрубное пространство, продавливается технологической жидкостью в зумпф скважины.

-рассчитанное количество реагента загружается перфорированный контейнер, далее контейнер подвешивается под ЭЦН.

Технология применения реагентов такого типа позволяет сокращать материальные издержки на эксплуатацию скважин.

МЕТОД ОЦЕНКИ СКОРОСТИ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ АКТИВНЫХ ОСНОВ ИЗ КАПСУЛИРОВАННЫХ РЕАГЕНТОВ

Никитин А.А.^a, Палей Р.В.^a, Зайков Е.Н.^b, Солодов В.А.^a

^a *Департамент по инновациям, Научно-инжиниринговый центр*

ООО «Миррико менеджмент», Казань

^b *ООО «Миррико», Казань*

nikitin_a_a@mirrico.ru

Общеизвестна проблема защиты оборудования от коррозии и солеотложений при добыче нефти, особенно на поздних стадиях эксплуатации скважин. Применение химических реагентов - ингибиторов позволяет повысить рентабельность добычи, несмотря на применение дозирующего оборудования, расходов на химикаты, трудо- и энергозатрат.

С целью повышения экономической эффективности добычи нефти при применении ингибиторов на осложненных скважинах ГК «Миррико» разработаны продукты с контролируемым высвобождением активных основ – капсулированные ингибиторы коррозии и солеотложения (результаты ОПИ см. в [1]). Важнейшей характеристикой новых продуктов выступает способность поддерживать концентрацию ингибитора на требуемом уровне (1-10 ppm) в течение длительного интервала межремонтного пробега (год и более). Разработка методик оценки выноса активного вещества из «капсул» на уровне ничтожных концентраций становится самостоятельной научно-практической задачей, решение которой позволит не только оценить качество продукта, но и получить сведения фундаментального характера. В научно-инжиниринговом центре ГК «Миррико» разработан способ оценки выноса реагентов из капсулированных продуктов в динамическом режиме, максимально приближенном к условиям добычи на скважинах. Предлагаемая методика отличается простотой аппаратного оформления и использованием стандартных материалов, а также позволяет варьировать различные параметры (температура, скорость потока, площадь межфазового контакта, объем отбираемой пробы).

1. А.В. Воловоденко, А.В. Софронов, А.Ю. Жуков, О.С. Асмаев. *Нефтяное хозяйство*, 2013, 1, 2-4.

ЗАДАЧА МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЯ В НЕФТЯНОМ ПЛАСТЕ

Михридинова Н.Р.

ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный авиационный университет» (УГАТУ), г. Уфа
 mikhridinova@yandex.ru

В настоящее время для нефтедобычи в России характерна такая структура, в которой большую долю составляют трудноизвлекаемые запасы нефти, поэтому необходимы новые математические методы моделирования среды, целью которых является исследование возможности добычи нефти из таких зон застоя.

В силу нелинейности условий фильтрации в пористой среде возникают проблемы, связанные с невозможностью полноценной добычи нефти из зон, в которых не происходит нормального тока ньютоновской жидкости. Данный доклад посвящен задаче фильтрации методами Теории функций комплексного переменного (ТФКП), решением которой являются параметры участка (форма, структура, характеристики на границе), что позволяет ответить на вопрос: возможно ли бурение в таком участке и как найти рациональное расположение скважин во избежание зон застоя [1].

Таким образом, результаты данного исследования позволяют разработать ряд мер, которые будут способствовать полноценному использованию ресурсов геологической системы и увеличению объема добываемой нефти без нанесения вреда естественной среде.

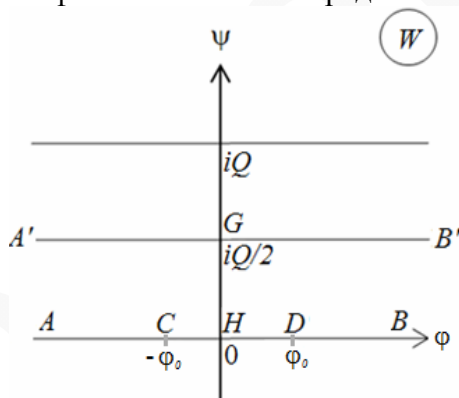


Рисунок 1 Физическая плоскость: a – сторона квадрата; CHD – линия свободной поверхности.

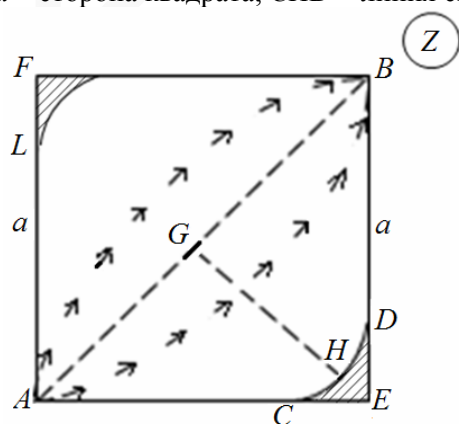


Рисунок 2. Плоскость комплексного потенциала: на $ACDB$ $\psi=0$; Q - расход нагнетательной и добывающей скважин.

1. Житников В. П., Шерыхалина Н.М., Муксимова Р. Р. Специальные главы теории функций комплексного переменного (Конформные отображения и решение задач математического моделирования) : [Текст]: Учебное пособие. – Уфа: УГАТУ, 2012. – 60 с.

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО СОРБЕНТА И ПРИМЕНЕНИЕ ЕГО ПРИ РЕКУЛЬТИВАЦИИ НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ ПОЧВ

Мотина Т.Ю., Давлетшина А.Я.

*ГНУ Татарский НИИАХП Россельхозакадемии, Казань
kindness2006@mail.ru*

В последние годы в качестве сорбентов, мелиорантов, удобрений и стимуляторов роста растений, а также для улучшения агрохимических, агрофизических и биологических свойств почвы широко применяются природные минералы и их активированные аналоги. В частности положительные результаты повышения сорбционной активности были получены при преобразовании термо- и механоактивированного бентонита (бентопорошка) в наноразмерное вещество [1].

Ультразвуковую дисперсию бентопорошка проводили при помощи установки УЗУ-0,25, изучение его структуры – на сканирующем зондовом микроскопе MultiMode V (США).

Для повышения активности бентопорошка, полученного из бентонита Тарн-Варского месторождения РТ, использовали методы нанотехнологий. Ультразвуковая дисперсия бентопорошка в деионизированной воде (соотношение 1:4) способствовала увеличению его объема и контактной сорбционной площади в 5-10 раз. Методом сканирующей зондовой микроскопии установлено, что наноразмерный бентонит состоит из частиц размером 33,0-95,0 нм, при этом более 50,0 % их количества – от 33,0 до 35,0 нм.

При применении наноразмерного бентонита для сбора нефти с поверхности загрязненных объектов удельная емкость сорбции составила 8-10 г/г сорбента, что значительно выше по сравнению с бентопорошком (3-5 г/г). Кроме того, при рекультивации наносорбент не требует удаления, так как является в дальнейшем улучшителем структуры почвы и источником минерального питания для микроорганизмов-деструкторов.

Таким образом, применение наноразмерного бентонита способствует усилению эффективности рекультивационных мероприятий и быстрому возврату нарушенных почв в активное землепользование.

1. Яппаров А.Х., Ежкова А.М., Яппаров И.А., Ежков В.О., Нефедьев А.Е., Мотина Т.Ю., Низамеев И.Р., Кипрова А.В. Повышение сорбционной активности бентонита при преобразовании его в наноразмерное вещество. – Матер. Межд. науч.-практ. конф. «Достижения и перспективы развития биотехнологий». – Саранск, 2012. – С. 111-112.

САМООТКЛОНЯЮЩАЯСЯ КИСЛОТНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СКВАЖИН

Мустафин Р.Р., Куряшов Д.А.

КНИТУ-КХТИ, Казань
rrm464@gmail.com

Одним из наиболее эффективных методов интенсификации добычи нефти из карбонатных коллекторов является применение самоотклоняющихся кислотных составов, представляющих собой раствор вязкоупругих ПАВ в соляной кислоте [1]. В основе действия таких составов лежит их способность многократно увеличивать вязкость в ходе реакции с карбонатной породой. Образующийся в результате гель создает эффективное локальное отклонение новых порций кислотного состава к ранее необработанным низкопроницаемым участкам пласта. Таким образом, применение кислотного состава на основе вязкоупругих ПАВ обеспечивает равномерную интенсификацию всего продуктивного интервала.

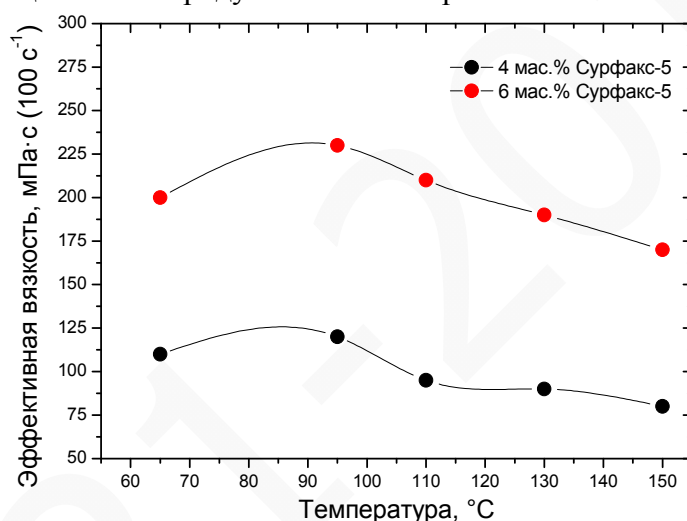


Рисунок 1. Зависимость эффективной вязкости, прореагировавшего кислотного состава на основе гелеобразователя от температуры.

Существенным фактором, ограничивающим применение самоотклоняющихся кислот, является значительное снижение их вязкости при температурах выше 90°C. Это ограничивает масштаб применения данного метода, поскольку температура в карбонатных коллекторах может быть значительно выше. Применение в составе самоотклоняющихся кислотных композиций нового гелеобразователя на основе высокотемпературных вязкоупругих ПАВ позволяет решить данную проблему, так как они обладают значительно более широким рабочим интервалом температур. Считается, что для эффективного отклонения потоков необходима вязкость, не менее 100 мПа·с (100 с⁻¹). Из рисунка 1 видно, что применение нового гелеобразователя позволяет достигать требуемых значений вязкости вплоть до 150°C.

Преимущества нового кислотного состава:

- 1) технология эффективна при пластовых температурах до 150°C;
- 2) технология обладает «самоотклоняющимся» характером;
- 3) обеспечивает равномерную интенсификацию всех зон продуктивного пласта;
- 4) может использоваться как единственная технологическая жидкость для обработки

1. Chang, F. A Novel Self-Diverting-Acid Dev. for Matrix Stimulation of Carb. Reservoirs / F. Chang, Qi Qu, W. Frenier // SPE eLibrary paper number 65033. – 2001. - February.

ВЫСОКОПОРИСТЫЙ ПРОНИЦАЕМЫЙ ЯЧЕИСТЫЙ МАТЕРИАЛ - ПЕРСПЕКТИВНЫЙ НОСИТЕЛЬ КАТАЛИЗАТОРА СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА: ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА НА ДИСПЕРСНОСТЬ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА

Назаров М.В., Ильясов И.Р., Ламберов А.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
humic-acid@mail.ru*

В [1] было установлено, что использование в качестве носителя $\delta\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ -ВПЯМ для синтеза катализаторов обеспечивает формирование более однородного по зарядовому состоянию диапазона распределения частиц палладия с поверхностными атомами, обладающими большей электронной плотностью на валентных орбиталях, по сравнению с традиционными катализаторами, синтезированными с использованием $\delta\text{-Al}_2\text{O}_3$. Однако каталитическое поведение нанесённого палладия [2] сильно зависит от множества факторов, в том числе и от прекурсора металла.

В настоящей работе для определения эффектов прекурсоров металла на структурные свойства и каталитические характеристики в реакции гидрирования ацетилена на нанесённых палладиевых катализаторах был исследован высокопористый проницаемый ячеистый материал [$\delta\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ -ВПЯМ] в качестве носителя, а также два прекурсора палладия [$\text{Pd}(\text{OOCCH}_3)_2$ и $\text{Pd}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_2$]. Установлено, что конверсия ацетилена образцов синтезированных с использованием *ацетилацетонатного* комплекса выше, чем для *ацетатных* катализаторов, что обусловлено формированием частиц металла, характеризующихся более высокой концентрацией поверхностных центров. Обнаружено, что селективность превращения ацетилена в этилен для *ацетатных* систем в 1,3 раз больше, чем для *ацетилацетонатных* катализаторов и обусловлено формированием поверхностных атомов активного компонента, характеризующихся более высокой электронной плотностью на валентных орбиталях.

1. И.Р. Ильясов, М.В. Назаров, А.А. Ламберов. Катализ в промышленности, 2014, 6, 50-58.
2. Z. Karpinski. Adv. Catal, 1990, 37, 45.

ПРИМЕНЕНИЕ ПЕТРОФИЗИКИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПРОДУКТИВНЫХ ПЛАСТОВ

Назаров А.А.

*ООО «СамараНИПИнефть», Самара
taurus91@inbox.ru*

Одним из основных параметров, характеризующий проводимость коллектора, способность пород пласта пропускать к забоям скважин нефть и газ при наличии перепада между пластовым и забойным давлениями, является проницаемость. В то же время с оценкой именно этой величины возникает больше всего трудностей.

Её среднее значение оказывает определяющее воздействие на продуктивность скважин, а неоднородность проницаемости по горизонтали и вертикали влияет на коэффициент охвата при заводнении и тем самым на коэффициент извлечения нефти. Поэтому при построении гидродинамической модели залежи весьма важно определить поле проницаемости с минимальной погрешностью.

В типовом комплексе ГИС отсутствуют методы для прямого определения величины абсолютной проницаемости, поэтому реальной является только возможность прогнозирования этого параметра по комплексным данным с использованием различных вариантов корреляционных зависимостей. Рассмотрим два варианта:

1) По керну определяется корреляционная зависимость между пористостью и проницаемостью. Далее по известным значениям пористости, подсчитанной методами имеющегося комплекса ГИС вычисляется по зависимости проницаемость.

2) Прогноз проницаемости с помощью гидравлических единиц потока. Является одним из наиболее современных и точных способов прогнозирования проницаемости и применяется, когда остальные приёмы не работают. Основан на классификации коллекторов, как совокупности гидравлических единиц потока (Hydraulic Flow Units), которые характеризуются индикатором гидравлической единицы FZI (Flow Zone Indicator). FZI – это параметр, характеризующий структуру порового пространства коллекторов. Зная FZI, легко найти проницаемость через пористость. В нахождении и разделении величины $F_s \tau^2 S_{gv}^2$ заключается концепция классификации гидравлических единиц коллектора.

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА АКТИВНОЙ ОСНОВЫ И РАСТВОРИТЕЛЯ НА ИНГИБИРОВАНИЕ СОЛЕОТЛОЖЕНИЙ В ПРОЦЕССАХ НЕФТЕДОБЫЧИ

Никаньшин А.Д.^а, Ракипов И.Т.^а, Герасимов А.В.^а, Лужецкий А.В.^б, Варфоломеев М.А.^а

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

^б Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина
17071996sasha@gmail.com

Увеличение интенсивности добычи нефти приводит к тенденции «старения» нефтяных месторождений, что влечёт за собой изменения в обводнённости, соотношении природных стабилизаторов и других веществ, что благоприятствует выпадению неорганических солей в процессе добычи нефти. Выпадение солевых осадков в зоне нефтяного пласта является одной из важных проблем, которая приводит к снижению запланированных объёмов добычи нефти. Существуют различные способы борьбы с солеотложениями, но наиболее эффективным является химический метод, который предполагает использование особых веществ для предотвращения солеотложений – ингибиторов.

Цель исследования – создание эффективных композиций ингибиторов солеотложений на основе фосфорсодержащих соединений и поверхностно-активных веществ (ПАВ), а также их применение для предотвращения выпадения солей кальция в модельных пластовых водах нефтяных месторождений.

В настоящей работе мы затронули три основных вопроса, связанных с разработкой эффективных ингибиторов солеотложений. Во-первых, было изучено влияние соотношений фосфорорганических соединений нитрилотриметилфосфоновой и оксиэтилендифосфоновой кислот на эффективность ингибирования отложения солей, определены оптимальные соотношения использования активных форм. На втором этапе проанализировано влияние поверхностно-активных веществ в качестве присадок к активной форме ингибиторов солеотложений. Обнаружено, что наиболее эффективными реагентами являются композиции с присадкой катионного поверхностно-активного вещества на основе алкидиметилбензиламмонийхлорида C16-C18. На последнем этапе проанализировано влияние растворителя на эффективность ингибирования солеотложений и температурный диапазон использования реагента. Было показано, что введение метанола в состав растворителя не существенно влияет на эффективность ингибиторов солеотложений, но при этом значительно понижает температуру застывания реагента. Рекомендованный состав растворителя содержит воду и метанол в соотношении 5:2.

В работе предложены композиции ингибиторов солеотложений, которые обладают высокой эффективностью и низкой температурой застывания. Данные реагенты могут найти практическое применение на нефтяных месторождениях Татарстана и других регионов России.

УТОЧНЕНИЕ ЛИТОЛОГИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ ПЛАСТОВ А-2 И А-3 ВЕРЕЙСКОГО ГОРИЗОНТА С ПОМОЩЬЮ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ИССЛЕДОВАНИЙ ШЛАМА И КЕРНА

Николаева Л.А.^{a,b}

^a ООО «СамараНИПИнефть», Самара

^b Самарский государственный технический университет, Самара
nikolaeva_lida@bk.ru

В ходе работы над данной темой, был рассмотрен каменный материал по одному из месторождений Самарской области. Пласты А-2 и А-3 верейского горизонта, с геологической точки зрения недостаточно изучены, отличаются сложным строением, большим количеством непроницаемых пропластков и смешанным типом разреза.

Данная работа целесообразна и актуальна в настоящее время, так как для дальнейшей эксплуатации пластов требуется уточнение их литологического строения и насыщения.

Дополнительные исследования шлама и керна заключались в проведении петромагнитного анализа и литолого-фациальных исследований. Был изучен каменный материал 8 скважин: описана литология и построены две кривые К (Каппа, или по другому магнитная восприимчивость – характеристика, зависящая от концентрации ферромагнитных минералов в породе) и ΔК (термокаппаметрия – изменение магнитной восприимчивости после нагрева в электропечи).

Полученные результаты по петромагнитным и литолого-фациальным исследованиям, мы сравнили с данными ГИС. Построены корреляционные схемы. Выявлено несколько закономерностей, которые прослеживаются во всех, анализируемых скважинах: повышение значений К в некоторых интервалах, свидетельствует о увеличении глинистой составляющей и уменьшение доли песчаника и алевролита; понижение значений К, наоборот, свидетельствует о увеличении песчанистой части, чаще всего именно в таких интервалах проявляются псевдоолиты и органические остатки; также мы выявили, что в интервалах с повышенными значениями К, шлам укрупнен, а в интервалах с пониженными значениями К, зерна шлама мелкие, еле различимы.

Резюмируя результаты комплексных исследований шлама, можно утверждать, что петромагнитный метод исследований шлама и керна, в комплексе с литологическими данными и материалами ГИС, позволяет наиболее точно проводить детальное расчленение и корреляцию разрезов, реконструировать седиментационную цикличность и выявлять перерывы в осадконакоплении.

НЕФТЕГАЗОНОСНОСТЬ ВОСТОЧНО-ЧЕРНОМОРСКОГО РЕГИОНА НА ОСНОВЕ БАССЕЙНОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Панков В.В.

*Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Москва
vicvicpankov@gmail.com*

Бассейновое моделирование проводилось в программном пакете Temis Flow по профилю Восточно-Черноморская впадина – вал Шатского – Туапсинский прогиб. Моделирование включало анализ широкого спектра процессов и состояло из: создания тепловой модели прогрева региона, с введением поправки на тепловую реактивизацию и растяжение литосферы бассейна во время рифтогенеза; создания литологической и геохимической модели; расчёта катагенетической преобразованности нефтематеринских толщ, количества и качества сгенерированных УВ и их дальнейшей миграции; выделения наиболее перспективных зон аккумуляции УВ и оценка степени сохранности залежей.

По результатам 2D моделирования породы раннеюрского и среднеюрского комплекса к настоящему времени полностью реализовали свой генерационный потенциал (в депоцентрах прогибания), либо находятся в главной зоне газогенерации (ГЗГ) (на поднятии) – граница главной зоны нефтеобразования (ГЗН) в исследуемом районе проходит на глубине около 5800-6000 м (2км из которых – водная толща). Породы палеоцен-эоценового и майкопского комплекса в депоцентрах прогибания находятся в ГЗН либо частично в ГЗГ и не так давно начали реализовывать свой потенциал.

На основе построенной модели были выделены и оконтурены перспективные зоны аккумуляции УВ и дана степень оценки рисков при бурении для выделенных комплексов для структур в погруженных зонах и, конечно, на поднятиях.

1. Афанасенков А.П. и др. «Геологическое строение и углеводородный потенциал Восточно-Черноморского региона», М.: Научный мир, 2007 . 172 с.
2. Баженова О.К. и др. «Геология и геохимия нефти и газа», М., МГУ, 2000, 183с.
3. Галушкин Ю.И. «Моделирование осадочных бассейнов и оценка их нефтегазоносности», М.: Научный мир, 2007. – 457 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРАЕВОГО УГЛА СМАЧИВАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД НА УСТАНОВКЕ ОСА 15ЕС

Полишвайко Д.В., Морозюк О.А., Дуркин С.М.

Ухтинский Государственный Технический Университет, Ухта
denispolishvayko@gmail.ru, omorozuk@ugtu.net, durkin@bk.ru

В настоящее время доля месторождений со сложными реологическими характеристиками и неоднородным пустотным пространством неуклонно растет. Правильный и обоснованный выбор методов повышения нефтеотдачи пластов терригенных и карбонатных коллекторов напрямую связан с механизмом смачиваемости и поверхностного натяжения на границе раздела горная порода-жидкость. Таким образом, роль лабораторных исследований очевидна при выборе той или иной технологии воздействия на продуктивный пласт.

Оценку смачиваемости горных пород при добавлении различных по составу растворов можно измерить различными установками и приборами. Одной из таких установок является ОСА 15ЕС, приобретенная «Центром исследования керна» на базе Ухтинского государственного технического университета.

Целью данной работы является определение краевого угла смачивания Усинской и Ярегской высоковязкой нефти для определения гидрофобности/гидрофильности образца твердой породы на установке ОСА 15ЕС, что в дальнейшем позволит обосновать эффективные технологии повышения нефтеотдачи пласта для месторождений Тимано-Печорской нефтегазоносной провинции.

Краевой угол смачивания измеряется по методу лежащей капли. Для этого капля освещается с одной стороны источником рассеянного света, что позволяет наблюдать с помощью высокоточной видеокамеры с другой стороны контур этой капли. По заранее выбранному методу расчета программное обеспечение определяет краевой угол смачивания.

УНИВЕРСАЛЬНАЯ ШАГАЮЩАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ГЕОЛОГОРАЗВЕДКИ И НЕФТЕДОБЫЧИ

Папашвили Э.Д., Сковцова А.А.

*МОУ «Гимназия №5», ЦФМО, Юбилейный
elvinapar@live.ru, saa2509@mail.ru*

Время отказа от колеса как средства передвижения уже наступает. Из средней полосы люди постепенно начинают перемещаться к северу, в тундру, в Арктику. Это связано с освоением новых промышленных районов. Залежи полезных ископаемых в Заполярье практически не тронуты человеком. Прочитайте статью Президента России В.В.Путина об освоении Арктики: 36 млрд. баррелей и \$100 млрд. инвестиций в ближайшие 10 лет [1]. Страны, корпорации, фирмы, военные – многие стремятся в Арктику. А на чем они будут там передвигаться? Полтора века назад гениальный русский ученый и инженер П.Л.Чебышев понял преимущества шага и предложил замечательную стопоходящую машину. Принцип действия шагающих механизмов основан на преобразовании вращательного движения в поступательное [2,3]. Для применения в шагающей платформе были изучены работы П.Л.Чебышева, а потом изготовлены действующие модели шагающей платформы [4]. Шагающий механизм может быть основой или подвижным фундаментом для оборудования геологоразведки и нефтедобычи. При реализации шагающей конструкции грунт не будет повреждаться [5]. Экология тундры и шельфа будет полностью сохранена. Если же окажется, что площади опоры мало, то стопа может быть увеличена на месте практически неограниченно.

1. Eni и "Роснефть": за нефтью в Арктику // Энергобеларусь. Электронный ресурс http://energobelarus.by/news/V_mire/eni_i_quot_rosneft_quot_za_neftyu_v_arktiku/
2. Папашвили Э.Д., Сковцова А.А. Шагоход для тундры, Арктики и для быта. <http://youtu.be/7ojY7M-ON0M>
3. Папашвили Э.Д., Сковцова А.А. Шаговые двигатели, или чего не было у П.Л.Чебышева. http://youtu.be/2de2t_1BtU
4. Сковцова А.А., Папашвили Э.Д. Универсальная передвижная шаговая платформа для освоения тундры и Арктики // Наука и инновации в технических университетах: материалы Восьмого Всероссийского форума студентов, аспирантов и молодых учёных. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. - С.6-8. - ББК 30.1 Н 34.
5. Сковцова А.А., Папашвили Э.Д., Лебедев В.В. Шагоход как подвижный фундамент в тундре и в Арктике //Международная научная конференция «Интеграция, партнёрство и инновации в строительной науке и образовании». – М.: МГСУ-МИСИ, 12-13 ноября 2014 г.

УСЛОВИЯ ФОРМИРОВАНИЯ И ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПОРОД-КОЛЛЕКТОРОВ ПЛАСТА БС₁₀¹ ЗАПАДНО-УСТЬ-БАЛЫКСКОГО НЕФТЯНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ (ХМАО)

Присяжнюк О.Н.

*Институт природных ресурсов НИ ТПУ, Томск
pon0792@mail.ru*

В связи с истощением юрских пластов Западно-Сибирской провинции все большее внимание отводится изучению и оценке нижнемеловых залежей, связанных с клиноформными телами, обусловленными как их сложным геологическим строением, так и трудностями их поиска. Объектом исследования являются нижнемеловые отложения сортымской свиты, изученные на примере Западно-Усть-Балыкского нефтяного месторождения (ХМАО). Продуктивным объектом является пласт БС₁₀¹, относящийся к Покачевской клиноформе.

С целью выявления особенностей геологического строения и закономерностей распространения коллекторов с помощью программного обеспечения (ПО) Prime и Petrel проведена корреляция продуктивного пласта БС₁₀¹, построены карты эффективных и эффективных нефтенасыщенных толщин, распределения средних значений пористости.

В ходе корреляции разрезов скважин выявлены закономерности изменения мощностей и литологического состава отложений. На основе сейсмического GRID по горизонту НБС₁₀ и скважинных данных построена структурная карта по кровле пласта БС₁₀¹.

Для выделения и характеристики коллекторов проведена интерпретация ГИС. Коэффициент пористости рассчитывался по кривой ГК, за предел коллектора принято значение пористости 15,8 %. В пределах месторождения выделены 3 литологически экранированные залежи.

В результате исследований выявлено, что формирование отложений связано с обстановками мелководного шельфа, в которых формируются линзообразно-выпуклые ассиметричные тела, для которых характерно переслаивание песчаных и непроницаемых глинистых и глинисто-алевритовых пород. Увеличение общих толщин происходит в направлении с СЗ на ЮВ.

РАЗРАБОТКА КАТАЛИЗАТОРОВ ПРОЦЕССА ГИДРОДЕОКСИГЕНАЦИИ БИОДИЗЕЛЯ С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЦЕТАНОВОЙ ДОБАВКИ К МОТОРНЫМ ТОПЛИВАМ

Родина В.О., Яковлев В.А.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
dundich@catalysis.ru*

В последнее время биомасса рассматривается как одна из альтернатив традиционным ископаемым энергоносителям – нефти, природному газу, углю. Одним из наиболее перспективных биотоплив является биодизель, который представляет собой смесь метиловых эфиров жирных кислот и используется как улучшающая добавка к традиционным дизельным топливам (не более 20%). Сам по себе биодизель не может использоваться в дизельных двигателях. Проблема заключается в более высокой вязкости биодизеля и низкой стабильности. Основной причиной низких эксплуатационных характеристик является высокое содержание кислорода в биодизеле (11-12%). В связи с этим, перспективным является исследование процесса гидродеоксигенации биодизеля для получения высокоцетановых углеводородных фракций. Однако необходимо отметить, что для данных процессов, в отличие от процессов сероочистки, необходимо использовать несурьфидированные катализаторы, из-за низкого содержания серы в биодизеле. Поэтому разработка несурьфидированных катализаторов гидродеоксигенации является основной целью работы. В настоящей работе был проведен скрининг катализаторов на основе благородных металлов, которые позволяли эффективно деоксигенировать метиловые эфиры жирных кислот, до соответствующих алканов. Наибольшую активность в исследуемом процессе проявили Rh/ZrO₂-CeO₂ и Ru/ZrO₂-CeO₂ катализаторы. Однако такие катализаторы являются неперспективными для крупнотоннажных процессов из-за высокой стоимости. Было показано, что более дешевые никелевые системы, так же позволяют эффективно деоксигенировать кислородсодержащие соединения до соответствующих углеводородов, а введение в катализатор меди, не только модифицирует свойства никель содержащих каталитических систем, но и позволяет проводить процесс гидродеоксигенации биодизеля при более оптимальных реакционных условиях [1]. Исследуемые катализаторы были охарактеризованы различными физико-химическими методами (БЭТ, Элементный анализ, Адсорбция СО, ТГА, ТПВ, РФА и ЭМ), что позволило оценить влияние состава катализатора на его активность, обнаружить образование твердого раствора Ni_{1-x}Cu_x и определить изменения в структуре катализатора при проведении ресурсных испытания [2].

1. V.A. Yakovlev, S.A. Khromova, O.V. Sherstyuk, V.O. Dundich, D.Yu. Ermakov, V.M. Novopashina, M.Yu. Lebedev, O. Bulavchenko, V.N. Parmon Development of new catalytic systems for upgraded bio-fuels production from bio-crude-oil and biodiesel, Catalysis Today 144 (2009) 362–366
2. В. О. Дундич (Родина), С. А. Хромова, Д. Ю. Ермаков, М. Ю. Лебедев, В. М. Новопашина, В. Г. Систер, А. И. Ямчук, В. А. Яковлев Исследование никелевых катализаторов реакции гидродеоксигенации биодизеля, Кинетика и катализ, 2010, т. 51, № 5, с. 728–734

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОВЛЕКАЕМЫХ ЗАПАСОВ В РЕЗУЛЬТАТЕ ПРОВЕДЕНИЯ ГИДРОРАЗРЫВА ПЛАСТА

Рыбаков А.А., Шайдуллин Л.К.

*Альметьевский государственный нефтяной институт, Альметьевск
akram-lcf@rambler.ru*

Одной из основных проблем разработки нефтяных месторождений на поздней стадии разработки является мониторинг выработки остаточных запасов нефти. Для более полной выработки остаточных запасов необходимы оценка качества вовлекаемых в разработку запасов нефти и выбор на её основе технологии нефтеизвлечения, полностью соответствующей геолого-промысловым условиям и требованиям конкретного объекта. Гидравлический разрыв пласта (ГРП) – мощное средство воздействия на пласт, которое проявляется не только в интенсификации добычи, но и в существенном повышении текущей и конечной нефтеотдачи пласта, за счет приобщения к выработке слабо дренируемых зон и пропластков с непретрансформированными запасами нефти. Для оценки эффективности ГРП немаловажное значение имеет определение качества вовлекаемых запасов по объекту в целом и отдельно по каждой скважине. Предложена методика комплексного анализа технологических характеристик работы скважин, изменения физических свойств нефти и коэффициента светопоглощения для оценки характера направления преимущественного воздействия технологии ГРП при извлечении остаточных запасов нефти. Исследования проведены на добывающих скважинах НГДУ «Азнакаевскнефть» и «Альметьевнефть» ОАО «Татнефть» [1]. Данное предложенное комплексное исследование на основе спектрофотометрии позволяет не только оценить качество вовлекаемых в разработку запасов в результате проведения гидравлического разрыва пласта, но и определить направленность ГРП, как метода увеличения нефтеизвлечения или как метода интенсификации.

1. Гуськова И.А. О методах оценка эффективности гидроразрыва пласта [текст] / И.А. Гуськова, А.Т. Габдрахманов, А.А. Рыбаков, Т.Н. Юсупова, Е.Е. Барская // Нефтяное хозяйство. – 2014. – № 6. – С. 106-108.

РЕМОНТ ПОВРЕЖДЕНИЯ ТРУБОПРОВОДОВ БЕЗ ОСТАНОВКИ ПЕРЕКАЧКИ

Сабырханов М.К.

*Казахский Национальный технический Университет им. Сатпаева, Алматы, Казахстан
merkhat.sabyrkhanov@gmail.com*

С ростом срока эксплуатации нефтепроводов, постоянно находящихся под воздействием перекачиваемой нефти и окружающей среды, увеличивается количество коррозионных и усталостных повреждений в металле труб. Эти повреждения снижают несущую способность линейной части МН по сравнению с проектной, что приводит к увеличению вероятности отказов.

Целью данной работы является разработка метода выборочного капитального ремонта с помощью конверсионных технологий без прекращения перекачки нефти, позволяющая значительно сократить плановые и аварийные простои, а также уменьшить экономический ущерб от недопоставки нефти и нефтепродуктов потребителю.

В соответствии с поставленной целью сформулированы и решены следующие задачи:

1. Анализ существующих методов проведения ремонтно-восстановительных работ МН без остановки перекачки;
2. Формирование оптимальных стратегий выборочного ремонта ЛЧ МН на основе математической модели функционирования МН; Исследование способов и технологий применения полевых магистральных трубопроводов для ремонта МН без остановки перекачки;
3. Разработка методики определения количества линий полевых магистральных трубопроводов и передвижных насосных установок для обеспечения устойчивого функционирования МН;

На обобщении опыта ремонтно-восстановительных работ на магистральных нефтепродуктопроводах и практики применения полевых магистральных трубопроводов (ПМТ) предложен новый метод выборочного ремонта магистрального нефтепровода без остановки перекачки продукта. Разработаны схемы замещения участков магистральных нефтепродуктопроводов с помощью ПМТ для различных условий производства работ.

ОБОСНОВАНИЕ БУРЕНИЯ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СКВАЖИН ПО ФИЗИКО-ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ КОЛЛЕКТОРОВ ВИШАНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ НЕФТИ НА ПРИМЕРЕ ЕЛЕЦКО-ЗАДОНСКОЙ ЗАЛЕЖИ I И II БЛОКОВ

Савченко М.А.

*Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель, Республика Беларусь
phacops14@mail.ru*

На Вишанском месторождении выделено четыре самостоятельных объекта разработки: залежь нефти елецко-задонского горизонта I блока, залежь нефти елецко-задонского горизонта II блока, залежь нефти воронежско-саргаевского горизонта, залежь нефти ланско-старооскольского горизонта. Елецко-задонская залежь выделяется в составе межсолевой толщи. По поверхности межсолевых отложений Вишанская структура представляет собой асимметричную брахиантиклиналь с крутым южным крылом и пологим северным. Ось складки образует два свода: западный и восточный.

В елецко-задонских отложениях I и II блоков коллекторами являются доломиты, реже доломитизированные известняки. Основную емкость пород-коллекторов в межсолевых отложениях Вишанского месторождения составляют каверны выщелачивания и поры. Во всех коллекторах имеются также трещины. Тип коллектора межсолевых отложений I и II блоков каверново-порово-трещинный. Эффективные нефтенасыщенные толщины елецко-задонской залежи I блока распространены по разрезу неравномерно. Нефтенасыщенная толщина уменьшается к периферии структуры и изменяется от 13,4 м до 14,6 м.

Нефтенасыщенные толщины елецко-задонской залежи II блока также распространены по разрезу неравномерно. Максимальные нефтенасыщенные толщины приурочены к центральной части залежи и составляют 45 м. Улучшение коллекторских свойств наблюдается по мере приближения к сводовой части залежи и характеризуются невыдержанностью их по простираению в периферийных частях залежи. Так, нефтенасыщенная толщина в западной части залежи составляет 6,3 м, в восточной части залежи – 12,1 м. Ввиду этого целесообразно бурение эксплуатационных, в частности добывающих, скважин в центральных (сводовых) частях залежи в случае I, и II блока, где отмечается улучшение коллекторских свойств.

ДЕТАЛЬНОЕ МИНЕРАЛОГИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КЕРНА С ЦЕЛЬЮ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ

Саттарова В.Ш.

Самарский государственный технический университет, Самара.

Нефтетехнологический факультет СамГТУ, Самара.

venera.sattarova.1994@mail.ru

Стандартные исследования коллекторов (петрографическое описание в шлифах, химический анализ) не позволяет определить минералогический состав пелитовых фракций. Рентгенофазовый и термический анализ, применяемый в нашем исследовании, позволил установить точный минералогический состав пелитового цемента коллекторов некоторых нефтяных месторождений Самарской области. Известно, что минералогический состав пород имеет определяющее значение для проницаемости коллекторов. Зерна кварца гладкие и лишены спайности, следовательно, обладают низкой сорбционной способностью. Зерна же полевых шпатов имеют шероховатую поверхность из-за совершенной спайности и пелитизации. Еще большую поверхность имеют обломки глинистых и эффузивных пород. Благодаря этому сорбционная способность песчаников, сложенных зернами полевых шпатов и обломками пород, будет очень высока, и на поверхности этих зерен в поровом пространстве пород «намертво» будет удерживаться большое количество нефти. Значительное влияние на эти параметры оказывает присутствие глинистой примеси и ее минералогический состав. Так, если содержание 6% примеси глинистого материала каолинового состава в кварцевых песках снижает их фильтрационные способности вдвое, а то же содержание монтмориллонитовой глины делает пески практически непроницаемыми. Все сказанное свидетельствует о необходимости изучения петрографо-минералогического состава песчано-алевритовых пород при оценке их коллекторских свойств и нефтеотдачи. Исследования проводились методом рентгенофазового анализа на модернизированном рентгеновском дифрактометре ДРОН-3 и методом термогравиметрического анализа на аппарате Дериватограф Q - 1500D. Состав матрицы определялся по отмытым образцам, а состав цемента по пелитовой составляющей «отмывок». Основными кристаллическими фазами изученных проб являются кварц, полевые шпаты, гидрослюда, слюды. Цемент большей частью глинистый (каолинит), с примесью слюд, полевых шпатов, кварца и кальцита.

1. Черников О.А., Куренков А.И. Литологические исследования песчаных продуктивных коллекторов. М.: Наука. 1977. – 111 с.

**Ni-СОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ПРОЦЕССА ГИДРООБЛАГОРАЖИВАНИЯ
РАПСОВОГО МАСЛА С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ БИОТОПЛИВ**

Селищева С.А., Ермаков Д.Ю., Яковлев В.А.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
svetlana@catalysis.ru*

Особенностью современного мира является ускоренный характер развития возобновляемой энергетики. Особое внимание при этом уделяется вопросам, связанным с производством различных видов биотоплив в связи с исчерпаемостью природных запасов ископаемой нефти. Применение липидов растительного происхождения (например, растительных масел, основной составляющей которых являются триглицериды жирных кислот ТГЖК) в качестве сырья для производства биотоплива известно достаточно давно. Помимо широко известного биодизеля из растительных масел возможно получение другого типа биотоплива, которое в зависимости от полученного состава и характеристик может использоваться как добавка к традиционному дизельному топливу, так и в качестве компонента (до 50 об.%) авиакеросина. Такое биотопливо представляет собой смесь изомеризованных алканов ряда C_{12} - C_{18} , которую получают в две стадии: на первой происходит гидрооблагораживание ТГЖК растительных масел (рапсового, пальмового) (условия: 360 - $380^{\circ}C$, $8,0$ МПа, 1 - $3ч^{-1}$, в качестве катализаторов используются традиционные сульфидированные катализаторы сероочистки), на второй стадии полученную смесь *n*-алканов превращают в их соответствующие изомеры (условия: 150 - $360^{\circ}C$, $1,0$ - $3,0$ МПа, как правило, катализаторами для осуществления второй стадии являются цеолитные системы на основе благородных металлов). Следует отметить, что сульфидированные системы для первой стадии без добавления сульфидирующего компонента (H_2S) быстро дезактивируются вследствие потери катализатором серы. Ранее были предложены перспективные Ni-Cu системы, которые показали активность в процессе гидродеоксигенации модельных соединений бионефти (анизола) [1]. В настоящей работе представлены результаты исследования процесса гидрооблагораживания ТГЖК рапсового масла в присутствии Ni-содержащих катализаторов, а именно: проведен детальный анализ состава продуктов, полученных при различных условиях, при этом выявлены основные закономерности распределения состава продуктов; изучены различными физико-химическими методами образцы применяемых катализаторов, а также представлена кинетическая схема изучаемого процесса [2].

1. V.A. Yakovlev, S.A. Khromova, O.V. Sherstyuk, V.O. Dundich, D.Yu. Ermakov, V.M. Novopashina, M.Yu. Lebedev, O. Bulavchenko, V.N. Parmon Development of new catalytic systems for upgraded bio-fuels production from bio-crude-oil and biodiesel II Catalysis Today. - 2009. - V. 144. - PP.
2. S.A. Selishcheva, M.Yu. Lebedev, S.I. Reshetnikov, L.I. Trusov, and V.A. Yakovlev. Kinetics of the hydrotreatment of rapeseed oil fatty acid triglycerides under mild conditions// Catalysis in industry.-2014.-Vol.6.-№ 1.-PP. 60-66.

КАТАЛИЗАТОР ВНУТРИПЛАСТОВОЙ КОНВЕРСИИ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ

Ситнов С.А., Вахин А.В, Петровнина М.С.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
sers11@mail.ru*

Возрастает значение нетрадиционных источников в структуре добываемых углеводородов. Одним из основных методов добычи тяжелых нефтей в Татарстане является технология паротеплового воздействия, повышение энергоэффективности которой возможно достичь использованием катализаторов. Технология получила наименование - каталитический акватермолиз. При акватермолизе воздействие на пластовую нефть сопровождается изменением её вязкости, элементного, группового и фракционного состава. Катализаторы вводят в наноразмерном состоянии или в виде прекурсоров, при разложении последних непосредственно в пласте образуется активная форма катализатора.

Актуальным является изыскание новых прекурсоров катализаторов и исходных реагентов для их получения, сочетающих в себе низкую стоимость конечного продукта. Разработана линейка прекурсоров катализаторов, представляющие собой комплексы, полученные взаимодействием при нагревании лигандообразующего компонента и оксида металла переменной валентности. В качестве лигандообразующего компонента выбрана алкилбензолсульфоокислота, обладающая амфифильными свойствами, что придает синтезированному прекурору уникальную способность растворяться как в полярных, так и в неполярных жидкостях.

В автоклаве высокого давления, моделирующего пластовые условия, проведено исследование каталитического действия синтезированного прекурсора различной концентрации в составе водонефтяной смеси. Установлено, что данный катализатор способствует снижению доли тяжелых компонентов и вязкостных характеристик нефти Ашальчинского месторождения, что, как правило, позволяет повысить рентабельность процесса добычи и транспортировки нефти.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ НА АКТИВНОСТЬ $\text{NiMoO}_x\cdot\text{SiO}_2$ КАТАЛИЗАТОРОВ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОБЛАГОРАЖИВАНИЯСмирнов А.А.^a, Хромова С.А.^{a,b}, Яковлев В.А.^{a,b}^a *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск*^b *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*
asmirnov@catalysis.ru

Сложный состав и высокое содержание кислорода в бионефти (жидком продукте пиролиза растительной биомассы) не позволяет использовать ее в качестве моторного топлива без дополнительной обработки, которая включает в себя снижение содержания кислорода и увеличения количества водорода. Наиболее часто для гидрооблагораживания бионефти используют традиционные катализаторы нефтепереработки - сульфидированные Co-Mo и Ni-Mo [1]. Активность некоторых NiMo катализаторов была изучена также для восстановленных образцов [2]. В настоящей работе была исследована активность Ni- , Mo- содержащих катализаторов в реакции гидрооблагораживания модельного соединения бионефти – анизола. Катализаторы были получены при восстановлении в интервале температур $300-750^\circ\text{C}$ образца $\text{NiMoO}_4\cdot\text{SiO}_2$, приготовленного золь-гель методом. Методом РФА был определен фазовый состав всех образцов после восстановления. Согласно данным РФЭС никель на поверхности находится в восстановленной форме во всем диапазоне температур, тогда как металлический молибден появляется лишь при 470°C с полным восстановлением металлов при 750°C . Тестирование катализаторов проводилось при 300°C и давлении водорода 6 МПа в реакторе периодического действия. На основе полученных кинетических данных была предложена схема реакции конверсии анизола.

Было показано, что максимальной удельной активностью обладает образец, восстановленный при 750°C и содержащий фазу Ni_3Mo . С увеличением температуры восстановления происходит образование NiMo сплавов, с повышением содержания Mo в сплаве растет его коррозионная устойчивость.

1. Mortensen, P.M., Grunwaldt, J.D., Jensen, P.A., Knudsen, K.G., Jensen, A.D. Applied Catalysis A: General, 2011, 407, 1-19.
2. Xu, Y., Wang, T., Ma, L., Zhang, Q., Wang, L. Biomass and Bioenergy, 2009, 33, 1030-1036.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ ОБРАБОТКИ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ СКВАЖИННОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ШУМОМЕТРИИ

Спирина Л.А., Масленникова Ю.С.

Физический факультет КФУ, Казань
liliya.spirina@tgtoil.com

В настоящей работе представлены усовершенствованные подходы для обработки и визуализации данных спектральной шумомерии. Спектральная (акустическая) скважинная шумомерия является методом геофизических исследований эксплуатационных нефтяных и газовых скважин, основанным на регистрации и анализе акустических шумов, производимых, например, при движении жидкости или газа по пласту. Зарегистрированные данные после спектрального анализа визуализируются в виде цветовой спектральной панели. При этом качество интерпретации полученной панели существенно зависит от способа её визуализации.

В ходе работы был разработан метод автоматического выбора цветowych пределов спектральной панели для наиболее эффективной визуализации данных. Подобный подход позволил унифицировать процесс визуализации данных шумомерии, что существенно облегчило работу геофизикам-интерпретаторам.

Зачастую спектральная панель содержит набор как слабо интенсивных, так и сильно интенсивных шумов. Это сильно затрудняет визуальный анализ спектральных панелей и их интерпретацию. Для решения этой проблемы был предложен усовершенствованный алгоритм контрастно-ограниченного адаптивного выравнивания гистограммы яркости спектральной панели. В отличие от стандартных подходов, данный метод контрастирует только значимые детали на спектральной панели, при этом фоновые шумы остаются без изменений. Выявление значимых шумов осуществлялось с использованием метода максимального правдоподобия. Разработанный алгоритм позволил более качественно проанализировать спектральный состав различных объектов на цветowych панелях.

Следующий алгоритм был разработан для заключительной стадии интерпретации данных шумомерии, а именно для автоматической генерации отчета, включающего в себя частотный диапазон, интервал по глубине, среднюю интенсивность каждого объекта, зарегистрированного на спектральной панели. Данный алгоритм позволил существенно сократить время составления финального отчета по скважине, выполняемого геофизиком-интерпретатором.

Все алгоритмы разработаны и протестированы с использованием скважинных данных, предоставленных компаний ТГТ Прайм (г.Казань).

СЖИГАНИЕ СЕРНИСТОЙ НЕФТИ В КИПАЮЩЕМ СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА

Федоров А.В., Дубинин Ю.В.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
fedorov@catalysis.ru*

В настоящее время современная энергетика более чем на 90% обеспечивается ресурсами ископаемого топлива, прежде всего нефтью. Основным продуктом нефтепереработки являются моторные топлива (доля 80%). Для технологических целей в качестве топлива в основном используется мазут и дизельное топливо. Непосредственно в качестве топлива сырая нефть используется редко - в местах, где недоступны другие источники топлива, либо доступность сырой нефти настолько высока, что она не выходит из обращения. Практический опыт сжигания нефти в котлах с факельным сжиганием нефти показывает, что существенным недостатком данной технологии является значительное загрязнение атмосферы вредными выбросами (СО, NO_x, SO_x, бензапирены), а так же неполное сжигание нефти [1,2].

Экологически безопасным, экономичным и наиболее удовлетворяющим потребности энергоемких технологических процессов является каталитический способ сжигания топлив, разработанный в Институте катализа СО РАН. Присутствие в реакционной системе катализатора снижает температуру сжигания органического топлива с 1000-1200°С до 300-700°С, сохраняя при этом высокие скорости горения и обеспечивая полное сгорание топливно-воздушных смесей без избытка воздуха и, кроме того, позволяет достичь высоких, значений теплонапряженности объема топочного пространства [3-4].

В данной работе исследована возможность экологически безопасного сжигания сернистой нефти в кипящем слое катализатора с целью использования в энерготехнологических установках для локального теплоснабжения.

В ходе работы было показано, что сжигание сернистой нефти в кипящем слое катализатора в присутствие кальцита позволяет при относительно низких температурах 700°С достигнуть полного выгорания нефти и исключить присутствие СО и SO₂ в дымовых газах.

1. В. С. Арутюнов. Ж. Российский Химический Журнал, 2008, Т. 52, N 6, С. 4-10.
2. М. И. Иванов. Ж. Промышленные и отопительные котельные и мини-ТЭЦ, 2011, №3 (8), С.9.
3. Г.К. Боресков. Вестник АН СССР, 1980, № 12, с.46-54.
4. А.Д.Симонов, Н.А.Языков, П.И.Ведякин, Г.А.Лавров, В.Н.Пармон. Ж. Химия в интересах устойчивого развития, 2001, т. 9, № 1, с. 97-104.

ОЦЕНКА СТАБИЛЬНОСТИ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЕЙ В ПРОЦЕССАХ КАТАЛИТИЧЕСКОГО АКВАТЕРМОЛИЗА ПО ДАННЫМ SARA АНАЛИЗА

Ситнов С.А.^a, Феоктистов Д.А.^a, Вахин А.В.^a, Каюкова Г.П.^{a,b}, Фосс Л.Е.^{a,b}, Мусин Р.З.^b

^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

^b ИОФХ им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

briorius@inbox.ru

Тяжелые нефти месторождений Татарстана различаются широким спектром физических и химических свойств, которые необходимо знать и учитывать в процессах их добычи, транспортировки и переработки. Одним из важных свойств тяжелых нефтей в технологических процессах является стабильность – свойство нефти удерживать в себе асфальтены без их флоккуляции и осаждения [1, 2]. Оценка данного параметра представляет особый интерес при разработке новых технологий извлечения тяжелых нефтей с применением термокatalитических процессов, позволяющих переводить их тяжелые высокомолекулярные компоненты в более легкие подвижные углеводороды.

Объектами исследований служили тяжелые нефти Ашальчинского и Мордово-Кармальского месторождений и продукты их конверсии, полученные с использованием металлоорганических комплексов на основе железа при разных концентрациях катализатора. О стабильности нефтей судили по их составу, который получали разделением нефтей и продуктов их конверсии на четыре группы химических соединений жидкостно-адсорбционной хроматографией на окиси алюминия: насыщенные углеводороды, ароматические соединения, смолы и асфальтены (английский термин - SARA), с учетом методических рекомендаций стандарта ASTM D4124-09 и ГОСТ 32269-2013. На основании значений индекса нестабильности $СП = \text{Насыщенные углеводороды} + \text{асфальтены} / \text{Ароматические соединения} + \text{смолы}$, а также отношения асфальтены/смолы выявлены различия в химическом составе исследованных нефтей и продуктах их кatalитического акватермолиза. Проведена, оценена стабильности исследуемых продуктов, а также эффективности применяемых катализаторов в зависимости от их концентрации. Исследования проведены с применением и других физико-химических методов анализа.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

1. Maity S.K., Ancheyta J., Marroquin G. Energy & Fuel, 2010, 24, 2809–2816.
2. Nazar A.R., Solaimany, Bayandory L. Iranian Journal of Chemical Engineering, 2008, 5, 3-12.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТЯЖЕННЫХ ГОРИЗОНТАЛЬНЫХ СКВАЖИН С МНОГОСТАДИЙНЫМ ГИДРАВЛИЧЕСКИМ РАЗРЫВОМ ПЛАСТА

Хамидуллин М.Р.

*Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского КФУ, Казань
marsel_mechstyle@mail.ru*

Бурение горизонтальных скважин (ГС) получило сильное распространение в связи с истощением традиционных месторождений нефти и газа и необходимостью разработки залежей с тяжелой нефтью и низкой проницаемостью коллекторов. Для увеличения контакта между поверхностью скважины и пластов была разработана технология многостадийного гидроразрыва пласта (МГРП), которая многократно увеличивает продуктивность ГС. Аналитическому решению задачи со скважиной с поперечными трещинами ГРП были посвящены работы Швидлера [1], Шехтмана [2]. Численное моделирование или полуаналитические решения задачи притока к жидкости к ГС с МГРП приводятся в работах Shanshan Yao [3], M. Lin [4], Каневской [5].

В настоящей рассматривается стационарная математическая модель притока жидкости к ГС с многостадийным ГРП, учитывающей фильтрацию флюида в пласте и трещинах гидроразрыва, а также вязкое течение жидкости в стволе скважины. Процесс фильтрации в пласте считается осесимметричным, в трещинах ГРП - одномерным. Вязкое течение жидкости в скважине описывается одномерным уравнением Навье-Стокса. Для сопряжения решений в пласте, трещинах ГРП и скважине используются условия непрерывности давления и нормальной скорости на вертикальных границах трещин и боковой поверхности ствола скважины.

Задача решается численно методом конечных объемов. Для решения системы дискретизированных уравнений (СЛАУ) используется метод QR-факторизации.

Проведен анализ влияния геометрии пласта и трещин на продуктивность горизонтальных скважин, стимулированных МГРП. Решен ряд оптимизационных задач определения оптимальных размеров трещин, их количества и взаимного расположения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республике Татарстан (№13-01-19031, №13-01-19044) и BP Exploration Operating Company Limited № C175-13 (2014-2015гг.)

1. Швидлер М.И. Приток жидкости к скважине с трещиной в призабойной зоне. Изв. АН СССР. ОТН. - 1955.- 11.- С. 95-100.
2. Шехтман Ю.М. Приток жидкости к горизонтальной трещине при конечной мощности пласта Изв. АН СССР. ОТН. Механика и машиностроение - 1961.- №5.
3. Shanshan Yao, Fanhua Zeng, Hong Liu etc. A semi-analytical model for multi-stage fractured horizontal wells. Journal of Hydrology 507 (2013)-. P. 201-212.
4. Lin, M., Chen, S., Chen, Z., Xu, J. Effects of hydraulic fracture geometries in tight oil reservoirs // Society of Petroleum Engineers - European Unconventional Resources Conference and Exhibition 2014
5. Каневская Р.Д., Жучков С.Ю. Опыт моделирования и мониторинга разработки нефтяного месторождения в условиях массового проведения гидроразрыва пласта//Технологии нефти и газа. – 2011. – № 4. – С. 41-47.

РАЗРАБОТКА ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО СИМУЛЯТОРА, АДАПТИРОВАННОГО К ОСОБЕННОСТЯМ ТИМАНО-ПЕЧОРСКОЙ НЕФТЕГАЗОНОСНОЙ ПРОВИНЦИИ

Хасанов А.И., Дуркин С.М.

*Ухтинский Государственный Технический Университет, Ухта
hasanov666@gmail.com*

По оценкам экспертов запасы высоковязких нефтей Тимано-Печорской нефтегазоносной провинции составляют около 1-1,5 млрд. т. [1]. Сложность пустотного пространства также накладывает определенные ограничения на применимость различных технологий воздействия на продуктивный пласт. Одними из крупных объектов провинции являются Усинское месторождение и уникальное Ярегское месторождение высоковязкой нефти.

В данной работе представлены основные подходы разработки собственного гидродинамического симулятора, позволяющий учитывать особенности уникальных месторождений за счет наличия открытого программного кода.

На основе изучения различных лабораторных зависимостей проведены численные эксперименты. Проанализировав результаты расчета и принимая во внимание тот факт, что для месторождений с вязкой нефтью и сложной реологией обычно применяют тепловые методы разработки был сделан вывод что использование зависимостей начального градиента давления от температуры при гидродинамическом моделировании повысит эффективность прогнозирования технологических показателей разработки.

На основе имеющихся эмпирических зависимостей были смоделированы две фильтрационные модели: по обычному закону Дарси и с указанными зависимостями. В итоге были получены различные картины распределения давления в пласте, что говорит об актуальности данной работы.

1. Рузин Л. М. Технологические принципы разработки залежей аномально вязких нефтей и битумов : монография / Л.М. Рузин, И.Ф. Чупров; под. Ред. Н.Д. Цхадая. – Ухта: УГТУ, 2007. – 244 с.: ил.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ДОБЫЧИ ТРУДНОИЗВЛЕКАЕМЫХ ЗАПАСОВ НЕФТИ НА БАЗЕ ГЕОЛОГО-ФИЛЬТРАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.

Хафизов Р.И.

*Альметьевский государственный нефтяной институт, Альметьевск
ruslanxxx171@mail.ru*

В настоящее время истощение запасов традиционной нефти каменноугольных и девонских отложений и увеличение доли запасов высоковязких нефтей Республики Татарстан делает все более актуальной проблему рационального вовлечения в разработку трудноизвлекаемых запасов углеводородного сырья, к которым относятся, например - природные битумы (ПБ), запасы которых в пермских отложениях Республики Татарстан по разным оценкам составляют от 1,5 до 7 млрд. тонн.

Малоподвижность подобных нефтей и битумов, обусловленная их высокой вязкостью, поэтому применяются технологии, способствующие снижению вязкости нефти и природного битума в пластовых условиях с целью обеспечения её притока к стволам добывающих скважин. К числу таких технологий относится закачка в пласты теплоносителя, внутрислоевого горения и другие. Для наиболее успешного применения той или иной технологии необходимо предварительное её теоретическое апробирование. Использование геолого-гидродинамического моделирования решать практические задачи проектирования по прогнозированию и управлению разработкой при различных режимах эксплуатации нефтяных объектов.

Практика применения технологии внутрислоевого горения и паротеплового воздействия показала на месторождениях Татарстана ее недостаточную эффективность. Поэтому основной задачей является устранение основных недостатков данных технологий и совершенствование разработки трудноизвлекаемых запасов.

Решение поставленной задачей, применяя усовершенствованные способы разработки, проведя апробирование их на гидродинамической модели позволит оценить эффективность методов и выбрать наиболее результативные, обладающие высокими конечными коэффициентами нефтеизвлечения с наименьшими материальными затратами в сравнении с существующими традиционными методами.

ТЕХНОЛОГИЯ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ СИСТЕМЫ РАЗРАБОТКИ ТУРНЕЙСКОГО ЯРУСА ЕРСУБАЙКИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Хафизов Р.И.

*Альметьевский государственный нефтяной институт, Альметьевск
ruslanxxx171@mail.ru*

В последние годы существует тенденция перехода от аналитических и графических методов к численному моделированию процесса разработки нефтяных и газовых месторождений.

Для расчетов были построены геологические и гидродинамические модели Ерсубайкинского поднятия Ерсубайкинского месторождения. Для уточнения результатов моделирования были проведены лабораторные исследования оптических свойств нефти.

Проводился расчет коэффициентов светопоглощения ($K_{сп}$) растворов нефти для монохроматического светового излучения в интервале длин волн 400-900 нм. Для подтверждения и уточнения результатов геолого-гидродинамического моделирования с помощью лабораторных исследований оптических свойств нефти были построены карта остаточных запасов и карта $K_{сп}$. Рассматривалось 6 вариантов разработки опытного участка [1].

При комплексном анализе состояния месторождения применяя геолого-гидродинамическом моделирование и лабораторные исследования, позволило с высокой точностью определить недреннируемые запасы, и рассчитать наиболее перспективный вариант разработки турнейского яруса Ерсубайкинского поднятия. На основе результатов расчета технологических показателей по различным вариантам был выбран наиболее эффективный и экономически целесообразный вариант разработки опытного участка.

1. Хафизов Р.И. Использование программного комплекса Roxar для совершенствования системы разработки Турнейского яруса Ерсубайкинского поднятия Ерсубайкинского месторождения [Текст] // Сборник тезисов «68 международной молодежной научной конференции Нефть и Газ - 2014». Том 1. – Москва, 2014.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ПЛАСТОВ В РОССИИ И ЗА РУБЕЖОМ

Христолюбова В.И.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань
vallerrriya@mail.ru*

Международный опыт свидетельствует, что формирование механизма и структуры государственного управления рациональным использованием запасов нефти требует системной, кропотливой работы [1]. Используемые в России в последние годы в проектных документах новые технологии относятся, в основном, к гидродинамическим методам воздействия, повышающим эффективность процесса заводнения [2]. Расширение области применения метода во многом связано с относительной простотой технологий реализации и имеющимся опытом использования. В число гидродинамических методов увеличения нефтеотдачи включаются: циклическое заводнение, системная технология реализации ОПЗ, горизонтальные скважины, гидроразрыв пласта в системе скважин. Отметим, что они, оказывая преимущественное воздействие на интенсификацию добычи, могут обеспечить дополнительное увеличение нефтеотдачи пластов только в определенных геолого-физических условиях, при следовании соответствующим технологиям. Годовая добыча за счет этих методов оценивается в 50 – 60 млн тонн. Широко практикуется разделение пластов, уплотнение сетки скважин, регулирование фильтрационных потоков.

К сожалению, объемы применения «третичных» методов увеличения нефтеотдачи хотя и увеличились в последние годы, но остаются пока незначительными. Добыча за счет этих методов оценивается на уровне 1 млн т/год. Вместе с тем, как показывает отечественный и зарубежный опыт, добиться значительного повышения полноты извлечения нефти из пластов можно на основе известных сейчас «третичных» методов увеличения нефтеотдачи и неизвестных еще принципиально новых методов нефтеизвлечения.

1. Oil and Gas Journal. 2007. Nov. 5. № 12.
2. Конопляник А.А. Россия на формирующемся евроазиатском энергетическом пространстве: проблемы, конкуренции. М.: 2004. С. 590.

АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ КОНЕЧНЫХ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕВОДОРОДОВ

Шапауова Гаухар

*Казахский Национальный Технический Университет им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан
gauhar.shapauova@gmail.com*

Повышение стоимости нефти и нефтепродуктов создает предпосылки для альтернативных путей получения конечных продуктов переработки углеводородов. Одним из таких процессов, который предлагается к рассмотрению в данной работе, является технология получения синтетического жидкого топлива – GTL (GastoLiquids). Если топливо, полученное традиционным путем, представляет собой сложную смесь углеводородов, которые при использовании в двигателях создают предпосылки для увеличения вредных выбросов в атмосферу, то топлива, полученные синтетическим путем, относительно чистые.

Цель данной научной работы – во внедрении технологии получения синтетического жидкого топлива в Казахстане, для увеличения спектра производимых продуктов и повышения качества нефтепродуктов и конкурентоспособности.

Основными задачами научной работы являются:

1. Выявление минусов действующих путей утилизации ПНГ.
2. Введение и разработка новых технологий переработки попутного газа.
3. Снижение финансовых затрат при комплексном использовании ПНГ.
4. Выполнение всех поставленных задач, не причиняя ущерба окружающей среде.

По исследованиям в ходе данной работы этот метод будет являться не только экологически выгодным, но и экономически рентабельным, так как видна целесообразность внедрения данной технологии в Казахстане.

1. Журнал «нефтепереработка и нефтехимия, научно-технические достижения» 2003 год. №11.
2. Журнал «нефтегазовые технологии» 2009 год. №5.
3. Технология переработки природного газа и конденсата: Т38 Справочник: В 2 ч. – М.: ООО «Недра-Бизнесцентр», 2002. – Ч. 1., - 517 с.

ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ОБЛАГОРАЖИВАНИЯ СОСТАВА ТЯЖЕЛЫХ ВЫСОКОВЯЗКИХ НЕФТЕЙ

Якупов И.Р.^a, Феоктистов Д.А.^b, Гуссамов И.И.^a, Каюкова Г.П.^{b,c},
Петров С.М.^{a,b}, Вахин А.В.^b

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^b Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

^c ИОФХ им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

yakupov25@mail.ru

В последнее время, в связи с изменением сырьевой базы, связанной с переходом на тяжелое углеводородное сырье, совершенствуются методы его очистки от сераорганических соединений. В ряде стран широко используются цинк-медь-алюминиевые и цинк-медные катализаторы. Медьсодержащие катализаторы представляют интерес тем, что максимальная их активность наблюдается при низких температурах 220-260°C, это позволяет проводить процесс при давлении ниже 20 МПа. Эти особенности данных катализаторов значительно упрощают аппаратное оформление процесса. В настоящее время широко используются два подхода к демеркаптанизации нефтепродуктов. Первый из них - проведение гидроочистки с последующим превращением получаемого сероводорода в элементную серу, который обеспечивает практически полное удаление серы из обрабатываемых продуктов. В то же время данный процесс весьма сложен и дорог из-за многостадийности технологии включающей каталитическое гидрирование. Второй метод - каталитическое окисление нефтяного сырья с образованием нетоксичных и не имеющих сильного запаха органических дисульфидов, но применительно к тяжелому нефтяному сырью не отработан. Тем не менее, известны работы [3], где показано, что добавки на основе меди обладают большей активностью по сравнению с добавками, содержащими оксиды железа в процессах термолиза тяжелой нефти. Нами проведено сравнительное исследование продуктов каталитического акватермолиза тяжелых нефтей, полученных в модельной системе в присутствии иницилирующих добавок содержащих медь. Введение этих добавок приводит к новообразованию топливных фракций, в том числе *n*-алканов, снижению содержания высокомолекулярных компонентов, общей серы и вязкости нефти.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

1. Томас Ч. Промышленные каталитические процессы и эффективные катализаторы. М.: Мир, 1973с.
2. Maity S. K., Ancheyta J., Marroquin G. Energy & Fuels, 2010, V. 24, P. 2809-2816.
3. Дмитриев Д.Е., Головкин А.К. Нефтепереработка и нефтехимия. 2009, № 2, С. 9-14.

МЕТОДЫ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ПЛАСТОВ

Янков В.Н.

*ГГУ имени Ф.Скорины, Гомель, Республика Беларусь
VOVANdec@mail.ru*

На завершающих стадиях разработки нефтяных месторождений происходит нарастание негативных факторов: неравномерная выработка запасов, нарастание обводнённости добываемой продукции, увеличение доли трудноизвлекаемых запасов и т.д. Сложные горно-геологические условия залегания залежей, фильтрационно-ёмкостная неоднородность пластов-коллекторов, жесткие условия по минерализации пластовых вод не дают возможности применять многие известные методы повышения нефтеотдачи. Это вынуждает специалистов постоянно вести поиск и разработку новых эффективных методов, технологий, составов и композиций.

Технология повышения нефтеотдачи пластов реализуется путем обработки высокопроницаемых каналов составами с повышенной вязкостью или растворами реагентов, которые при контакте с высокоминерализованной пластовой водой образуют осадки и гели, способные создавать дополнительные фильтрационные сопротивления и благодаря этому снижать проводимость этих каналов для вытесняющего агента. В результате происходит перераспределение фильтрационных потоков, меняются их направления и скорости, включаются в разработку низкопроницаемые разности пород-коллекторов, снижается обводненность добываемой продукции [1].

Тяжелые и вязкие нефти по своим свойствам и составу отличаются от легких нефтей, и разработка, соответственно, с помощью традиционных технологий практически невозможна.

Одним из экономически обоснованных и технически осуществимых методов разработки объектов с высоковязкими нефтями является полимерное заводнение. Применение микробиологических методов позволит интенсифицировать добычу нефти из заводненных неоднородных пластов в условиях предельной обводненности продукции на поздней стадии разработки месторождений, а также вовлечь в разработку залежи с вязкими и тяжелыми нефтями. В последние годы достаточно эффективно начали развиваться и внедряться гидродинамические методы повышения нефтеотдачи, к которым относятся гидроразрыв пласта, циклическое заводнение залежей, бурение боковых стволов, вскрытие пластов на углеводородных жидкостях, низкочастотное вибросейсмическое воздействие, что позволяет вовлечь в разработку застойные зоны и трудноизвлекаемые запасы. Это далеко не полный список методов, применяемых при добыче нефти.

Внедрение новых высокоэффективных технологий повышения нефтеотдачи вкупе с имеющимися техническими, экономическими и интеллектуальными ресурсами позволит добиться максимально возможного коэффициента извлечения нефти и улучшить технико-экономические показатели разработки залежей, что обеспечит замедление падения темпов добычи нефти.

1. Мероприятия по повышению нефтеотдачи залежей УВ Беларуси / В.В. Пирожков, Н.А. Демяненко, И.В. Лымарь, В.Г. Пысенков // Эффективные пути поиска, разведки и разработки залежей нефти Беларуси: Материалы научно-практической конференции. – Гомель, 2007. – С. 256-264

НОВЫЙ ПОДХОД В РАЗЛИЧЕНИИ ГОМОГЕННОГО И ГЕТЕРОГЕННОГО МЕХАНИЗМОВ КАТАЛИЗА В РЕАКЦИИ ХЕКА

Ярош Е.В., Ларина Е.В., Курохтина А.А., Шмидт А.Ф.

*Химический факультет ИГУ, Иркутск
elodia_fassade@mail.ru*

Уровень развития современного катализа позволяет превратить дешевые продукты нефтепереработки в субстраты для современной промышленности, фармацевтики, тонкого органического синтеза. Одним из таких подходов является конструирование новых С-С связей в реакциях кросс-сочетания, в частности с помощью реакции Хека (арилирование алкенов). Несмотря на достаточно продолжительные исследования, среди ученых нет единого мнения по поводу природы истинного катализатора в этих реакциях. Нами было предложено проводить исследование закономерностей кинетического изотопного эффекта (КИЭ) с целью различения гомогенного и гетерогенного механизмов катализа в реакциях Хека между стиролом и арилбромидами, а также в реакции Хека со стиролом и ангидридом бензойной кислоты. Исследования КИЭ проводились в условиях конкуренции молекул одного и того же органического вещества, содержащего изотопы ^{79}Br и ^{81}Br , а также ^{12}C и ^{13}C . Измерение величин КИЭ осуществлялось с помощью хромато-масс-спектрометрии. Анализ полученных данных позволил установить, что в условиях конкуренции арилбромидов с естественным содержанием изотопов ^{79}Br и ^{81}Br , а также в условиях конкуренции стирола с естественным содержанием изотопов ^{12}C и ^{13}C в исследуемых реакциях Хека, варьирование природы предшественника катализатора не привело к изменению величин КИЭ, что указывает на неизменность природы истинного катализатора. Показано, что такой результат согласуется со схемой превращений палладия в ходе реакций кросс-сочетания [1], роль активного катализатора в которой играют истинно растворенные молекулярные комплексы палладия.

Работа выполнена при поддержке гранта для поддержки научно-исследовательской работы аспирантов и молодых сотрудников Иркутского государственного университета

1. А.Ф. Шмидт, А.А. Курохтина, Кинетика и катализ, 2012, 53, 6, 760-777.

**СЕКЦИЯ 3 ПЕРСПЕКТИВНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА,
СВОЙСТВА**

ИССЛЕДОВАНИЕ СМЕШАННОАМИДНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ НИКОТИНАТА МАРГАНЦА (II)

Абдуллаева Ф.А., Ибрагимова М.Р., Хасанов Ш.Б.

*Ургенчский государственный университет имени Аль-Хорезми, факультет естествознания и географии, Ургенч, Узбекистан
afazilat@bk.ru*

Для исследования свойств смешанноамидных координационных соединений никотината марганца ($Mn(NK-H)_2$) с ацетамидом (АА), карбамидом (К), тиокарбамидом (ТК) и никотинамидом (АНК) синтез проводили механохимическим способом. Исходные компоненты и никотинат марганца (II): $L_1:L_2$, взятые в мольном соотношении 1:2:2 при комнатной температуре интенсивно растирались в шаровой мельнице с рабочим телом 6-10 в течение 17 минут.

Сравнение дифрактограмм свободных молекул лигандов и синтезированных соединений показал несоответствие дифрактограмм, а это указывает, что синтезированные соединения имеют индивидуальные, отличные от исходных веществ, кристаллические решетки.

ИК - спектры координационных соединений записывали в области $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$ на спектрометре AVIATAR-360 фирмы «Nicolet».

Анализ ИК - спектров синтезированных соединений показал, что ацетамид и карбамид координируется с ионом марганца через атом кислорода карбонильной группы, тиокарбамид через атом серы, никотинамид через гетероатом азота пиридинового кольца.

Полосы при $3200-3500 \text{ см}^{-1}$ подтверждает наличие в молекуле кристаллизационных молекул воды.

В ИК-спектрах комплексов наблюдаются две интенсивные полосы с максимумами поглощения в области $1557-1617 \text{ см}^{-1}$ и $1373-1401 \text{ см}^{-1}$, отвечающие валентным ассиметричным и симметричным колебаниям карбоксилатной группы. Величина $\Delta\nu = \nu_{as}(COO^-) - \nu_s(COO^-)$ равна $166-218 \text{ см}^{-1}$ и свидетельствует в пользу монодентатной координации карбоксилатной группы.

Таким образом, на основании результатов физико-химических исследований установлено строение синтезированных соединений, определены центры координации амидов с центральным атомом.

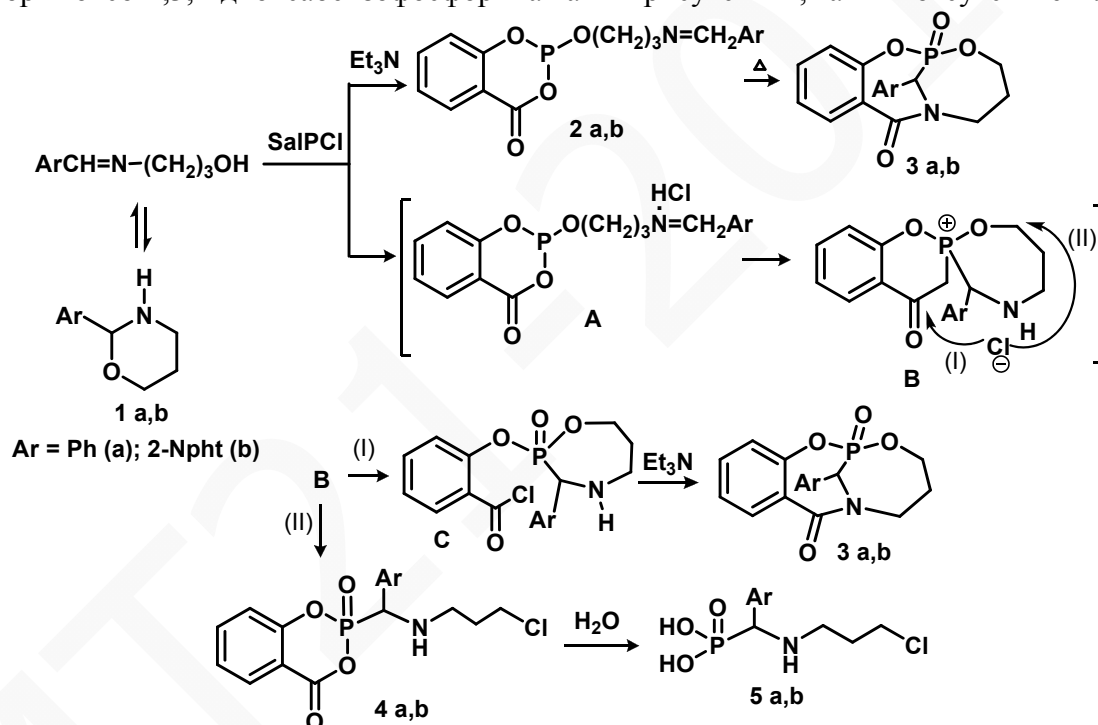
ОБРАЗОВАНИЕ КАРКАСНЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ФОСФОНАТОВ В РЕАКЦИИ 3-N-(АРИЛИДЕНАМИНО)ПРОПАН-1-ОЛА С САЛИЦИЛХЛОРОФОСИТОМ

Абилова Г.Р.^a, Димухаметов М.Н.^b, Ивкова Г.А.^a, Миронов В.Ф.^{a,b}

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

^b Институт органической и физической химии КазНЦ РАН, Казань
ivkova@ksu.ru

Циклические смешанные ангидриды гидроксикарбоновых и фосфористой кислот, содержащие высокореакционноспособный фрагмент $\text{POC}(\text{O})$, являются удобными исходными соединениями в регио- и стереоселективном синтезе труднодоступных для получения другими методами различных фосфорсодержащих гетероциклических, в том числе бициклических систем [1]. Настоящая работа посвящена изучению свойств подобных фосфитов, содержащих экзоциклический 3-N-(арилиденамино)пропильный заместитель. 2-(3-Арилиденамино)пропокси-4-оксо-1,3,2-диоксабензо фосфорины (**2a,b**) получены из 3-N-(арилиденамино)пропан-1-олов (**1b**) и 2-хлор-4-оксо-1,3,2-диоксабензофосфорина как в присутствии, так и в отсутствие Et_3N .



Иминофосфиты **2a,b**, полученные в отсутствие амина, в обычных условиях стабильны и циклизуются в бициклические структуры каркасного типа **3a,b** при длительном кипячении в ТГФ. Эти же фосфиты с участием выделяющегося в ходе их синтеза HCl в момент образования через промежуточные структуры **A,B,C** превращаются с участием Et_3N в те же каркасные фосфонаты **3a,b**, и в α -аминофосфонаты линейного строения **4a,b** и **5a,b**. Конечные продукты реакции **3a,b**, **5a,b** выделены; стереоизомеры **3a,b** разделены методом колоночной хроматографии и их строение подтверждено методом РСА. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-03-90419).

1. М.Н.Димухаметов, Г.А.Ивкова, В.Ф.Миронов, П.П.Онысько, Ю.В.Рассуканая, Р.З.Мусин. ЖОХ, 2014, 50 (4), 1-3.

СЛУЧАЙНЫЕ ДЕФОРМАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННЫЕ ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В РЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Абишев Н.М.

*Институт физики КФУ, Казань
nurike92_kz@mail.ru*

Дефекты кристаллической решетки, нарушающие её трансляционную симметрию, существенным образом влияют на физические свойства кристаллов. Предметом исследования данной работы являются локальные деформации, индуцируемые точечными дефектами (вакансии, примесные атомы) в реальных диэлектрических кристаллах. Задача рассматривается в рамках теории упругости с учетом анизотропии кристаллической решетки [1,2] с использованием методики, развитой в работе [3].

Разработанная программа в математическом пакете MatLab позволяет вычислять обусловленные точечным дефектом, расположенным в начале системы координат, смещения атомов кристаллической решетки в зависимости от их координат при заданных величинах упругих постоянных. Компоненты тензора неоднородной деформации упруго-анизотропного континуума представлены в виде разложений по сферическим гармоникам, зависящим от сферических координат соответствующей точки относительно дефекта. В качестве примера выполнен расчет температурной зависимости неоднородных деформаций, индуцированных точечным дефектом в кубическом кристалле $Tb_2Ti_2O_7$, упругие постоянные которого существенно уменьшаются, а упругая анизотропия возрастает при изменении температуры от 300 до 3.5 К. В результате компьютерного моделирования получены графические изображения компонент тензора деформации на сфере единичного радиуса с центром на дефекте. Сравнение полученных зависимостей с численными решениями уравнений теории упругости показывает, что для достаточно точного описания решений можно ограничиться в веденном нами разложении сферическими гармониками второго, четвертого и шестого порядков. Результаты выполненных вычислений свидетельствуют о возможности подавления магнитного упорядочения в $Tb_2Ti_2O_7$ при сравнительно небольших концентрациях (порядка 1%) дефектов.

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. Наука, М. 1987, 16 с.
2. D.M. Barnett. Phys. Stat. Sol. (b) 1972, **49**, 741-748.
3. И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ, 1947, **17**, 783-791.

ТОКСИЧНОСТЬ ПРОДУКТОВ ГОРЕНИЯ ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Абрамова Н.В., Строганов И.В., Хайруллин Р.З.

*ФГБОУ ВПО «КНИТУ», Казань
khayrullinrz@gmail.com*

Проблема токсичности веществ, образующихся при горении строительных материалов, в последнее время приобретает всю большую актуальность в связи с тем, что увеличивается доля полимерных материалов, применяемых в строительстве зданий и сооружений, автодорог и т.д. при одновременном снижении применения традиционных строительных материалов.

Эпоксидные полимеры занимают значительную позицию среди полимерных материалов, применяемых в строительстве. В связи с этим возрастает актуальность изучения токсичности продуктов их горения, т.к. наблюдается тенденция к увеличению количества пожаров.

При горении эпоксидных полимеров выделяется ряд токсичных веществ (СО, СО₂, смесь углеводородов), которые могут оказаться опасными для человека в случае их возгорания при пожарах [1, 2].

Была изучена динамика изменения количественного и качественного состава токсичных веществ, выделяющихся в процессе горения. Установлено, что состав продуктов горения существенно зависит от температуры и скорости горения исследуемых материалов.

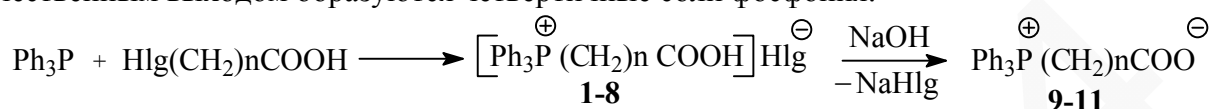
1. Чижова, М.А. Проблема точной оценки токсичности продуктов, выделяющихся при горении полимерных строительных материалов/ М.А. Чижова, Р.З. Хайруллин// Вестник Казанского технологического университета. –2014. –Т. 17. –№9. –С. 139-140.
2. Чижова, М.А. Токсичность продуктов горения полимерных материалов при введении в их состав антипиренов/ М.А. Чижова, Р.З. Хайруллин// Вестник Казанского технологического университета. –2014. –Т.17. –№9. –С.144-145.

СИНТЕЗ КАРБОКСИЛАТНЫХ ФОСФАБЕТАИНОВ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ФОСФОНИЯ

Аксунова А.Ф., Романов С.Р., Бахтиярова Ю.В.

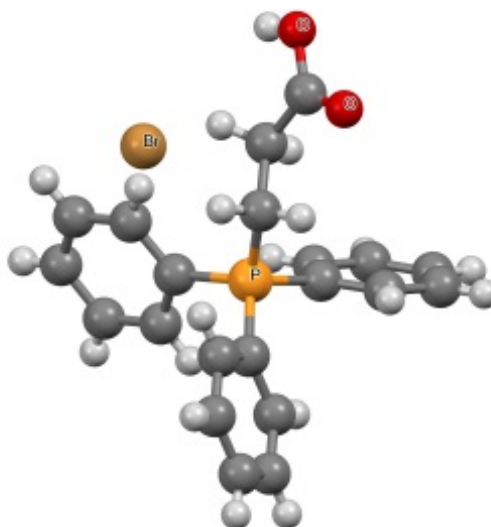
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
alfiya-nizamieva@mail.ru

При взаимодействии трифенилфосфина с галогенкарбоновыми кислотами с количественным выходом образуются четвертичные соли фосфония.



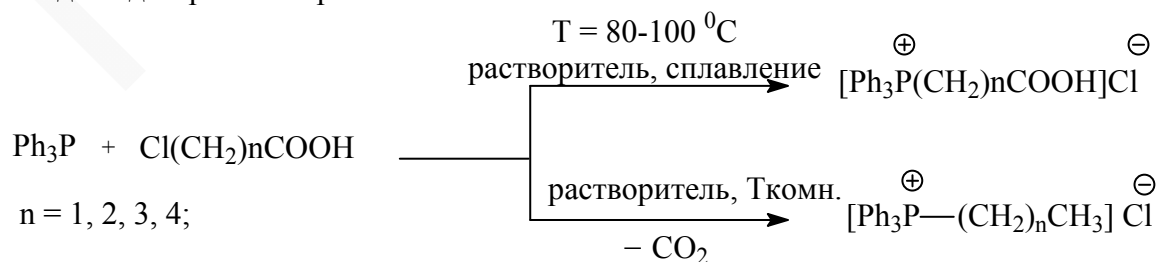
Hlg = Cl, Br; n = 1, 2, 3, 4;

Строение полученных фосфониевых солей доказаны различными спектральными методами: ИК, ЯМР ^1H , ^{13}C и ^{31}P спектроскопиями. Состав – элементным анализом. Кроме того, для одной из солей был сделан рентгеноструктурный анализ.



При обработке фосфониевых солей с n=2, 3, 4 раствором гидроксида натрия, образуются соответствующие карбоксилатные фосфабетаины 9-11. Однако, выход продуктов небольшой от 30 до 50 %. Фосфониевые соли, полученные на основе галогенуксусных кислот при обработке раствором щелочи декарбоксилируются.

Кроме того, экспериментально была выявлена закономерность, что если проводить реакции взаимодействия третичных фосфинов с хлоркарбоновыми кислотами при комнатной температуре, то практически во всех случаях происходит декарбоксилирование фосфониевых солей. Однако, в случаях взаимодействия трифенилфосфина с бромкарбоновыми кислотами мы не наблюдали декарбоксилирования.



В результате проведенных исследований мы пришли к выводу, что способ синтеза фосфабетаинов следует выбирать в зависимости от структуры фосфабетаина.

ПЛАТИНОУГЛЕРОДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ: УПРАВЛЕНИЕ МИКРОСТРУКТУРОЙ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Алексеевко А.А., Гутерман В.Е.

*Химический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону
an-an-alekseenko@yandex.ru*

На сегодняшний день по совокупности характеристик наночастицы платины или ее сплавов, нанесенные на микрочастицы углеродных материалов с развитой поверхностью рассматриваются в качестве наилучших электрокатализаторов для низкотемпературных ТЭ.

Методы синтеза в жидкой фазе дают широкую возможность влиять на характеристики получаемых катализаторов посредством варьирования многих параметров, таких как: состав раствора, температура, наличие поверхностно-активных и стабилизирующих веществ, pH раствора, природа и концентрация восстановителя [1].

Задачами данного исследования являются: подбор оптимального способа синтеза платиновых катализаторов в рамках методики химического восстановления; попытка оптимизации методов синтеза Pt/C материалов путем использования «промежуточного» носителя и газовой фазы (атмосферы).

Синтез Pt/C катализаторов проводили посредством химического восстановления прекурсора Pt (IV). Расчетная массовая доля платины в синтезируемых материалах - 20%. В качестве восстанавливающих агентов использовали формальдегид, борогидрид натрия, этиленгликоль и муравьиную кислоту. В качестве углеродного носителя - графитизированную углеродную сажу Vulcan XC-72, «промежуточные» носители: свежеприготовленные золь гидроксида железа (II) и гель кремниевой кислоты. Была предпринята попытка синтеза платиноуглеродных материалов в атмосфере аргона и оксида углерода (II).

В ходе исследования был определен сложный характер влияния «промежуточного» носителя: формирование НЧ на $Fe(OH)_2$ с последующим переосаждением на углерод может приводить как к увеличению (боргидридный синтез), так и к уменьшению («формальдегидный» синтез) среднего диаметра кристаллитов и значений ЭХАП.

Изменение воздушной атмосферы на атмосферу CO в рамках «формальдегидного» синтеза Pt/C привело к уменьшению среднего размера НЧ от 3,2 до 1,4 нм и соответствующему увеличению ЭХАП от 61 до 112 м²/г(Pt). Замена воздушной атмосферы на атмосферу аргона также привела к уменьшению размера НЧ и увеличению ЭХАП, однако сопровождалась значительным уменьшением массовой доли платины в электрокатализаторе.

1. С.В. Беленов, В.Е. Гутерман. Альтернативная энергетика и экология, 2011, 9, 105 – 110

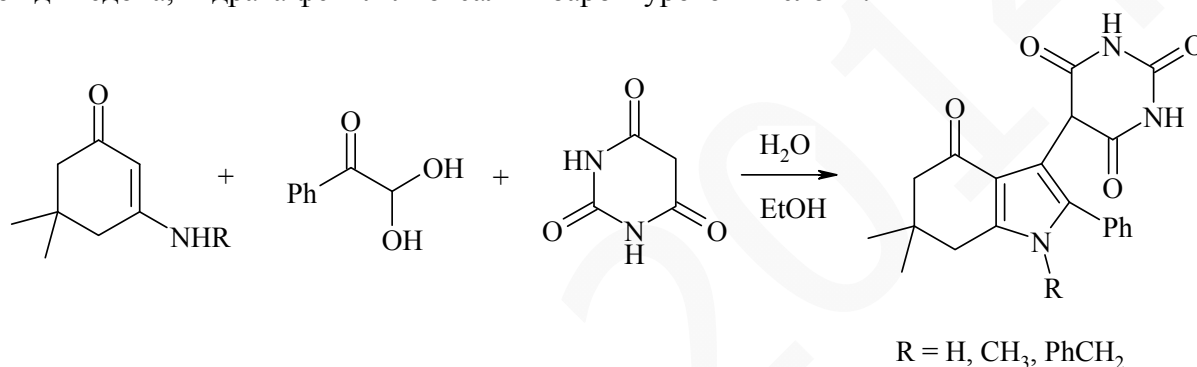
СИНТЕЗ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 4,5,6,7-ТЕТРАГИДРОИНДОЛА

Андина А.В.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток
argentum_fantaziya@mail.ru

В настоящее время известен ряд исследований, посвященных синтезу полиядерных азотсодержащих гетероциклов и исследованию их оптических свойств с целью создания новых полифункциональных материалов обладающих селективной сенсорной чувствительностью. Предложенный в работе метод синтеза позволяет в одну стадию получать целевые гетероциклические системы, минуя выделение промежуточных продуктов.

В данной работе исследована трехкомпонентная конденсация с участием некоторых енаминов димедона, гидрата фенилглиоксаля и барбитуровой кислоты.



Выходы продуктов реакции составили 63 – 78 % . Строение веществ доказано методами ИК- и ЯМР ¹H -спектроскопии. Установлено, что все полученные соединения являются органическими люминофорами. Спектры возбуждения и люминесценции были получены с использованием спектрофлуориметра Shimadzu RF-5301 PC. Выявлено, что данные азотистые гетероциклы могут быть использованы совместно с некоторыми соединениями редкоземельных металлов с целью создания новых оптических нанокомпозитов.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ АКВАТЕРМОЛИЗА МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Андреев А.О., Вазюков А.С., Лысогорский Ю.В.

Институт физики КПФУ, Казань
Andreev.alexey93@gmail.com

Акватермолиз – это совокупность реакций термического крекинга в присутствии воды. Акватермолиз используется при добыче тяжелой нефти и ее транспортировке для ее расщепления и понижения вязкости. В статье [1] серосодержащие соединения были выбраны в качестве моделей для серосодержащих примесей в тяжелых нефтях и рассмотрены реакции их расщепления в воде при температуре 460 °С. Основная особенность этих реакций состоит в том, что С-S гетеросвязь разрывается. Разрыв этой связи приводит к снижению вязкости в случае сырой тяжелой нефти. В ходе акватермолиза могут образовываться свободные радикалы. Они способны участвовать в реакциях полимеризации и образования больших молекул, что приводит к негативному эффекту увеличения вязкости нефти. Использование различных минералов и катализаторов может упростить разрыв гетеросвязей и замедлить процесс образования свободных радикалов, т.е. усилить эффект понижения вязкости. Представляет значительный интерес выбор таких катализаторов. Для простоты исследования вместо молекул тяжелых нефтей (асфальтены и смолы) удобно рассматривать молекулы с небольшой массой, но обладающие ключевыми особенностями – наличие гетеросвязи, например, циклогексил фенил сульфид (ЦФС) [2].

В данной работе мы рассматривали реакцию акватермолиза ЦФС с помощью *ab initio* методов, в рамках теории функционала плотности, в пакете программного обеспечения MedeA [3], а также PRIRODA [4] и GAUSSIAN[5]. Были рассмотрены несколько возможных путей реакции, как одностадийные, так и многостадийные, и вычислены барьеры и разницы свободных энергий Гиббса продуктов и реагентов этих реакций при различных температурах. Учет влияния температуры осуществлялся в квазигармоническом приближении. Для этого были вычислены частоты собственных колебаний молекул, которые использовались в расчете энтропийного вклада в свободную энергию.

В дальнейшем планируется изучить влияние присутствия различных каталитических ионов на высоту барьера реакции.

1. A. R. Katritzky et al. Energy & fuels, 1994, 8, №. 2., 498-506.
2. Siskin M. et al. Energy & Fuels, 1990, 4, №. 5., 482-488.
3. MedeA and Materials Design, 2013, www.materialsdesign.com
4. D.N. Laikov, Yu. A. Ustynyuk. Russian Chemical Bulletin, 2005, 54, 820-826.
5. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al. Gaussian, Inc., 2009. Wallingford CT.

ЗАЩИТА МЕТАЛЛОВ ОТ КОРРОЗИИ РАСТВОРАМИ ЛЕТУЧИХ ИНГИБИТОРОВ

Аникеева А.А.^a, Воробьева В.И.^a, Воробьева М.И.^b, Фатеев Ю.Ф.^a

^a *Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, Украина*

^b *Государственное высшее учебное заведения «Украинский государственный химико-технологический университет», Днепрпетровск, Украина
alyonaanikeeva@yandex.ru*

К настоящему времени в качестве летучих ингибиторов исследовано и рекомендовано несколько тысяч соединений, однако большинство из них не соответствует санитарно-гигиеническим и технологическим требованиям. В свою очередь перспективным является использование органических соединений растительного сырья для получения ингибиторов. Поэтому, задача синтеза новых летучих ингибиторов коррозии, на основе доступной сырьевой базы, является актуальной. Авторами установлено, синтезированный комбинационный летучий ингибитор на основе экстракта шрота рапса является эффективным парофазным ингибитором, обеспечивающий высокий уровень противокоррозионной эффективности в условиях периодической конденсации влаги. В соответствии с взглядами, разделяемыми в настоящее время большинством исследователей, при контакте паров летучего ингибитора с поверхностью металла, ингибитор растворяется в пленке влаги на металле и, адсорбируясь из нее на границе раздела с металлом с образованием, как правило, наноразмерных слоев, тормозит скорость протекания коррозии. Следовательно эффективность ингибиторов в общем виде помимо других факторов (давлением насыщенных паров и т.д.) определяется и защитной концентрацией в воде по отношению к металлу. Поэтому целесообразным является исследование противокоррозионной эффективности летучего ингибитора коррозии в водном растворе. Анализ гравиметрии свидетельствует, что исследуемый комбинационный ингибитор обладает защитной способностью в водных растворах (уровень противокоррозионной защиты $Z=97,3\%$). Поляризационными методами исследования установлено, что ингибитор тормозит обе электродные реакции коррозионного процесса, при этом изменение наклона анодной поляризационной кривой не происходит, что указывает, на то, что механизм коррозионного процесса не меняется.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МОДИФИКАТОРОВ X И S НА СВОЙСТВА ГЛИН АЛЕКСЕЕВСКОГО И САЛМАНОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Арискина К.А., Арискина Р.А., Салахов А.М.

Институт физики КФУ, Казань
kristina.ariskina.95@mail.ru

Введение безотходного производства – актуальная проблема современности в связи с экологическими проблемами и сокращением запасов природных ресурсов. Чтобы техногенные отходы можно было добавлять при изготовлении кирпича, нужно убедиться в пользе их действия на глину.

Для этого мы провели исследование влияния модификаторов X и S на глины Салмановского и Алексеевского месторождений. Данные модификаторы – это различные отходы завода по производству стекловолокна (г. Елабуга).

Сначала мы изготовили образцы без примесей и обожгли их при разных температурах, то же самое мы проделали и с образцами, к которым первоначально добавили определенное количество модификаторов. Мы измерили макроскопические характеристики (плотность, огневая усадка, водопоглощение) с помощью штангенциркуля, весов и др.

После выполнения опытов было установлено, что при добавлении модификатора S к глине Салмановского месторождения происходит уменьшение плотности образцов, увеличение водопоглощения, причем зависимость от концентрации модификатора данных характеристик нелинейная. С увеличением температуры обжига характеристики сильно меняются, окраска: с бледно-коричневого цвета до темно-желтого (при 1100°C). Это свидетельствует о непредсказуемости модификатора S, в связи с чем мы пришли к выводу, что использование его при производстве лицевого кирпича нецелесообразно. В то же время заслуживает внимание его применение для производства рядового кирпича.

Модификатор X, напротив, при добавлении его в глину проявил положительные характеристики: с увеличением его концентрации мы наблюдали увеличение плотности, заметное уменьшение водопоглощения. Мы пришли к выводу, что использование данного модификатора дает положительные результаты для изготовления лицевого кирпича.

ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ И ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОФАМИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ С КОМПОЗИТНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКОЙ НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ

Артамонова М.Л.^a, Гедмина А.В.^b, Челнокова И.А.^b, Шайдарова Л.Г.^b, Будников Г.К.^b

^a ОАО «Оргсинтез», Казань

^b Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
marta-art@mail.ru

Один из способов создания химически модифицированных электродов (ХМЭ) состоит в иммобилизации на поверхности углеродных электродов макроциклических комплексов $3d$ -переходных металлов с органическими лигандами, например, металлофталоцианинами (МРС), которые отличаются химической устойчивостью и высокой каталитической активностью. В настоящей работе иммобилизацию МРС на поверхности стеклоуглеродного электрода (СУ) проводили «методом капельного испарения» из раствора, содержащего полифталоцианин меди (II) (poly-Cu(II)Pc) с целью разработки высокочувствительного способа вольтамперометрического определения дофамина (ДА).

В кислых растворах ДА окисляется на немодифицированном СУ необратимо с перенапряжением при $E \sim +0.80$ В. На СУ с пленкой из poly-Cu(II)Pc происходит электрокаталитическое окисление ДА при $E + 0.60$ В. Каталитический эффект выражается в многократном (в 77 раз) увеличении тока окисления субстрата на ХМЭ по сравнению с током окисления модификатора и в уменьшении перенапряжения электроокисления ДА на этом ХМЭ по сравнению с немодифицированным СУ на 200 мВ. Определены условия нанесения пленки poly-Cu(II)Pc на поверхность СУ, при которых регистрируется максимальный каталитический эффект. Наилучшие электрокаталитические характеристики poly-Cu(II)Pc-пленки получены при следующих условиях ее иммобилизации: масса полимера 0.01 г, объем капли раствора полимера, используемого для «капельного испарения» составил 2 мкл и область циклирования потенциала от -0.5 В до +1.2 В. На основании полученных экспериментальных результатов разработан способ вольтамперометрического определения ДА на этом ХМЭ. Зависимость каталитического тока от концентрации ДА линейна в широком интервале. Нижняя граница определяемых содержаний составляет 5×10^{-7} М. ХМЭ с пленкой из poly-Cu(II)Pc был использован для вольтамперометрического определения ДА в лекарственных средствах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-97031).

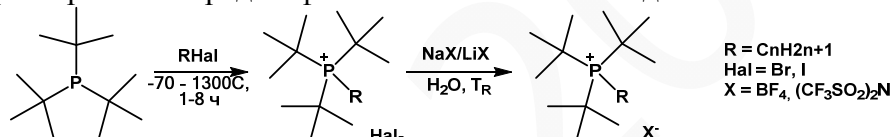
НОВЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО ЗАТРУДНЕННЫЕ СОЛИ ФОСФОНИЯ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Архипова Д.М., Ермолаев В.В., Милюков В.А., Нигматуллина Л.Ш., Синяшин О.Г.

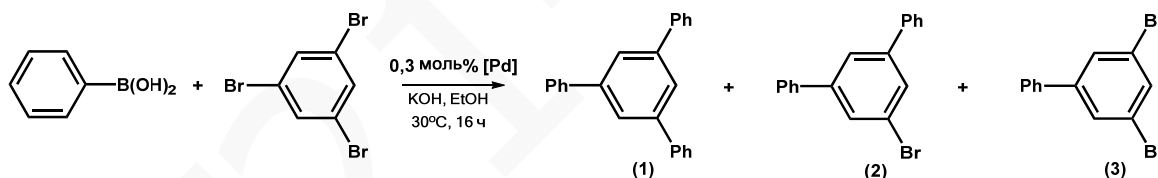
Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия
arkhipova-daria@mail.ru

В последнее время соли фосфония привлекают внимание ученых благодаря своим уникальным свойствам: незначительное давление паров, широкий температурный интервал жидкого состояния, термическая стабильность, высокая проводимость, широкое электрохимическое окно потенциалов [1]. Более того, варьируя структурные компоненты соединений возможно настроить данные параметры для решения конкретных задач. Сочетание этих полезных свойств обуславливает широкое использование солей фосфония в электронике, в процессах экстракции металлов, в медицине, в качестве катализаторов фазового переноса и органокатализаторов и т.д. [2]. Одной из наиболее важных областей применения солей фосфония является их использование в качестве растворителей для органических реакций, катализируемых переходными металлами.

Новые пространственно затрудненные соли фосфония были синтезированы по известной методике [3] и охарактеризованы рядом физико-химических методов.



Полученные соли фосфония были успешно применены для стабилизации наночастиц палладия с последующим использованием системы в каталитической реакции кросс-сочетания Сузуки.



Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (г/к №8451) и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (13-03-12170).

1. Chen, H.; Choi, J.-H.; Salas Cruz, D.; Winey, K. I.; Elabd, Y. A. *Macromolecules*, 2009, 42, 4809.
2. *Applications of Ionic Liquids in Science and Technology*, Edited by Scott T. Handy, Middle Tennessee State University, USA, 2011, ISBN 978-953-307-605-8, 528 pages.
3. V. Ermolaev et al., *Dalton Trans.*, 2010, 39, 5564-5571.

МЕЗОПОРИСТЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ В КАЧЕСТВЕ ПОДЛОЖКИ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ

Ахметшина А.И.^a, Давлетбаева И.М.^{a,b}

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

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

aai-89@mail.ru

Перспективными направлениями, в рамках которых могут быть использованы мезопористые материалы являются оптические химические сенсоры и тест-методы определения различных веществ. В ряде случаев в практике анализа более удобными могут быть сенсоры и чувствительные элементы на оптически прозрачных полимерных подложках, что позволяет проводить аналитические реакции на поверхности сорбента и разрабатывать на их основе сорбционно-фотометрические и тест-методы определения веществ.

Целью данной работы являлись синтез оптически прозрачных мезопористых полимерных материалов, установление взаимосвязи их свойств с химическим строением и надмолекулярной организацией полимеров, исследование полимеров в качестве полимерной подложки для аналитических сенсоров и активной среды для перестраиваемых лазеров на крастиелях.

С использованием методов диэлектрических потерь, атомно-силовой микроскопии, кинетических исследований и ИК-спектроскопии показана схема формирования мезопор при полимеризации ароматических изоцианатов на макроинициаторах анионной природы, представляющих собой открытоцепные аналоги краун-эфиров. Показана возможность иммобилизации функциональных органических реагентов в мезопоры полимера. Установлено, что органические люминофоры не только сохраняют свои спектрально-люминесцентные свойства в полимерной матрице, но и проявляют способность генерировать лазерное излучение. Исследованы процессы генерации лазерного излучения и фотохимического старения красителей ксантенового и мероцианинового ряда в мезопористых полимерах. Исследовано влияние строения полимера на фотохимическую стойкость генерирующих красителей. Установлена высокая фотохимическая стабильность органических люминофоров в порах полимера.

Исследованы электронные спектры органических хромофоров и их комплексов с ионами тяжелых металлов на мезопористой полимерной подложке. Проведены качественные реакции органического хромофоров арсеназо III, феназо и 1-(2-пиридилазо)-2-нафтола с катионами металлов на мезопористом полимерном носителе. В качестве определяемых соединений использовались водорастворимые соли Cu(II), Co(II), La (III), Ca (II) и Mg(II). Показано, что чувствительность реакций комплексообразования металлов и хромофоров на мезопористой полимерной подложке составила 10^{-5} г/л.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований грант № 12-03-97021

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДЫ ПУТЕМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ КОЛЕБАНИЙ

Пискунович Ю.И., Бадертдинов А.В., Хисамиева Л.Р., Нуруллин Ж.С., Хамидуллина А.А.

*Институт строительных технологий и инженерно-экологических систем КГАСУ, Казань
ainur-06@mail.ru*

Подготовка воды для хозяйственно-питьевых целей населения и нужд производства является довольно сложным процессом с применением реагентов. В процессе очистки требуется оперативно контролировать многочисленные качественные показатели воды как на промежуточных этапах обработки, так и после их завершения. На сегодня, лабораторный контроль качественных показателей воды является трудоемким и длительным процессом и не позволяет оперативно реагировать на изменения качества исходной и очищенной воды для своевременной корректировки технологии ее обработки.

В работе исследуется возможность применения прибора по определению активной электропроводимости жидких сред (патент РФ №2383010, G01N 27/06 от 04.05.2008) для ускорения лабораторного контроля по изменению содержания органических и неорганических примесей воды в процессе подготовки воды на водоочистной станции. Принцип основан на закономерности удельной проводимости воды в диапазоне электромагнитных частот от 1кГц до 2МГц в зависимости от вида и концентрации примесей.

Преимущества предлагаемого способа заключается в высокой точности и оперативности определения всех изменений, происходящих в воде, так как оценка изменения состава воды производится путем использования частот электромагнитных колебаний, присущих только данному веществу, в совокупности с удельными показателями. Кроме этого возможна автоматизации работы прибора в потоке жидкости, что особенно актуально при контроле особо опасных компонентов и вредных компонентов в составе жидкости в источнике водоснабжения.

ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В СИСТЕМЕ "β-ЦИКЛОДЕКСТРИН-ПРОИЗВОДНОЕ АДАМАНТАНА"

Базилин А.В., Яшкина Е.А., Яшкин С.Н.

ФГБОУ ВПО "Самарский государственный технический университет", Самара
alexander.bazilin@yandex.ru

Благодаря уникальной каркасной молекулярной структуре производные адамантана нашли широкое практическое применение в качестве компонентов высокоэффективных лекарственных препаратов, полимерных композиций, а также в синтезе прекурсоров для создания различных материалов в современной наноиндустрии. В связи с этим актуальным является поиск высокоселективных сорбентов, позволяющих проводить групповое и индивидуальное разделение молекул объемного строения из смесей природного (нефть, газ) и синтетического происхождения. Молекулы β-циклодекстринов (β-ЦД) по своим геометрическим параметрам идеально подходят для образования комплексов включения с молекулами адамантана и многих его производных. Заметим, что константы устойчивости таких комплексов на несколько порядков выше по сравнению с комплексами β-ЦД с другими органическими соединениями.

В настоящей работе впервые в широком интервале температур определены константы устойчивости (K_{CA}) комплексов β-ЦД с молекулами моно-, ди- и тризамещенных производных адамантана в условиях равновесной газожидкостной хроматографии. В качестве матрицы для растворения β-ЦД использовали глицерин. Показано, что на численные значения K_{CA} значительное влияние оказывает природа, число и положение заместителей в адамантановом фрагменте. Наиболее высокие значения K_{CA} характерны для производных адамантана, содержащих в своём составе функциональные группы (ОН-, NH₂- и др.), способные к образованию прочных водородных связей с экзоциклическими ОН-группами молекул β-ЦД. В ряду структурных изомеров моно-замещенных адамантана 1-изомеры имеют более высокие значения K_{CA} по сравнению с 2-изомерами. Для молекул производных адамантана, ван-дер-ваальсовый диаметр которых больше диаметра внутренней полости β-ЦД, макроциклический эффект практически не наблюдается. Обнаруженные макроциклические эффекты были исследованы посредством анализа величин энтальпии и энтропии комплексообразования, а также в координатах энтальпийно-энтальпийной компенсации. Установлено, что доминирующий вклад на комплексообразование вносит энтропийный фактор. На основании полученных данных были предложены смешанные ГЖХ-сорбенты, содержание в своём составе β-ЦД, чувствительные к молекулярной структуре производных адамантана.

ВЛИЯНИЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИХ ПИГМЕНТОВ НА ВЯЗКОСТЬ РАСТВОРОВ ПОЛИМЕРОВ

Байбурина Э.А., Азизова Э.Т., Зиганшина М.Р.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
a.elvira.9@gmail.com*

Уровень технологичности получения композиционных материалов, как например, способность к течению, являются функцией реологических показателей. В пигментированных полимерных системах одним из факторов регулирования вязкости является выбор оптимального соотношения полимер-пигмент. В качестве пигментов исследовались дисперсные манганиты, синтезированные методами растворной химии - осаждения, соосаждения, и керамическим методом твердофазного взаимодействия оксидов и солей [1]. Реологические исследования проводились на модельных системах с зафиксированным объемным соотношением пигмент-полимер-растворитель.

По мере увеличения скорости сдвига вязкость таких систем снижается. Присутствие активных центров на поверхности пигментов, взаимодействующих с полимером, приводит к нехарактерному виду концентрационной зависимости вязкости. При объемном наполнении 20 % и выше над структурирующим действием пигментных частиц превалирует пластифицирующий эффект. При наполнении 40 об.% и более наблюдается переход к более пологому участку кривых. В наибольшей степени это проявляется для Mn³⁺ содержащего пигмента. Аномалия вязкости для рассматриваемых объектов в сравнении с системами, содержащими в качестве включенной фазы инертный барит, является не следствием структурирования гетерогенной системы, а результатом взаимодействия полимера с активными центрами на поверхности пигментных частиц.

Степень окисления марганца в значительной мере оказывает влияние на реологические параметры пигментной суспензии. Аномальное снижение вязкости при высоком наполнении обеспечивает высокую технологичность процесса изготовления материала, а тиксотропные свойства - изготовление покрытия.

1. М.Р. Зиганшина, С.Н. Степин, М.С. Пешкова, В.Е. Катнов. Лакокрасочные материалы и их применение, 2005, 10, 34-36.

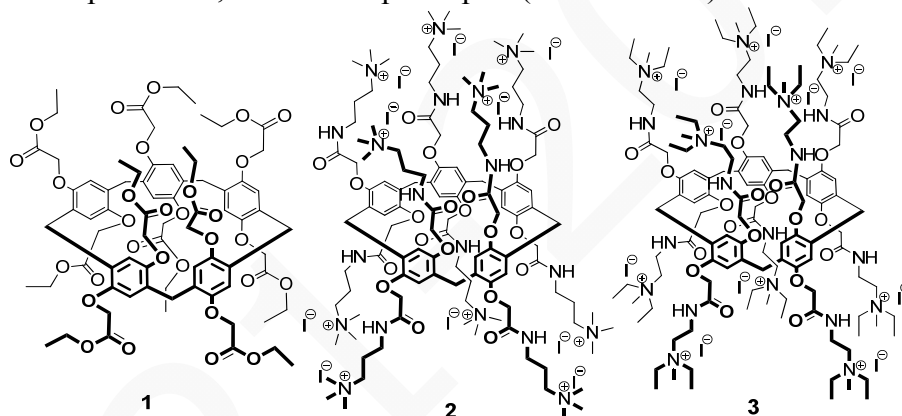
СИНТЕЗ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ

Басимова Л.Т.^a, Шурпик Д.Н.^a, Якимова Л.С.^a, Племенков В.В.^b, Стойков И.И.^a

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

^b Балтийский федеральный университет, Калининград
liliya685@mail.ru

Пиллар[5]арены способны к распознаванию «молекул-гостей» в различных растворителях с образованием комплексов включения. Но наибольший интерес представляют водорастворимые пилларарены, так как большинство биологических объектов, которые могут выступать в качестве молекул-«гостей», растворимы в воде [1]. В связи с этим, целью настоящей работы является синтез водорастворимых пиллар[5]аренов, и исследование способности к распознаванию различных субстратов. Первоначально аминолизом (диамины) этоксикарбонил замещённого пиллар[5]арена **1** были получены макроциклы, содержащие по десять амидных фрагментов, последующим алкилированием которых метилйодидом были получены соединения **2** и **3**. Структура и состав полученных соединений подтверждена методами ЯМР ¹H, ¹³C, 2M ЯМР NOESY ¹H-¹H, ИК спектроскопии, масс-спектрометрии (MALDI-TOF) и элементным анализом.



Методами ЯМР и УФ спектроскопии изучены комплексообразующие свойства синтезированных пиллар[5]аренов по отношению к *n*-толуолсульфонокислоте и определена структура полученного комплекса.

1. T. Ogoshi, T. Yamagishi. Bull. Chem. Soc. Jpn., 2013, 86, 312-332.

ОБУЧАЮЩАЯ ИНТЕРАКТИВНАЯ ВИРТУАЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРИЯ ПО СВОЙСТВАМ ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Бахтияров Д.И.^a, Ямалеева А.Ф.^b

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

^b Институт управления, экономики и финансов КФУ, Казань
dmbakh@mail.ru

Разработан подход к построению и пробная реализация виртуальной лаборатории по изучению физических и химических свойств веществ, получению и применению металлов, неметаллов и их соединений. Предложенный подход обеспечивает, поддержку мотивации ученика, позволяет автоматически оценить выполнение работы, при этом, давая возможность преподавателю гибко оценивать учащегося в обход автомата.

Была построена функциональная модель виртуальной лаборатории, а главное разработаны и реализованы эффективные алгоритмы решения задач в режиме удаленного доступа. В данном исследовании разработан подход, который позволяет преподавателю составить лабораторную работу, в которой ученик обладает широкой свободой действий.

При этом обучающая система может автоматически оценить правильность выполнения лабораторной работы, а преподаватель просмотреть ход выполнения работы учеником, скорректировать по своему усмотрению оценку, выставленную программой (если, например, ученик был близок к цели, но чуть-чуть не справился и т.п.), проанализировать ошибки ученика, сделать выводы о заинтересованности учащегося и т.д. Разработанная система способна автоматически распознать, все ли вещества получены и все ли обязательные реакции/действия применены, на основании чего выставить оценку.

Преподаватель может оценить проделанные работы своих учеников, тогда у ученика в предназначенной для этого панели рядом с названием работы появиться оценка. Учитель может это сделать через соответствующий раздел системы.

Таким образом, созданный виртуальный лабораторный практикум позволит ученику практически закрепить полученные теоретические знания, приобрести навыки самостоятельной работы с оборудованием; планировать и выполнять эксперимент.

ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЯДА ГОМО- И СОПОЛИМЕРОВ ПРОПИЛЕНА

Беззаметнов О.Н.^{а,б}, Булатова Г.Г.^{а,б}, Амирова Л.М.^{а,б}

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

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

bezzik_@mail.ru

Композиционные материалы на основе термопластичных связующих имеют ряд преимуществ по сравнению с композитами, имеющими терморезистивную матрицу: высокие ударопрочность и трещиностойкость, низкое водопоглощение и др. В широком ряду термопластов особый интерес вызывают полипропилен и сополимеры с этиленом благодаря достаточно высоким эксплуатационным свойствам и невысокой стоимости. Поэтому изучение и оптимизация технологических параметров переработки данного класса полимеров является задачей весьма актуальной.

Целью данной работы являлось изучение реологических, теплофизических и термомеханических характеристик ряда промышленно выпускаемых гомо- сополимеров пропилена, и исследование факторов влияющие на данные параметры.

В качестве объектов исследования были выбраны: гомополимеры (марки: PP1500J, PP1500N), статистические сополимеры пропилена и этилена (марки: PP4132B, PP4345S, PP4445S), блок-сополимеры пропилена и этилена (марки: PP7445LM, PP8300N, PP8300G, PP8348SM, PP8400G, PP9240M, PP9240K, PP9240N, PP9240P). Дополнительно в качестве стандартов для оценки молекулярно-массового распределения (ММР) были использованы полипропилены с известной молекулярной массой.

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии в режиме термомодуляции на DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия) определены температуры стеклования, плавления, текучести и деструкции разных марок полипропилена. Так же данным методом проведена оценка степени кристалличности и времени изотермической кристаллизации. Соотношения этиленовых и пропиленовых групп изучены методом ИК-спектроскопии на приборе TENSOR 27 с фурье-преобразованием. На реометрах DHR-2 TAI и HAAKE RheoStress RS6000 с применением программного обеспечения для анализа ММР для выбранного ряда гомо- и сополимеров пропилена проведена оценка ММР. Изучено реологическое поведение выбранного ряда полипропиленов в широком интервале температур и скоростей сдвига. Проведен анализ влияния содержания этиленовых групп на реологические и теплофизические свойства изученных полимеров. Даны рекомендации по оптимальным режимам переработки методом литья и экструзии.

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.

МАЛОВЯЗКИЕ ТЕРМОСТОЙКИЕ СВЯЗУЮЩИЕ ДЛЯ ПКМ НА ОСНОВЕ ФУРАНОВЫХ СМОЛ

Бессонов И.В., Копицына М.Н.

МГТУ им Н. Э. Баумана, Москва
ivanbessonov@gmail.com

В последние годы прикладываются значительные усилия по расширению ассортимента ценных химических продуктов из растительного биовозобновляемого сырья. Один из таких продуктов – фурфурол, получаемый кислотнo-катализируемой дегидратацией полисахаридсодержащих отходов сельскохозяйственного производства.

Синтетические смолы на основе фурфуrolа нашли широкое применение в качестве связующих для полимербетонов или антикоррозийных покрытий, благодаря таким своим свойствам, как устойчивость к горению и кислотам, хорошие физико-механические характеристики, малая вязкость, низкая цена. В то же время, практически отсутствуют систематические исследования по применению фурфуrolьных олигомеров и их композиций с эпоксидными смолами в качестве связующих для армированных пластиков.

Данная работа посвящена изучению химических и физико-механических свойств фурфуrolацетонoвой смолы, синтезированной из биовозобновляемого сырья, в качестве активного разбавителя эпоксидной смолы на основе диглицидилового эфира бисфенола А.

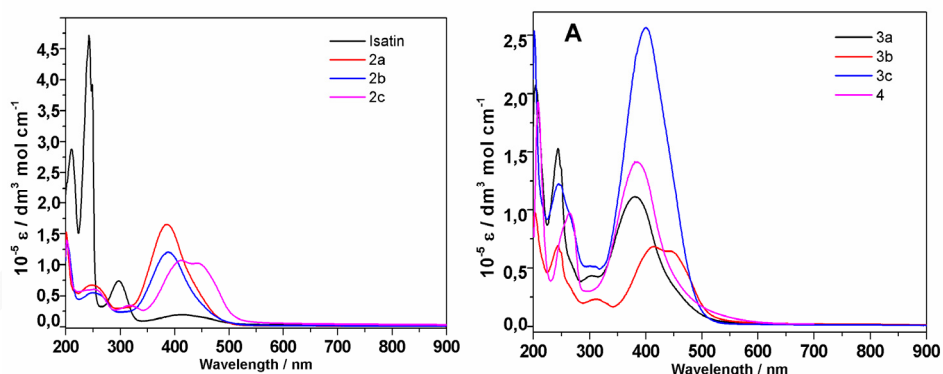
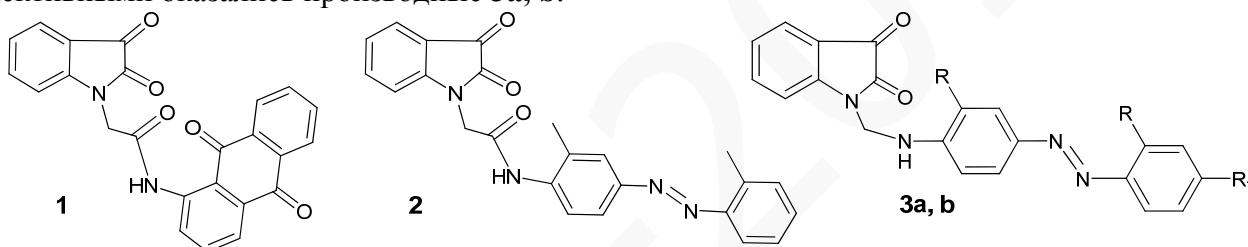
Получена серия связующих горячего отверждения, по своим реологическим характеристикам пригодных для безавтоклавных методов формования, таких как вакуумная инфузия и RTM (динамическая вязкость 200-500 мПа*с). Полученные связующие отверждены в двух режимах, одноступенчатом и двухступенчатом. Методом ДМА показано, что температура стеклования таких связующих составляет 140-150 °С, модуль упругости 3.000-3.500 МПа.

НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ИЗАТИНА, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ФРАГМЕНТАМИ КРАСИТЕЛЕЙ: ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА И УФ-СПЕКТРОСКОПИИ

Богданов А.В., Мусин Л.И., Вандюков А.Е., Миронов В.Ф.

ФГБУН ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
abogdanov@inbox.ru

Структурные особенности органических красителей обуславливают их применение в качестве ловушек света в биосистемах, самоорганизующихся полимеров, комплексонов, голографических устройств или светопоглощающих жидких кристаллов. При этом фотохимические свойства данных соединений зачастую зависят от строения заместителей в центральном фрагменте красителя. В данной работе был впервые получен ряд производных изатина, содержащих фрагменты красителей. Исследование аминотетирования изатина по Манниху показало, что направление этой реакции зависит от природы заместителя в азобензоле, например, наличие в ароматическом фрагменте донорных метильных или диметиламино-групп позволяет получать соединения типа **3a, b** с высокими выходами. Ввиду низкой растворимости соединений **1** и **2**, их УФ-спектроскопическое исследование не проводили. Наиболее перспективными оказались производные **3a, b**.



Работа выполнена при финансовой поддержке ОХНМ № 6 РАН и РФФИ (грант № 12-03-00164-а).

ПРИМЕНЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МОДИФИКАТОРОВ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ ФЕРМЕНТНЫХ СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ МОНОАМИНОКСИДАЗЫ

Брусницын Д.В., Медянцева Э.П., Варламова Р.М., Ситдикова Р.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
brussman@live.ru*

Перспективное направление при разработке современных биосенсоров для определения лекарственных препаратов с антидепрессивным действием - применение различных наноструктурированных материалов. Использование для модификации поверхности электродов многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), наночастиц серебра (НЧ Ag) и оксида графена (ГО) обуславливает получение лучших аналитических характеристик по сравнению с немодифицированными ферментными сенсорами.

Найдены условия закрепления на поверхности печатных графитовых электродов электродов МУНТ, НЧ Ag, ГО и иммобилизованной моноаминоксидазы для разработки соответствующих биосенсоров. Наличие наноструктурированных материалов на поверхности электродов доказано методами УФ спектроскопии, АСМ и СЭМ.

Функционирование предлагаемых биосенсоров основано на сочетании биохимической реакции окислительного дезаминирования моноаминов, реакции ингибирования каталитической активности MAO в присутствии антидепрессантов (АД), электрохимического окисления пероксида водорода как продукта ферментативной реакции. Аналитические возможности амперометрических биосенсоров на основе МУНТ/ НЧ Ag и ГО рассмотрены на примере определения АД - имипрамина, феназепам, моклобемида и амитриптилина.

Область рабочих концентраций для MAO биосенсоров на основе ГО и МУНТ/ НЧ Ag для АД составляет 1×10^{-4} - 1×10^{-8} М. Нижняя граница определяемых концентраций для АД в общем плане изменяется от 4×10^{-9} до 9×10^{-9} М.

Разработаны методики определения лекарственного вещества в лекарственных препаратах с антидепрессивным действием: «Мелипрамин», «Феназепам», «Аурорикс», «Амитриптилин» со значением S_r не более 0.081.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (грант № 13-03-01101-а).

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ Y-Ba-Fe-Co-Cu-O

Брюзгина А.В., Урусова А.С., Черепанов В.А.

*ВГАОУ ВПО Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
anna.bryuzgina@mail.ru*

Изучение фазовых равновесий в системе Y-Ba-Fe-Co-Cu-O проводили при 1273 К на воздухе. Для этого было приготовлено более 90 образцов с различным соотношением металлических компонентов.

Образцы для исследования получали по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям. Заключительный отжиг проводили при 1237 К, с последующей закалкой образцов на комнатную температуру (скорость охлаждения 300-400 К/с). Аттестацию полученных оксидов осуществляли методом рентгеновской порошковой дифракции в $Cu_{K\alpha}$ -излучении. Параметры элементарных ячеек были рассчитаны в программе «Celref 3» и уточнены методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «Fullprof 2011».

По результатам рентгенофазового анализа установлено, что однофазные сложные оксиды $YBaCo_{2-y-z}Fe_yCu_zO_{5+\delta}$ образуются в интервале составов $0 \leq y < 0.7$, $0 \leq z \leq 0.9$, при $y = 0.7$ $0.4 \leq z \leq 0.9$. А также ряд твердых растворов был получен на основе $YBaFe_{2-x}Cu_xO_{5+\delta}$, область гомогенности которого составила $1.0 \leq x \leq 1.1$. Дифрактограммы однофазных твердых растворов $YBaCo_{2-y-z}Fe_yCu_zO_{5+\delta}$ 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. $P4/mmm$). Для подтверждения структуру на образцах $YBaCo_{2-x}Me_xO_{5+\delta}$ (Me=Fe, Cu, $x=0; 0.2; 0.6$) была проведена электронная микроскопия.

Показано, что увеличение содержания меди в $YBaCo_{2-y-z}Fe_yCu_zO_{5+\delta}$ приводит к монотонному увеличению параметров и объема ячеек, что можно объяснить размерным эффектом. Для рядов твердых растворов с $0 \leq y < 0.7$ и $z = 0.4$ методом полнопрофильного анализа Ритвелда были рассчитаны структурные параметры.

По результатам РФА всех исследованных образцов предложена проекция изобарно-изотермической диаграммы состояния системы, базирующейся на сложных оксидах состава $YBaCo_2O_{5+\delta}$ -« $YBaFe_2O_{5+\delta}$ »-« $YBaCu_2O_{5+\delta}$ » при 1273 К на воздухе.

Коэффициенты термического расширения (КТР) изучаемых оксидов измерены на dilatометре Netzsch DIL 402C в интервале температур 298-1273 К на воздухе.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ДОПИРОВАННЫХ ПО В-ПОДРЕШЕТКЕ ФЕРРИТОВ БАРИЯ $\text{BaFe}_{1-x}(\text{Co},\text{Y})_x\text{O}_{3-\delta}$

Брюзгина А.В., Урусова А.С., Черепанов В.А.

*ВГАОУ ВПО Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
anna.bryuzgina@mail.ru*

Рентгенографические данные для $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ хорошо описывались в орторомбической ячейке (пр. гр. $P21212$), с параметрами: $a = 5.958 \text{ \AA}$, $b = 16.502 \text{ \AA}$, $c = 11.008 \text{ \AA}$. Было установлено, что в зависимости от температуры феррит бария имеет различную кристаллическую структуру.

Было показано, что введение иттрия в подрешётку железа приводит к образованию твёрдого раствора $\text{BaFe}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$, стабилизируя кубическую перовскитовую структуру. Из данных РФА было установлено, что замещение железа на кобальт привело к образованию твёрдых растворов состава $\text{BaFe}_{0.9-x}\text{Y}_{0.1}\text{Co}_x\text{O}_{3-\delta}$ с $0 \leq x \leq 0.15$. Дифрактограммы образцов были проиндексированы в рамках кубической ячейки, пространственная группа $Pm\bar{3}m$.

Методом высокотемпературной термогравиметрии (ТГ) получены зависимости содержания кислорода от температуры в $\text{BaFe}_{0.9-x}\text{Y}_{0.1}\text{Co}_x\text{O}_{3-\delta}$. Абсолютное значение содержания кислорода определено двумя методами: йодометрическим титрованием и полным восстановлением образца в токе водорода непосредственно в ТГ-установке. Данные хорошо коррелируют друг с другом.

С помощью метода дифракции лазерного луча определён размер частиц порошков $\text{BaFe}_{0.9-x}\text{Y}_{0.1}\text{Co}_x\text{O}_{3-\delta}$ (рисунок 1).

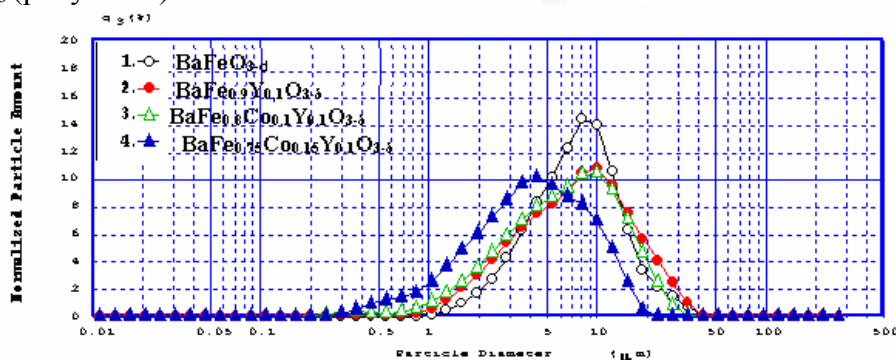


Рисунок 1. Гранулометрический состав порошков.

Показано, что с увеличением степени замещения железа на кобальт размер частиц уменьшается. Так же был рассчитаны коэффициенты термического расширения на dilatометре Netzsch DIL 402C.

НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНТАЛЬПИИ СУБЛИМАЦИИ И ИСПАРЕНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Нагриманов Р.Н., Бузюров А.В., Варфоломеев М.А., Соломонов Б.Н.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Elenabuzueova@mail.ru*

Определение термодинамических функций фазовых переходов веществ жидкость-газ и твердое вещество - газ является одним из важных разделов химической термодинамики. Традиционные способы измерения этих величин включают в себя изучение процессов перехода вещества из конденсированного состояния в газовую фазу. Однако, эти методы имеют ряд недостатков, которые подробно описаны в работе [1]. К числу наиболее принципиальных относятся, перевод энергии фазового перехода к стандартной температуре ($T=298.15\text{K}$), а также невысокая устойчивость различных веществ к нагреванию. В работе [1] был предложен более универсальный метод определения энтальпии испарения и сублимации веществ, при 298.15K . Основой этого метода стало уравнение 1.

$$\Delta_{\text{тв(ж)}}^{\circ} H^{A_i} = \Delta_{\text{раств.}} H^{A_i/S} - \Delta_{\text{сольв.}} H^{A_i/S} \quad (1)$$

В отличие, от энтальпии растворения, которую легко померить экспериментально, измерение энтальпии сольватации является не такой простой задачей. В работе [1] описан способ нахождения энтальпии сольватации через ее линейную зависимость между молекулярной рефракцией. Однако данный способ не работает для соединений, которые содержат сильную полярную группу.

В настоящей работе мы предлагаем новый способ определения энтальпии сольватации. Он заключается в нахождении энтальпии сольватации растворенного вещества, как аддитивной суммы составляющих ее фрагментов. Энтальпия сольватации, рассчитанная таким образом в совокупности с энтальпией растворения при 298.15K позволяет определить энтальпию испарения или сублимации при 298.15K .

Метод успешно себя зарекомендовал на более чем 120 различных ароматических и гетероароматических соединений, и их производных.

1. B.N. Solomonov, M.A. Varfolomeev, R.N. Nagrimanov, V.B. Novikov, D.H. Zaitsau, S.P. Verevkin. *Thermochimica Acta*, 2014, 589, 164-173.

ПОВЫШЕНИЕ СТЕПЕНИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ПОЛИЭФИРЭФИРКЕТОНОВ ВВЕДЕНИЕМ НУКЛЕАТОРОВ

Булатова Г.Г.^{a,b}, Цветкова Л.В.^a, Амирова Л.М.^{a,b}

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

^b *КНИТУ им. А.Н.Туполева, Казань*

Guliyabulatova17.02@yandex.ru

Полиэфирэфиркетоны в последние годы успешно конкурируют с металлами и термостойкими конструкционными полимерами и композиционными материалами в приборо- и машиностроении, электронике и, особенно, в медицине в качестве имплантантов. ПЭЭК обладают комплексом уникальных свойств: тепло- и термостойкость, износостойкость, низкая гигроскопичность, размеростабильность, устойчивость к УФ и более жесткому излучению, легкость переработки и т.д.

Механические свойства кристаллоаморфных термопластов в значительной степени зависят от степени кристалличности. На формирование кристаллической структуры полимеров влияют температуро-временные и сдвиговые условия, а также присутствие специальных добавок - нуклеаторов. Целью данной работы являлось исследование процессов кристаллизации ряда ПЭЭК и влияния ряда неорганических и металлоорганических пигментов и наполнителей на данный процесс. В качестве объекта исследования использовались полиэфирэфиркетоны Victrex 90P, Victrex 150UF10, Victrex 150PF, Victrex HTTMG22, Victrex ST G45. В качестве нуклеаторов были исследованы различные пигменты и наполнители.

Изучение процесса кристаллизации проводили с использованием дифференциального сканирующего калориметра DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия), термомеханические свойства контролировали с помощью динамического механического анализатора DMA Q800 (TA Instruments), реологические свойства исследовали на реометре HAAKE RheoStress RS6000.

Выявлено влияние природы наполнителя и его дисперсности на процесс кристаллизации, предложены составы с повышенной степенью кристалличности и, соответственно высокими механическими и термомеханическими свойствами, оптимизированы режимы формирования полимера. Изучены реологические свойства расплавов композиций, показана зависимость характера кривых вязкость-скорость сдвига от природы полимера, наполнителя, степени наполнения и дисперсности наполнителя.

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.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ТРИС-КОМПЛЕКСОВ Tb(III) И Fe (III) С БИДЕНТАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ В РАСТВОРАХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА

Бурилова Е.А., Амирова Л.Р., Зиятдинова А.Б., Журавлева Ю.И., Амиров Р.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
burilovajen07@mail.ru*

Исследование образования комплексов ионов металлов с лигандами в водных растворах полимеров является актуальной задачей, поскольку в таких системах возможна сильная модификация состава и свойств комплексных соединений. Кроме того, на основе систем Tb(III) - тирон (Tir) - полиэтиленимин (PEI), Fe(III) - Tir - PEI, Fe(III) - оксиэтандинфосфоновая кислота (HEDP) - PEI можно получать новые материалы, обладающие улучшенными каталитическими, люминесцентными, магнитными и другими свойствами. Подобные полимер-иммобилизованные металлокомплексы представляют интерес в качестве покрытия для электрохимических сенсоров, люминесцентных или парамагнитных меток и т.п.

В настоящей работе представлены результаты исследования состояния комплексов Fe(III) - Tir, Tb(III) - Tir, Fe(III) - HEDP в водных растворах полимеров методами ЯМР-релаксации, электронной и флуоресцентной спектроскопии. Установлено, что во всех системах трислигандные комплексы образуются количественно в кислой среде благодаря сильному электростатическому взаимодействию с центрами положительных зарядов полимера. Дополнительным важным условием стабилизации указанных комплексов является образование водородных связей между катионным центром (протонированные аминогруппы PEI) и анионными группами лиганда в комплексе, что установлено по сопоставлению реакций комплексообразования в растворах PEI и хлорида поли(диаллилдиметиламмония).

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

ЯМР ИГМП ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ И СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ БИЦЕЛЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Бухарова Э.Г., Рудакова М.А.

*Институт физики КФУ, Казань
azazello1312@gmail.com*

Бицеллярные системы являются примером модельных мембран активно применяемых в качестве объектов для исследования с помощью физических методов деталей липид-липидных и липид-протеиновых взаимодействий [1]. В основном такие исследования были направлены на получение структурной информации, но в 2005 году группой проф. МакДональда была предпринята попытка применить бицеллы для изучения динамических свойств мембраны, а именно коэффициента латеральной диффузии (КЛД) липидов при помощи метода ЯМР ИГМП [2].

Вообще, измерение КЛД в липидных системах методом ЯМР ИГМП имеет ряд сложностей. Предполагается [2], что благодаря дискообразному строению бицелл, их способности спонтанно ориентироваться в магнитном поле и применению специальных диффузионных «меток» – полиэтиленгликоль-липидов, удастся разрешить возникающие трудности. При этом из работы [2] очевидно, что вопрос о влиянии «меток» на состояние исследуемой системы и вклад в измеряемый коэффициент движения бицелл как целого не определен.

Попытке определить роль этих двух факторов при исследовании методом ЯМР ИГМП бицеллярных систем и посвящена эта работа. С этой целью получены значения предполагаемых КЛД липидов в более широком динамическом и временном диапазоне диффузии, проведены исследования бицеллярных систем в присутствии полиэтиленгликоля, предпринята попытка исследовать поведение полиэтиленгликолевой метки в составе ориентированных липидных бислоев.

1. J. Katsaras, T.A. Harroun, J. Pencer, M. Nieh “Bicellar” lipid mixtures as used in biochemical and biophysical studies // Springer-Verlag, 2005. P. 355-366
2. P.M. Macdonald, R. Soong. Diffusion NMR and bicelle morphology// Can. Chem. J., 2011. P. 1021-1034

ГАЛОГЕНИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ СОРБЕНТОВ

Вакалюк А.В.^a, Грищенко Л.Н.^a, Задерко А.Н.^a, Безуглая Т.Н.^a, Радкевич В.З.^b, Динок В.Е.^a

^a Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

^b Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь
vakaliukanna@ukr.net

Перспективность использования углеродных волокнистых сорбентов (УВС) для создания высокоактивных гетерогенных катализаторов обусловлена комплексом их свойств, среди которых наиболее важными являются большая удельная поверхность, высокая термическая и гидролитическая устойчивость. Химическая инертность углеродной матрицы УВС обуславливает необходимость предварительного галогенирования поверхности и получения галогенсодержащего прекурсора для дальнейшего замещения атомов галогена на другие функциональные группы, что обеспечивает возможность получения каталитических систем с активными центрами.

Для химического модифицирования использовали УВС "Бусофит" с удельной поверхностью 1200 м²/г. Согласно разработанным методикам проводили: хлорирование УВС парами ССl₄ при 550 °С; замещение атомов галогена на серосодержащие функциональные группы с последующим превращением их в SO₃H-группы, которые являются каталитически активными центрами кислотно-основных процессов.

Для образцов УВС, которые были прохлорированы по разработанной методике, за данными химического анализа (ХА) концентрация хлора в поверхностном слое составляет 4 ммоль/г. Согласно данным термогравиметрического анализа ТГА десорбция хлора происходит при температуре выше 500° С.

На основе хлорированных образцов УВС получены катализаторы, проявляющие значительную активность в модельной реакции дегидратации изопропилового спирта. Поверхностные активные центры (SO₃H-группы) этих катализаторов были получены в результате замещения атомов галогенов на меркаптогруппы, окисленные в дальнейшем до SO₃H-групп. Показано, что предварительное галогенирование УВС обеспечивает получение катализаторов с большей концентрацией SO₃H-групп, а также приводит к снижению (на 50-70 градусов) температуры полного превращения изопропилового спирта в пропилен по сравнению с негалогенированными SO₃H-содержащими образцами.

СИНТЕЗ КОАГУЛЯНТОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ИЗ БЕМИТ-КАОЛИНИТОВЫХ БОКСИТОВ

Валеев Д.В., Пак В.И., Седык М.А.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова
Российской академии наук, Москва
dmvaleev@yandex.ru*

Предлагается создание нового материала - высокоэффективного смешанного коагулянта на основе соединений хлорида алюминия и железа для очистки питьевых и сточных вод. В качестве сырья будут использоваться высококремнистые бемит-каолининовые бокситы, что позволит существенно снизить стоимость коагулянта по сравнению с существующими аналогами, которые производят из гидроксида алюминия.

Разрабатываемая технология получения коагулянтов основана на кислотном разложении бемит-каолининовых бокситов в автоклавных условиях, что даёт возможность отказаться от предварительного обжига боксита (сложного по технологии и аппаратурному оформлению), сохранив высокое извлечение оксида алюминия в раствор с получением высокоэффективных коагулянтов.

Исследование по переработке низкокачественных бокситов выполнены на пробе бокситов, состава, %: $Al_2O_3 - 52,0$; $SiO_2 - 14,0$; $Cr_2O_3 - 0,63$; $Fe_2O_3 - 13,0$; $TiO_2 - 2,9$.

В качестве вскрывающего реагента для переработки боксита использовали соляную кислоту. В ходе лабораторных исследований варьировали продолжительность, температуру процесса автоклавного вскрытия, концентрацию реагента, Т:Ж.

Были определены оптимальные параметры процесса вскрытия боксита. Предложена принципиальная технологическая схема производства коагулянта.

Из проведённых испытаний в ОАО "НИИ ВОДГЕО" следует, что коагулянт (гидроксохлорид алюминия и железа), полученные из Североонежских бокситов, соответствуют основным требованиям, предъявляемым при очистке воды: по цветности, мутности, остаточному содержанию железа и алюминия.

Получен сертификат соответствия в институте ФБУН "Федерального научного центра гигиены им. Ф.Ф.Эрисмана" Роспотребнадзора. Анализ и обобщение полученных результатов исследований позволяет рекомендовать применение алюможелезистого гидроксохлорида для очистки природной воды в опытно-промышленных испытаниях

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МНОГОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Валишина А.А., Лысогорский Ю.В.

*Институт физики КФУ, Казань
valishinalina@gmail.com*

В последнее время все большее внимание направлено на изучение электронных, механических и физико-химических свойств графена. Данный материал представляет собой слой атомов углерода, образующих гексагональную двумерную кристаллическую решетку. Существует ряд экспериментальных работ, в которых авторы наблюдают такие удивительные электронные свойства, как возможная гранулярная сверхпроводимость при высокой температуре [1-4]. В теоретических работах [5] утверждается, что сверхпроводимость графеновых образцов может быть объяснена наличием, так называемых, плоских электронных зон – энергетических уровней с расходящейся плотностью состояний на уровне Ферми. Источником таких зон могут служить как одномерные дефекты, например, межзеренные границы [6], так и интерфейсы между повернутыми друг относительно друга на малые углы слоями графена.

В данной работе исследовались электронные свойства графена методом *ab initio* моделирования в рамках теории функционала плотности (код VASP, интегрированный в программный пакет MedeA) [7]. Были рассчитаны зонные структуры одно- и двуслойного графена с дефектами вдоль межзеренной границы и обнаружено возникновение плоской зоны вблизи уровня Ферми. Кроме того, был исследован вопрос о влиянии деформаций типа сжатие/растяжение на плоскую зону. Установлено, что сжатие *поперек* межзеренной границы приводит к ее исчезновению, в то время как растяжение вдоль этого направления существенно не меняет характер зонной структуры. Однако ни сжатие, ни растяжение *вдоль* межзеренной границы не влияет на наличие плоской зоны. Полученные результаты коррелируют с теоретическими результатами, упомянутыми в работе [8].

1. T Scheike, *Advanced Materials*, 2012, 24, 201202219
2. A Ballestar, *New Journal Physics*, 2013, 15, 023024
3. T Schieke, *Carbon*, 2013, 59, 140
4. Y Kawashima, *AIP Advances*, 2013, 3, 052132
5. Heikkilä T. T., Kopnin N. B., Volovik G. E., *JETP letters*, 2011, 94, 233-239
6. Lei Feng, *Applied Physics Letters*, 2012, 101, 101902
7. MedeA® and Materials Design®, 2013. www.materialsdesign.com
8. Assaad F. F., *Nature Physics*, 2014, doi:10.1038/nphys3161

АНАЛИЗ ЗОННЫХ СТРУКТУР ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙСА НА ОСНОВЕ LAO/STO

Варламова И.И., Киямов А.Г., Пиянзина И.И.

*Институт физики КФУ, Казань
varlamova.irina93@gmail.com*

Поиск в материалах новых коллективных электронных состояний является одним из основных направлений современной физики конденсированного состояния. В последнее время основной интерес заключается в исследовании гетероструктур - слоистых материалов, образованных путем соединения двух или более структурно и химически различных веществ. Гетероструктуры на основе оксидов переходных металлов являются перспективной областью исследования нового направления физики. Эти соединения примечательны тем, что электроны d-оболочки сильно коррелированы. Это приводит к интересным многочастичным явлениям, таким как высокотемпературная сверхпроводимость, сегнетомагнетизм, колоссальное магнетосопротивление, сегнетоэлектричество. В 2004 году обнаружили проводимость в гетероинтерфейсе, состоящем из двух изоляторов LaAlO_3 и SrTiO_3 (LAO/STO) [1].

В рамках настоящей работы с помощью *ab initio* расчетов методом теории функционала плотности [2,3], реализованного в программе MedeA-VASP 5.3 [4], решалась задача исследования электронных свойств гетероинтерфейса LAO/STO. Рассматриваемые структуры представляли собой ограниченную с двух сторон разным количеством слоев LaAlO_3 центральную область SrTiO_3 (5,5 слоёв, TiO_2 - поверхностный). Изучалась зависимость зонной структуры и плотности состояния от количества слоев LaAlO_3 . Полученные результаты коррелируют с ранее известными [5,6]. Наши результаты могут быть использованы для выделения проводящего слоя в гетероинтерфейсе. В дальнейшем планируется рассмотрение влияния кислородных вакансий на проводимость.

Выражаем благодарность НИВЦ МГУ за доступ на суперкомпьютер «Ломоносов».

1. A. Ohtomo, H. Y. Hwang. Nature, 2004, 427, 423-426.
2. P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B, 1964, 136, 864.
3. W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. A, 1965, 140, 1133.
4. MedeA® and Materials Design®, 2013. www.materialsdesign.com.
5. F. Cossu, U. Schwingenschlögl, V. Eyert. Phys. Rev. B, 2013, 88, 045119.
6. R. Pentcheva, W. E. Pickett. Phys. Rev. B, 2008, 78, 205106.

АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЙВАНИЯ СВЕТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ НЕПРОЗРАЧНЫХ СИСТЕМ

Васильев А.С., Горшков А.М.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
gelgel786@gmail.com*

В последнее время, благодаря появлению лазерных источников излучения, большое распространение получили оптические бесконтактные методы определения характеристик дисперсных сред. Наиболее перспективным среди них является метод динамического рассеивания света (ДРС). Данный метод основан на явление рассеяния света, и предназначен для измерения размеров нано- и субмикронных дисперсных частиц[1]. Метод ДРС традиционно применяется только для оптически прозрачных, сильно разбавленных суспензий. Однако существует широкий класс объектов, такие как нефть, мазут, концентрированные растворы гудронов и асфальтенов, которые практически непрозрачны для видимого света за счет сильного поглощения. Использование лазера с длиной волны, входящей в диапазон инфракрасного излучения, решает данную проблему и позволяет использовать метод ДРС для определения размеров частиц в непрозрачных системах.

Цель данной работы – определение размеров частиц в непрозрачных системах методом ДРС.

В качестве объекта исследования был выбран раствор калиброванного полистирольного латекса в воде с добавлением чернил разной концентрации.

Одной из основных задач, решаемых для достижения цели данной работы, было выявление влияние различных факторов на определение размера частиц таких как: концентрация чернил, толщина поглощающего слоя кюветы, угол рассеяния, длина волны лазера.

В ходе работы был определен средний радиус частиц, а также среднее квадратичное отклонение (СКО) повторяемости радиуса для одной серии экспериментов и СКО воспроизводимости радиуса частиц при влиянии разных факторов.

В результате исследования можно сделать вывод о пригодности использования инфракрасного лазера для определения размера частиц в непрозрачных растворах. Для получения достоверных результатов необходимо проводить исследования под углом рассеяния света равным 90° .

1. Буря Е.Г. Исследование процессов агрегации асфальтенов в углеводородных системах: На правах рукописи. Дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук. – Москва, 2001г. – 109 с.

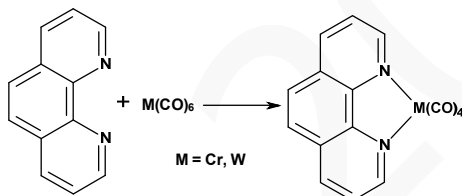
ТЕТРАКАРБОНИЛФЕНАНТРОЛИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЕТАЛЛОВ 6 ГРУППЫ В РЕАКЦИЯХ С ОКСОДИЕНАМИ: ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Васильев Е.В., Черкасов Р.А., Курамшин А.И.

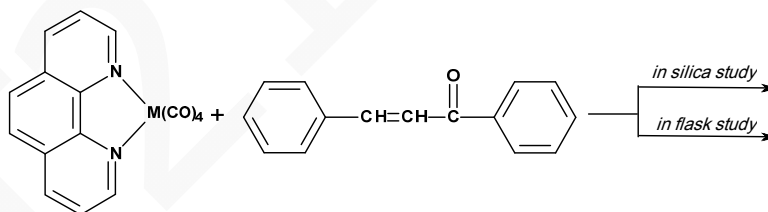
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
pale_sky@mail.ru

Ранее было продемонстрировано, что использование металлоорганических соединений с карбонильными лигандами в реакциях с оксодиенами, не позволяет выделять и изучать получаемые соединения на препаративном уровне из-за их термодинамической неустойчивости и склонности к диспропорционированию [1].

В качестве устойчивой к диспропорционированию металлоорганической платформы для региоселективной функционализации элементоорганических соединений выгоднее использовать металлоорганические соединения, в которых для понижения вероятности диспропорционирования часть карбонильных лигандов замещена на полидентатный лиганд. В поисках подходящих лигандов мы изучили возможность стабилизации металлоорганических соединений с помощью о-фенантролина.



Мы осуществили синтез орто-фенантролинтетракарбонилметаллов(0), изучена их реакция с 1,3-дифенил-2-пропен-1-оном и 1,3-дифенил-2-пропен-1-тионом; изучение взаимодействия полученного комплекса с гетеродиенами изучали как экспериментально (*in flask*), так и теоретически (*in silica*).



В докладе обсуждаются структуры продуктов реакций и механизмы их образования.

1. Курамшин А.И., Курамшина Е.А., Черкасов Р.А. Журн. орг. хим. 2004. Т.40. Вып.9. С.1315-1323.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОРГАНОСИЛОКСАНОВЫХ MQ СОПОЛИМЕРОВ МЕТОДОМ ЯМР

Васильев С.Г.^a, Волков В.И.^a, Татарина Е.А.^b, Музафаров А.М.^b

^a *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

^b *Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва*
viesssw@mail.ru

MQ сополимеры, также называемые MQ смолами – это кремнийорганические полимеры, обладающие трехмерной разветвленной структурой. Свое название они получили согласно известной номенклатуре кремнийорганических соединений, в которой составляющие звенья обозначаются в соответствии с количеством атомов кислорода, соединенных с атомом кремния: M, D, T, Q для обозначения моно-, ди-, три- и тетрафункциональных звеньев соответственно [1]. MQ смолы используются для создания широкого круга продуктов начиная от косметических средств и заканчивая композитными материалами. Наиболее распространено применение MQ смол в качестве покрытий, среди которых покрытия для пластика, бумаги и клеи чувствительные к давлению. Несмотря на высокую практическую значимость, исследования структуры и свойств, представленные в научной литературе, немногочисленны.

Объекты, исследованные в настоящей работе, были получены методом гидролитической поликонденсации в активной среде [1,2]. Особенностью метода является то, что и исходные реагенты и получаемые продукты растворимы в активной среде – уксусной кислоте, которая также является сореагентом. Это позволяет в значительной степени контролировать состав и структуру получаемых MQ сополимеров.

Структура MQ смол определяется тремя параметрами: соотношение звеньев M/Q в составе молекулы, молекулярная масса, доля OH групп. Мощным средством для изучения органосилоксановых полимеров является метод ЯМР. Для получения данных о составе и строении MQ сополимеров в настоящей работе использовался метод спектроскопии ЯМР в твердом теле, а также метод ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля для измерения коэффициентов самодиффузии.

1. S.G. Vasil'ev et. al Appl. Magn. Reson., 2014, V. 45 (4), pp. 315-328.
2. E.V. Egorova et. Al Dokl. Chem., 2009, V. 424 (1), p.15

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ SrR_2O_4 (R= Y, Nd, Sm, Gd, Dy)

Вильф Я. З., Лысогорский Ю.В.

*Институт физики К(П)ФУ, Казань
jakobvilf@gmail.com*

Соединения класса SrR_2O_4 (R=Y, Nd, Sm, Gd, Dy) широко используются как люминесцентные материалы [1]. Кроме того, они служат в качестве модельных систем для изучения фрустрированного магнетизма [2]. Поэтому представляет интерес выделение магнитного вклада в такие экспериментально измеряемые величины, как, например, теплоемкость.

В данной работе методами *ab initio* моделирования, с использованием метода теории функционала плотности [3], исследуются соединения типа SrR_2O_4 , где R=Y, Nd, Sm, Gd, Dy. Все расчеты проводились в программном комплексе MedeA® [4]. На начальном этапе мы провели оптимизацию кристаллической структуры, используя различные функционалы (GGA-PBE, GGA-AM05, GGA-PBEsol, GGA-BLYP, GGA-rPBE и LDA) и выбрали наиболее оптимальный из них, ориентируясь на совпадения параметров решетки с экспериментальными данными [5]. Следующим этапом был расчет колебательных свойств кристаллической решетки этих соединений. Были получены инфракрасные и рамановские спектры, а также зависимость решеточного вклада в теплоемкость от температуры. В дальнейшем планируется экспериментальное измерение температурных зависимостей теплоемкости, инфракрасных и рамановских спектров и порошковых рентгеновских дифрактограмм. Разница между экспериментально измеренной теплоемкостью и рассчитанным решеточным вкладом в нее позволит судить о величине магнитной составляющей теплоемкости и поможет в теоретических исследованиях магнитных свойств этих соединений. Кроме того, будет представлять интерес сравнение ширины запрещенной зоны указанных соединений, измеренной методом ультрафиолетовой спектроскопии, со значениями, полученными *ab initio* методами с использованием современных metaGGA функционалов.

1. M. Taibi et al. Journal of Physics: Condensed Matter, 1993, **5**, 5201.
2. O. Young. Magnetic properties of two geometrically frustrated compounds: SrHo_2O_4 and SrGd_2O_4 . PhD thesis, University of Warwick, October 2013.
3. M. Petersen, J. Hafner, M. Marsman. Journal of Physics: Condensed Matter, 2006, **18**, 7021.
4. MedeA® and Materials Design®. 2013. www.materialsdesign.com.
5. L. M. Lopato. Ceramurgia International, 1976, **2**, 18-32.

СОЗДАНИЕ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА СОСТАВА АЛЮМИНИЙ/УГЛЕРОДНОЕ НАНОВОЛОКНО И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ

Возняковский А.А., Шахов Ф.М.

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
alexey_inform@mail.ru*

Алюминий (Al) широко применяется в современном материаловедении в качестве конструкционного материала (КМ). К достоинствам Al относятся его малый удельный вес и высокая теплопроводность. К недостаткам можно отнести недостаточные для ряда практических применений прочностные параметры и, как не парадоксально, ту же высокую теплопроводность. В данной работе к решению задач по повышению прочностных параметров при одновременном снижении теплопроводности подходили в рамках стратегии композиционных материалов.

В качестве базового материала был выбран порошок Al марки ПА-4. Основным процессом создания блочных материалов был выбран метод горячего прессования (МГП). Поставленные задачи решались модификацией поверхности исходного порошка с целью изменения его поверхностных характеристик. С этой целью была разработана методика прививки на поверхность Al углеродных нановолокон (УНВ).

В процессе работы получили 4 группы образцов материала с содержанием 0 (чистый Al), 1, 1.5 и 2 масс. % УНВ. Каждая группа обрабатывалась МГП на промышленном прессе при давлении 5 ГПа с варьированием температуры. Теплопроводность измерялась методом лазерной вспышки. Твердость измерялась методом Бринелля.

Результаты исследований показали, что добавление уже 1 масс. % УНВ, по сравнению с чистым Al, приводит к росту твердости в 2 раза с 30 НВ до 61 НВ [1] и падению теплопроводности в 3 раза с 237 Вт/(м*К) до 70 Вт/(м*К).

Исходя из свойств, данный материал может применяться в качестве КМ корпусов различных устройств, предназначенных для работы в условиях Крайнего севера.

Работа поддержана грантом УМНИК № 0005687

1. Т.С. Кольцова, Ф.М. Шахов, А.А. Возняковский и др., Получение компактного материала алюминий – углеродные нановолокна методом горячего прессования, ЖТФ, 2014, 84, 47-51.

СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ Fe-30%Cr-8%Co

Вомпе Т.А., Миляев И.М.

*ФГБУН Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва
tvompe@imetran.ru*

Магнитотвёрдые сплавы на основе системы Fe-Cr-Co широко используются в производстве малогабаритных постоянных магнитов и являются перспективными материалами для изготовления активной части ротора гистерезисного электродвигателя. По своим магнитным свойствам они занимают промежуточное положение между магнитотвёрдыми ферритами и дорогостоящими спечёнными редкоземельными постоянными магнитами, близки к магнитам из сплава ЮНДК24 или Алнико 5. Снижение содержания кобальта в Fe-Cr-Co сплавах, как самого дорого компонента, и улучшение магнитных свойств является актуальной задачей в исследовании этих материалов.

Цель данной работы изучить структуру и магнитные свойства низкокобальтого магнитотвердого сплава Fe-30%Cr-8%Co-(1-3)%Mo-0,5%Si.

Для приготовления образцов использовали метод порошковой металлургии по разработанной методике [1]. Относительная плотность готовых образцов составила 97,4-99,9 %. Магнитные свойства измеряли на гистерезисграфе «Permagraph L». Электронномикроскопические исследования проводили на фольгах, которые были вырезаны вдоль и поперек направления магнитного поля, приложенного в процессе термомагнитной обработки на просвечивающем электронном микроскопе JEM 1400.

Высококоэрцитивное состояние Fe-Cr-Co сплавов получается в результате термомагнитной обработки, в процессе которой происходит спинодальный распад α -твёрдого раствора на сильномагнитную α_1 -фазу и слабомагнитную α_2 -фазу. Методом планирования эксперимента была определена оптимальная обработка для исследуемых сплавов и получены максимальные магнитные свойства на сплаве Fe-30%Cr-8%Co-3%Mo-0,5%Si – $B_r=1,2$ Тл, $H_c=36,3$ кА/м, $(BH)_{max}=28,8$ кДж/м³. Микроструктура сплава состояла из частиц α_1 -фазы размером 20 нм в матрице α_2 -фазы.

1. Вомпе Т.А., Миляев И.М., Юсупов В.С. Перспективные материалы, 2013, 4, 59 - 63.

**ОБ ИНГИБИРУЮЩЕМ ДЕЙСТВИИ СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЛЕТУЧИХ ИНГИБИТОРАХ
КОРРОЗИИ НА ОСНОВЕ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ**

Воробьева В.И.^a, Воробьева М.И.^b., Чигиринец Е.Э.^a, Трус И.Н.^a

^a *Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, Украина*

^b *Государственное высшее учебное заведение «Украинский государственный химико-технологический университет», Днепрпетровск, Украина
viktorkathebest@yandex.ru*

Для защиты от атмосферной коррозии применяются ингибиторы, в ряду которых особое место занимают летучие ингибиторы атмосферной коррозии стали (ЛИАК), способные защищать изделия сложной формы из различных металлов. К настоящему времени в качестве ЛИАК исследовано и рекомендовано несколько тысяч соединений, однако, большинство из них не соответствуют экономическим и технологическим требованиям. Таким образом, задача синтеза или разработки технологии производства и применения новых летучих ингибиторов коррозии, остается по-прежнему актуальной. С учетом постоянно повышающихся экологических и экономических требований к летучим ингибиторам авторами установлено, что перспективным сырьем для их синтеза могут быть соединения растительного происхождения, а именно экстракты растительного сырья. Так, авторами [1] установлено, что перспективным сырьем для синтеза летучих ингибиторов коррозии может быть использование экстрактов шрота рапса. Установлено, что составы на основе экстракта шрота рапса и азотсодержащих соединений обеспечивают высокую ингибирующую эффективность ($Z=99,5$ %). Установлено, что комбинационные составы являются ингибиторами смешанного типа, тормозящие как анодную, так и катодную реакции коррозионного процесса. На основе комплекса исследований изменения защитных свойств и морфологии формируемой за это время защитной пленки, установлено, что формирование защитного слоя для комбинационных летучих ингибиторов атмосферной коррозии происходит в течение 24...40 часов. Защита от коррозии стали происходит за счет блокирования (экранирования) поверхности металла химически адсорбированными молекулами ингибитора.

1. Е.Э. Чигиринец, В.И. Воробьева, А.С. Бережницкая. Химия растит. сырья, 2014, 1, 209 – 214.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ В ВОДНОЙ СРЕДЕВоробьева М.И.^a, Пивоваров А.А.^a, Воробьева В.И.^b^a Украинский государственный химико-технологический Университет, Днепрпетровск,
Украина^b Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
Киев, Украина
Rita-vorobyova@yandex.ru

Наночастицы меди имеют существенный потенциал использования в производстве современных катализаторов, смазывающих и композитных материалов, в создании медицинского оборудования и т.д. Наиболее простым и дешёвым способом их получения является синтез наночастиц (НЧ) путем восстановления ионов меди (II) в растворах, поскольку он не требует сложного технического исполнения и позволяет контролировать размер и морфологию получаемых продуктов [1]. Восстановление с использованием плазменных разрядов являются одними из перспективных способов получения наночастиц металлов в растворах. Получение наночастиц металлов при воздействии на растворы, содержащие соли металлов, высоких энергий связано с генерацией высокоактивных восстановителей типа электронов, радикалов и возбужденных частиц. Многие химические процессы, возникающие при воздействии на водные растворы плазмы, также объясняются образованием гидратированных электронов, радикалов и возбужденных частиц. Отдельное место среди плазмохимических разрядов занимает контактная неравновесная низкотемпературная плазма (КНП). Плазменный разряд генерируется между электродом находящимся в газовой фазе, и поверхностью жидкости, в объеме которой находится второй электрод. Таким образом, химические превращения на границе раздела фаз обусловлены комплексным воздействием: электрохимическим окислением-восстановлением; реакциями фотолиза, инициируемых УФ - облучением; потоком заряженных частиц из газовой фазы на поверхность жидкой среды. Эффективность использования КНП для синтеза некоторых металлов из водных растворов установлено экспериментальными исследованиями. Так, например, о восстановлении золота и серебра под действием КНП сообщается в работе [2]. В связи с чем, исследования, направленные на изучение процессов получения наночастиц металлов в условиях воздействия КНП, вызывают определенный интерес.

В работе показана эффективность использования КНП для получения наночастиц меди из водных растворов ее соли без дополнительного введения восстановителей и высокомолекулярных стабилизаторов. Установлено влияние исходной концентрации прекурсора и электрических параметров плазмохимической установки на процесс синтеза золей. Полученные гидрозоли изучены методами оптической спектроскопии, РЭМ и АСМ. Исследовано форму и размеры полученных частиц. Распределение частиц по размерам оказалось близким к гауссовому. Предложен механизм образования частиц под действием плазмы. Исследование показало, что гидрозоли содержат наночастицы размером, с распределением в широком диапазоне (размер 10 – 40 нм).

1. K.C. Anyaogu, A.V. Fedorov, D.C. Neckers. *Langmuir*, 2008, 24. №8, 4340-4346.

2. М. І. Воробйова, О. А. Півоваров, В. І. Воробйова. *Вісник східно-європейського національного університету ім. Володимира Даля*, 2014, 4 (70), 39-44.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Воробьева М.И.^a, Борисов И.А.^a Воробьева В.И.^b

^a Украинский государственный химико-технологический Университет, Днепрпетровск,
Украина

^c Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
Киев, Украина
Rita-vorobyova@yandex.ru

В настоящее время высокая перспективность создания новых нано-размерных материалов (НМ) и расширение областей их эффективного применения подтверждена многочисленными исследованиями и уже имеющейся широкой практикой использования НМ в разных областях техники [1]. Одним из наиболее важных направлений является поиск и изучение способов получения новых НМ, исследование свойств и вариантов их практического использования. Высокой технологической перспективностью обладает метод получения наноразмерных (НР) металлов, основанный на восстановлении их соединений в растворах (водных и неводных) при контролируемых условиях реакции (температура и рН реакционной смеси, соотношение концентраций реагентов, воздействие электромагнитных полей и т. д.). Однако основным недостатком является необходимость использования специально подобранных восстановителей. Восстановление с использованием плазменных разрядов являются одними из перспективных способов получения наночастиц металлов в растворах. Получение наночастиц металлов при воздействии на растворы, содержащие соли металлов, высоких энергий связано с генерацией высокоактивных восстановителей типа электронов, радикалов и возбужденных частиц. Отдельное место среди плазмохимических разрядов занимает контактная неравновесная низкотемпературная плазма (КНП). Плазменный разряд генерируется между электродом находящимся в газовой фазе, и поверхностью жидкости, в объеме которой находится второй электрод. Таким образом, химические превращения на границе раздела фаз обусловлены комплексным воздействием: электрохимическим окислением-восстановлением; реакциями фотолиза, инициируемых УФ - облучением; потоком заряженных частиц из газовой фазы на поверхность жидкой среды. Эффективность использования КНП для синтеза некоторых металлов из водных растворов установлено экспериментальными исследованиями. Так, например, о восстановлении золота и серебра под действием КНП сообщается в работе [2]. В связи с чем, исследования, направленные на изучение процессов получения наночастиц металлов в условиях воздействия КНП, вызывают определенный интерес.

В работе показана эффективность использования КНП для получения наночастиц кобальта из водных растворов ее соли без дополнительного введения восстановителей и высокомолекулярных стабилизаторов. Установлено влияние исходной концентрации прекурсора и электрических параметров плазмохимической установки на процесс синтеза золь. Полученные гидрозоль изучены методами оптической спектроскопии, РЭМ и АСМ. Исследовано форму и размеры полученных частиц. Распределение частиц по размерам оказалось близким к гауссовому. Предложен механизм образования частиц под действием плазмы. Исследование показало, что гидрозоль содержат наночастицы размером, с распределением в широком диапазоне (размер 15 – 45 нм).

1. K.C. Anyaogu, A.V. Fedorov, D.C. Neckers. *Langmuir*, 2008, 24. №8, 4340-4346.

2. М.І. Воробйова, О. А. Піваров, В. І. Воробйова. *Вісник східно-європейського національного університету ім. Володимира Даля*, 2014, 4 (70), 39-44.

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Воробьев В.В.^{a,b}, Осин Ю.Н.^b, Таюрский Д.А.^a, Степанов А.Л.^c

^a *Институт физики КФУ, Казань*

^b *Междисциплинарный центр «Аналитическая микроскопия» КФУ, Казань*

^c *Лаборатория радиационной физики КФТИ, Казань*

VyVVorobev@kpfu.ru

Представлены результаты электронно-микроскопического и локального структурного исследования структуры нанопористого кремния, полученного нетрадиционным способом на основе низкоэнергетической высокодозовой имплантации ионов Ag^+ в пластины монокристаллического Si [1]. Методом дифракции отраженных электронов [2] показано изменение кристаллической решетки кремния, как в результате её ионного облучения, так и последующего термического отжига в вакууме при 600°C.

Формирование пористых слоев выполнялись на ионно-лучевом ускорителе ИЛУ-3. Исследования структуры локальных участков поверхности проводились на универсальном аналитическом высокоразрешающем сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Merlin (Carl Zeiss), оснащенным детектором дифракции отраженных электронов NordLys HKL (Oxford Instruments).

Экспериментальная дифракционная картина представляет собой суперпозицию слабоинтенсивной дифракции кристаллической Si подложки, и диффузных колец от аморфной разупорядоченной структуры приповерхностного слоя PSi. Далее проводился термический отжиг, в результате чего на дифракционной картине наблюдается появление размытых линий Кикучи, указывающих на кристаллизацию пористой структуры до кубической сингонии.

1. A.L. Stepanov, A.A. Trifonov, Y.N. Osin, V.F. Valeev, V.I. Nuzhdin. New way for synthesis of porous silicon using ion implantation. Optoelectronics and Advanced materials – Rapid Communications (2013) V. 7, № 9-10, P. 692-697.
2. Schwartz Adam J., Kumar Mukul, Adams Brent L., Field David P, Electron Backscatter Diffraction in Materials Science, – 2nd ed. – Springer, 2009.

САМООРГАНИЗАЦИЯ И ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ НОВОГО ПИРИМИДИНСОДЕРЖАЩЕГО АМФИФИЛА И ЕГО БИНАРНОЙ СМЕСИ С ЦЕТИЛТРИМЕТИЛАММОНИЙ БРОМИДОМ

Габдрахманов Д.Р.^{a,b}, Донбаев М.П.^b, Самаркина Д.А.^b, Семенов В.Э.^a, Гиниятуллин Р.Х.^a,
Резник В.С.^a, Захарова Л.Я.^{a,b}

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

^b Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
Nemez1988@yandex.ru

В рамках данной работы сформированы и количественно охарактеризованы супрамолекулярные системы на основе нового амфифила с пиримидиновым и пиперидиниевыми фрагментами в структуре (рисунок 1, ППАВ) и его бинарной смеси с цетилтриметиламмоний бромидом (ЦТАБ).

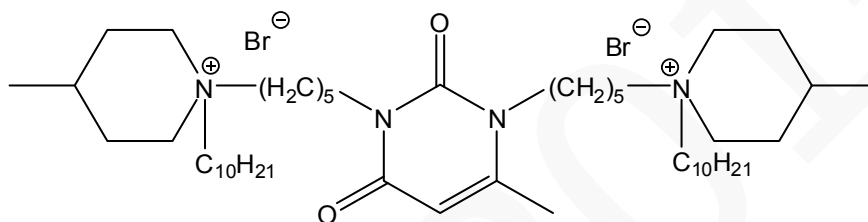


Рисунок 1. Структура пиримидинсодержащего ПАВ (ППАВ).

Методами тензиометрии и флуоресцентной спектроскопии показано трехкратное снижение величины ККМ при переходе от индивидуальных растворов ПАВ (1.8 мМ) к его бинарной смеси с ЦТАБ (0.64 мМ). Для индивидуальных растворов ППАВ установлен концентрационно контролируемый переход от открытой модели агрегации (гидродинамический диаметр агрегатов $D_H = 45$ нм) к закрытой ($D_H = 4$ нм). Методом спектрофотометрии показана выраженная солубилизирующая способность индивидуальных растворов ППАВ и бинарной смеси ППАВ/ЦТАБ по отношению к гидрофобному азокрасителю Оранжевый ОТ. Методами динамического и электрофоретического рассеяния света изучена способность ППАВ к взаимодействию с олигонуклеотидом (ОНu). Показано формирование совместных комплексов между ОНu и ППАВ, средний гидродинамический диаметр которых лежит в диапазоне 300-400 нм. Выявлена высокая способность ППАВ к нейтрализации заряда ОНu – изоэлектрическая точка зафиксирована при мольном соотношении ППАВ/ОНu 0.48. Полученные данные свидетельствуют в пользу того, что данное соединение является перспективным агентом-переносчиком генного материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-03-00709).

ПОВЫШЕННАЯ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ КЛАТРАТОВ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Габдулхаев М.Н.^a, Галялтдинов Ш.Ф.^a, Зиганшин М.А.^a, Губайдуллин А.Т.^b, Вишневецкий С.Г.^c,
Кальченко О.И.^c, Горбачук В.В.^a

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

^b Институт органической и физической химии А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

^c Институт органической химии НАН Украины, Киев, Украина
muhammet.gabdulhayev@mail.ru

Каликсарены часто используются в качестве перспективных материалов для хранения и разделения газов, создания катализаторов и сенсорных систем. Решение большинства этих проблем требует связывания летучих соединений в стабильные клатраты, что не всегда достигается при прямом взаимодействии парообразных «гостей» с выбранным «хозяином». Ранее в нашей исследовательской группе был изучен трет-бутилтиакаликс[4]арен [1], поэтому возник интерес к изучению влияния трет-бутильных заместителей в верхнем ободе тиакаликс[4]арена на свойства его клатратов.

В данной работе были получены термостабильные клатраты тиакаликс[4]арена (**1**), которые не образуются при прямом насыщении «хозяина» «гостем» в бинарных системах, твердофазным замещением «гостя» в клатрате на другой «гость». Полученные данные были сопоставлены с параметрами клатратов трет-бутилтиакаликс[4]арена.

Было обнаружено, что **1** образует клатраты с крупными молекулами, но не образует клатраты с молекулами малых размеров. Замещением пиридина в клатрате с **1** на органические «гости» удалось получить клатраты с молекулами малых размеров, которые не связываются в бинарных системах, такими как метанол, этанол, ацетонитрил, ацетон, дихлорметан, 1,2-дихлорэтан. Клатраты, полученные замещением, более термостабильны по сравнению с клатратами, полученными в бинарных системах и более термостабильны по сравнению с клатратами трет-бутилтиакаликс[4]арена.

Работа выполнялась при поддержке гранта РФФИ № 13-03-90434-Укр-а. Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании ФЦКП физико-химических исследований веществ и материалов КФУ.

1. S.F. Galyaltdinov, M.A. Ziganshin, A.B. Drapailo, V.V. Gorbachuk. J. Phys. Chem. B, 2012, 116, 11379-11385.

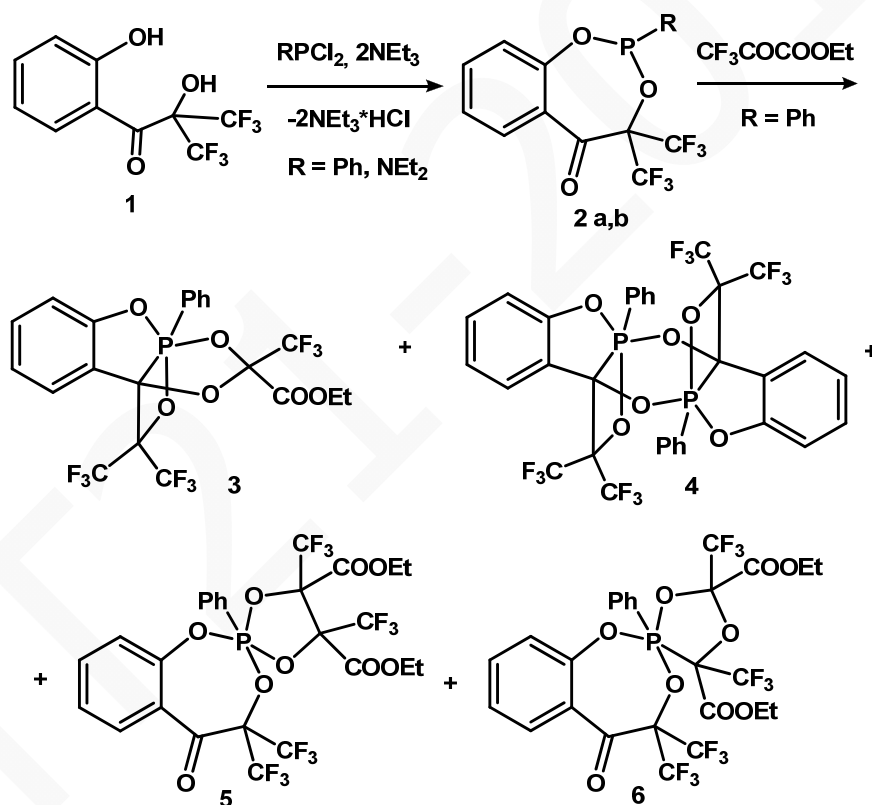
СИНТЕЗ И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА 4,5-ДИГИДРО-4,4-БИС(ТРИФТОРМЕТИЛ)-2,5-ДИОКСО-2-ФЕНИЛБЕНЗО[*d*]-1,3,2-ДИОКСАФОСФЕПИНОВ

Габсатгарова А.Ф.^a, Абилова Г.Р.^a, Миронов В.Ф.^{a,b}, Ивкова Г.А.^a

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

^b Институт органической и физической химии КазНЦ РАН, Казань
ivkova@ksu.ru

Фосфорилированием фторированного гидроксикетона (**1**) получены циклические производные (**2a,b**), в которых атом фосфора включен в семичленный цикл, а в γ - и β -положении к нему расположены активированная карбонильная группа и трифторметильные заместители. Исследована реакция 4,5-дигидро-4,4-бис(трифтор метил)-2,5-диоксо-2-фенилбензо[*d*]-1,3,2-диоксафосфепина (**2a**) с этиловым эфиром трифторпировиноградной кислоты, протекающая с образованием производных пентакоординированного фосфора (**3-6**). Обсуждается возможный маршрут взаимодействия. Строение продуктов установлено с привлечением методов ЯМР, ИКС и РСА. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-03-90419).



ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ И КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ЭПОКСИАНГИДРИДНЫХ СВЯЗУЮЩИХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Гадыева И.И.^a, Хамидуллин О.Л.^{a,b}, Амирова Л.Р.^b

^a КНИТУ им. А.Н.Туполева, Казань

^b Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
inga230193@mail.ru

Для строительной, авиакосмической и ряда других отраслей промышленности актуальной задачей является создание новых составов однокомпонентных эпоксидных композиций, пригодных для применения в качестве покрытий, клеев или связующих композиционных материалов. С целью повышения энергоэффективности и технологичности процесса отверждения таких композиций в них вводят катализаторы. Однокомпонентные эпоксиангидридные композиции на основе известных катализаторов обладают недостаточной жизнеспособностью. В связи с этим большой интерес представляет разработка новых соединений, применяющихся в качестве катализаторов эпоксидных олигомеров.

Ранее были синтезированы соединения, содержащие трифенилфосфониевые фрагменты и разнообразные заместители. Для сравнения был использован промышленный катализатор 2-метилмедазол. В качестве эпоксидных олигомеров была выбрана эпоксидиановая смола ЭД-22. Для отверждения был использован изометилтетрагидрофталевый ангидрид.

Для определения теплостойкости и динамического модуля упругости материалов использовали динамический механический анализатор DMA Q800 фирмы TA Instruments, образцы испытывались на трехточечный изгиб. Также для расчета средней молекулярной массы межузлового расстояния (M_c) были проведены измерения модуля упругости вязкоэластичного состояния в режиме сжатия. Реакцию отверждения исследовали с помощью метода дифференциально-сканирующей калориметрии на DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия). Вязкость и жизнеспособность композиций определяли на реометре HAAKE RheoStress RS6000. Степень конверсии эпоксидных групп находили с помощью ИК-спектроскопии на приборе TENSOR 27 с фурье-преобразованием. Оптимизированы составы и режимы отверждения разработанных композиций.

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.

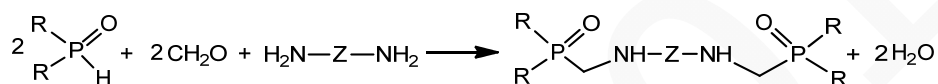
СИНТЕЗ И МЕМБРАННО-ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ АЗАПОДАНДОВ

Гайнуллин А.З., Давлетшин Р.Р., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
aksainaz@mail.ru

Создание и изучение свойств новых органических комплексообразующих соединений, способных избирательно связывать катионы различных металлов и органических веществ, является фундаментальным направлением научных исследований в координационной, элементоорганической и физической химии. Синтетически доступные ациклические аналоги краун-эфиров - поданды, являются весьма перспективными соединениями для использования в качестве компонентов экстракционных систем, трансмембранных переносчиков.

В настоящей работе нами были синтезированы новые фосфорилированные производные азаподандов на основе трехкомпонентной реакции Кабачника-Филдса с участием алифатических диаминов



Где R=C₆H₁₃, C₈H₁₇, Z=(CH₂)₂O(CH₂)₂O(CH₂)₂-, -(CH₂)₃O(CH₂)₂O(CH₂)₃-, -(CH₂)₄-, -CH₂CH(CH₃)(CH₂)₃-, -(CH₂)₆-

Определение констант ионизации в среде водного 2-пропанола показало, что введение электроноакцепторных диалкилфосфорильных групп снижает основность фосфорилированных аминов по сравнению со значениями pK_a аминов-прекурсоров на 3-4 единицы.

Изучение мембранно-транспортных свойств липофильных фосфорилированных азаподандов по отношению к ионам металлов I, II и III групп, а также ионам редкоземельных металлов позволило установить возможность их использования в качестве переносчиков в процессах мембранной экстракции. Высокие значения потоков мембранного переноса редкоземельных металлов предопределяют возможность отделения этих элементов от металлов I и II групп, которые в принятых условиях эксперимента характеризуются гораздо более низкими величинами потока переноса. Найдено, что эффективность мембранного транспорта минеральных кислот данными соединениями определяется величиной энергии гидратации аниона кислоты.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 13-03-90448_Укр_ф_а).

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ СЛОЖНОГО ОКСИДА $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$

Галайда А.П., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург
anastasia.galayda@yandex.ru

Целью данной работы явилось изучение кристаллической структуры и свойств сложного оксида $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$, проведенное в рамках исследования фазовых равновесий в квазитройной системе Sm-Ca-Co-O.

Образец для исследования был приготовлен по глицерин-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при температуре 1100°C на воздухе с последующей закалкой на комнатную температуру. Фазовый состав $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$ был подтвержден рентгенографически. Определение параметров элементарной ячейки проводилось с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда и программного пакета «FullProf 2008».

Согласно рентгенографическим данным, сложный оксид $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$ обладает структурой типа K_2NiF_4 . Кристаллическая структура данного соединения была описана в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $I4/mmm$. Твердых растворов на основе $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$ в системе Sm-Ca-Co-O не образуется. На рисунке 1 приведена модель элементарной ячейки сложного оксида, созданная при помощи программного обеспечения для визуализации кристаллических структур Diamond. В таблице 1 указаны параметры и объем элементарной ячейки $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$, а также координаты атомов.

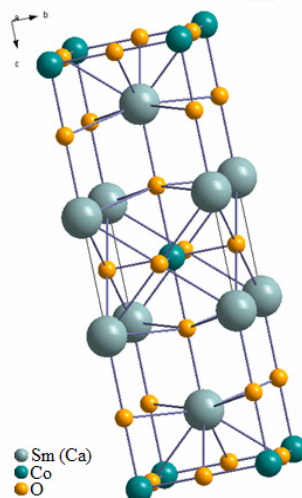


Рисунок 1. Модель элементарной ячейки сложного оксида $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$

Таблица 1. Параметры, объем, позиции атомов элементарной ячейки сложного оксида $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$

	a, Å	b, Å	c, Å	V, Å ³
	3.7153±0.0002	3.7153±0.0002	11.8701±0.0009	163.85
	x (dx)	y (dy)	z (dz)	Occ
Sm	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.3605 (0.0006)	0.0625
Ca	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.3605 (0.0006)	0.0625
Co	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.0625
O1	0.5000 (0)	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.125
O2	0.0000 (0)	0.0000 (0)	0.1659 (0.0037)	0.125

Абсолютная кислородная нестехиометрия сложного оксида $\text{SmCaCoO}_{4\pm\delta}$ была исследована методом дихроматометрического титрования. Установлено, что содержание кислорода в данном оксиде составляет 3.95 ± 0.05 .

СИНТЕЗ ОКСИДНОГО СОЕДИНЕНИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПИРОХЛОРА $Dy_2Ti_2O_7$

Галиев А.А., Гизатуллин А.А., Гильмутдинов И.Ф.

*Институт Физики КФУ, Казань
airat.galiev@gmail.com*

Вещества, проявляющие свойства спинового льда интенсивно исследуются последнее время [1], они проявляют необычные физические свойства, такие как спиновая хиральность. Монокристаллы $Dy_2Ti_2O_7$ являются фрустрированными Изинговскими магнетиками [2]. Магнитные ионы в нем находятся в вершинах трехмерной сетки правильных тетраэдров связанных в трехмерную сеть, и образуют решетку типа пирохлора [3].

В настоящей работе описан новый метод синтеза оксидного соединения со структурой пирохлора $Dy_2Ti_2O_7$ как представителя семейства $RE_2Ti_2O_7$ ($RE =$ редкая земля) и роста из него монокристалла (рисунок 1) методом бестигельной зонной плавки с оптическим нагревом.



Рисунок 1. Выращенный монокристалл $Dy_2Ti_2O_7$.

Проведенный рентгенофазовый анализ на дифрактометре D8 ADVANCE фирмы Bruker подтвердил получение кристаллической фазы $Dy_2Ti_2O_7$ (рисунок 2).

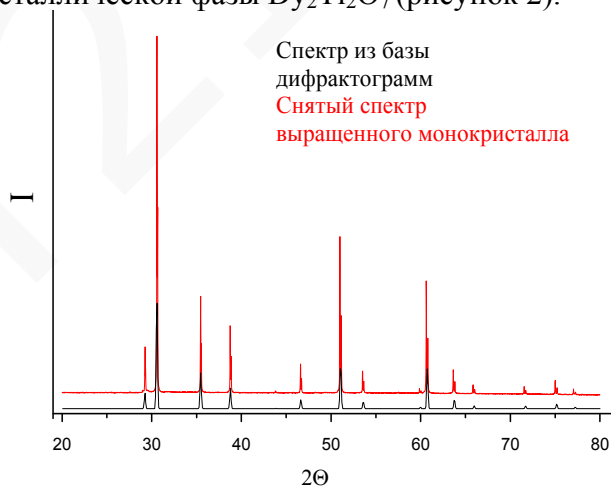


Рисунок 2. Сравнение фаз дифрактограмм.

Ориентирование кристалла с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-2 показало получение монокристалла $Dy_2Ti_2O_7$ высокого качества. В дальнейшем планируется провести изучение магнитных свойств монокристалла $Dy_2Ti_2O_7$.

1. H. Y. Xiao. Advances in Condensed Matter Physics, 2013, 2013, 675410,
2. T. Fennel et al., Phys. Rev. B, 2005, 72, 224411
3. Y. J. Kao et al., Phys. Rev., B, 2003, 68, 172407

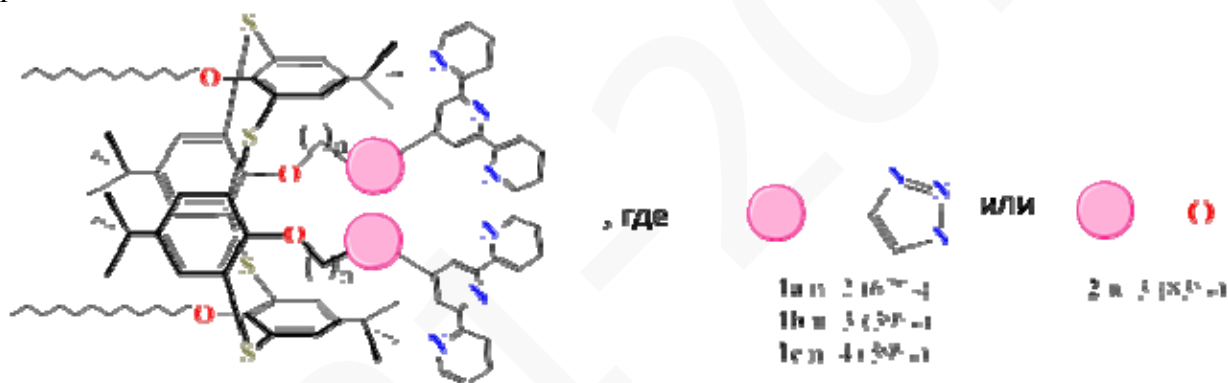
СИНТЕЗ И СТРУКТУРА АМФИФИЛЬНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ТРИАЗОЛЬНЫЕ И ТЕРПИРИДИНОВЫЕ ФРАГМЕНТЫ

Галиева Ф.Б.^a, Муравьев А.А.^b, Стрельник А.Г.^b

^a Химический Институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
kleo-w@mail.ru

Изучение свойств “мягких” поверхностей является актуальной задачей биохимии и медицины. Для ее решения в качестве модели удобно использовать каликсарены, в платформу которых легко ввести гидрофобные и гидрофильные фрагменты. В частности, особый интерес представляет введение терпиридиновых и триазольных групп, которые также имеют центры связывания переходных металлов. В данной работе обсуждается синтез и установление структуры амфифильных молекул на основе тиакаликсаренов в конфигурации *1,3-альтернат*, которые с одной стороны имеют длинноцепные фрагменты в качестве гидрофобной части, а с другой стороны содержат терпиридилные и триазольные фрагменты как центры распознавания субстратов.



Для установления структуры продуктов использовались следующие методы: элементный анализ, ИК-спектроскопия в твердой фазе, MALDI TOF масс-спектрометрия, одно- и двумерная ЯМР-спектроскопия в растворе. Агрегационные свойства изучались с помощью методов: DOSY ЯМР, метод динамического светорассеяния (DLS).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 14-03-31909-мол_а).

КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ СТЕКОЛГалимзянов Б.Н.^{a,b}, Мокшин А.В.^{a,b}^a *Институт физики КФУ, Казань*^b *Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черногловка
bulatgnmail@gmail.com*

В работе исследованы процессы образования кристаллических зародышей в аморфной метастабильной фазе при высоких уровнях переохлаждения. В качестве стеклоформирующих модельных систем рассматривались: однокомпонентная система Джугутова и бинарная смесь Леннард-Джонса с неполными правилами смешивания [1, 2]. Посредством быстрого охлаждения обе системы из жидкой фазы были приведены в стекольное состояние с переохлаждением $S \approx 0.97$. В ходе моделирования молекулярной динамики для повышения скорости фазового перехода при сверхнизких температурах мы применили высокое внешнее давление.

Используя методы кластерного анализа и метод среднего времени первого появления, рассчитана температурная зависимость времени появления самого первого кристаллического зародыша критического размера [3]. Также были получены численные значения скорости пристегивания частиц (атомов, молекул) к кристаллическому зародышу. Нами доказано наличие слабого активационного процесса при глубоких переохлаждениях. Это, прежде всего, подтверждается полученными численными значениями активационного барьера и временем задержки процесса зародышеобразования.

Молекулярно-динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант № 14-02-00335-а).

1. A.V. Mokshin, J.-L. Barrat, Phys. Rev. E, 2010, 82, 021505(1)-021505(9).
2. M. Dzugutov, Phys. Rev. A, 1992, 46, R2984.
3. A.V. Mokshin, B.N.Galimzyanov, J. Phys. Chem. B, 2012, 116, 11959-11967.

ДВУХМЕРНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Галиуллин Н.К., Вазюков А.С., Лысогорский Ю.В.

*Институт физики КФУ, Казань
galiullin.n@list.ru*

В последнее время наблюдается большой интерес к исследованию двумерного электронного газа (ДЭГ), например, в квантовых проволоках, или на поверхности жидкого гелия [1,2]. В таких системах электроны можно рассматривать как кубиты, однако, необходимо научиться манипулировать отдельными электронами, а значит нужно создать электростатические ловушки для них. В работе [1] рассматриваются процессы протекания электронов на поверхности жидкого гелия через узкий канал, которые можно рассматривать как ДЭГ в параболическом ограничивающем потенциале. Одним из интересных свойств ДЭГ является вигнеровская кристаллизация. Компьютерное моделирование, в данном случае, является очень мощным инструментом, так как позволяет детально пронаблюдать и визуализировать движение частиц и их поведение при различных процессах.

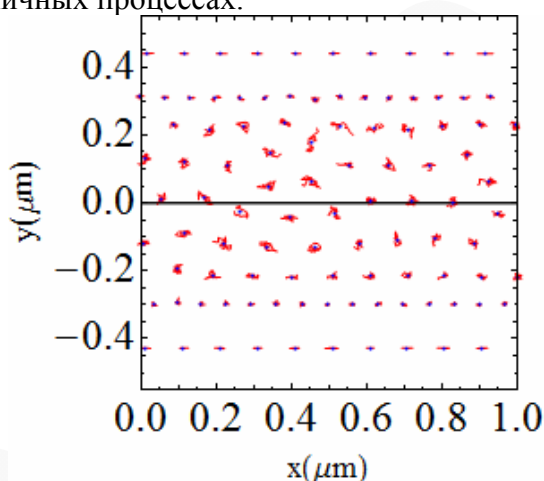


Рисунок 1. Траектории электронов и их средние положения ($N=100$, $T = 1.4$ К).

Для исследования упорядочения двумерной системы электронов в параболическом ограничивающем потенциале был выбран метод Монте-Карло (МК), который был реализован в виде кода на языке C/C++. Для оптимизации процесса поиска глобального минимума энергии системы методом МК, он был расширен путем использования вычислительного метода параллельного темперирования [3]. В результате моделирования было воспроизведено вигнеровское упорядочение электронов на поверхности жидкого гелия в узком канале, получены траектории движения при различных температурах (например, рисунок 1). Также был смитирован процесс плавления вигнеровского кристалла, как квазиодномерного, так и состоящего из нескольких рядов электронов. В дальнейшем планируется детальное исследование движения электронов в крайних рядах вигнеровского кристалла, на границе микроканала, в процессе плавления.

1. J. S. Meyer, K. A. Matveev. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 21, 023203.
2. Y. Z. Kovdya. *Low Temperature Physics*, 2003, 29, 77-104.
3. D. J. Earl, M. W. Deem. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2005, 7, 3910-3916.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ПЛОСКИХ ВОЛН

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

*Институт физики КФУ, Казань
adel-garifullin@mail.ru*

Фотонные кристаллы (ФК) – упорядоченные структуры, период которых сравним с длиной волны оптического диапазона [1-2]. Интерес к фотонным кристаллам обусловлен широкой перспективой их использования. Возможным применением фотонных кристаллов является их использование в волоконной оптике, в создании источников света с высоким КПД, электрооптических или полностью оптических интегральных схем, низкопороговых лазеров и т.д.. Такой широкий спектр приложений фотонных кристаллов обязан наличию в них так называемой фотонной запрещенной зоны – спектральной области, в пределах которой распространение света в фотонном кристалле подавлено во всех или в некоторых избранных направлениях.

Однако, помимо интереса к фотонным кристаллам с практической точки зрения, существует интерес к их изучению для понимания таких важных свойств, как возможность управления частотой спонтанного излучения и скоростью его испускания, и даже для управления массой электрона [3]. Для изучения этих квантовоэлектродинамических явлений требуется знание структуры поля. В данной работе эта проблема исследуется с помощью системы уравнений Максвелла и периодических граничных условий. Начиная анализ с одномерного случая, было получено графическое представление изменений компонент блоховских функций в зависимости от волнового вектора, а также соответствующие зонные диаграммы. Использование этих результатов позволит следить за распределением энергии фотона по различным компонентам для разных состояний, что может быть необходимо для теоретических расчетов.

1. V.N. Astratov, V.N. Bogomolov, A.A. Kaplyanskii, A.V. Prokofiev, L.A. Samoilovich, S.M. Samoilovich, Yu.A. Vlasov. *Nuovo Cimento D*, 1995, 17, 1349.
2. S. John. *Phys. Rev. Lett*, 1987, 58, 2486.
3. R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev, M.Kh. Salakhov. *Phys. Rev. A*, 2012, 85, 053836(1-7).

3-(ДИФЕНИЛФОСФИНО)ПРОПИОНОВАЯ КИСЛОТА В РЕАКЦИЯХ С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ

Гарифуллина Ю.Р., Миннуллин Р.Р., Бахтиярова Ю.В.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
garifullinay@mail.ru

3-(Дифенилфосфино)пропионовая кислота, интересна тем, что содержит в себе, помимо третичного атома фосфора, еще и карбоксильную группу. Следовательно, можно предположить, что данная фосфиновая кислота в ходе реакции с непредельными карбоновыми кислотами может выступать как протонодонор.

В качестве непредельных кислот были выбраны: монокрбоновые - акриловая, кротоновая, коричная; дикарбоновые – малеиновая, фумаровая, итаконовая.

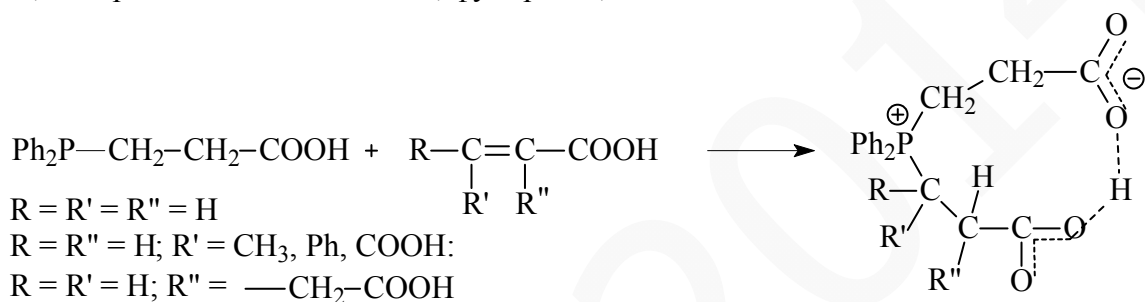


Таблица 1. Характеристика полученных фосфобетаинов на основе 3-(дифенилфосфино)пропионовой и непредельных карбоновых кислот.

кислоты	ИК, ν cm^{-1} COO ⁻ , COOH	ЯМР ¹¹ P, м.д.п.	Тпл., °С
CH ₂ =CH-COOH	1680	28.4	221
CH ₃ -CH=CH-COOH	1630, 1710	35	120
Ph-CH=CH-COOH	1590, 1700	31.2	193
<i>цис</i> - HOOC-HC=CH-COOH	1560, 1690	28.7	80
<i>транс</i> - HOOC-HC=CH-COOH	1690	28.8	217.5
H ₂ C=C(COOH)H-CH ₂ -COOH	1700	27	122

Реакции протекают легко, при комнатной температуре, с образованием кристаллических продуктов. Строение полученных продуктов доказано комплексом спектральных методов. Состав, образующихся ди- и трикарбоксилатных фосфобетаинов доказан элементным анализом.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С ОКСИЭТИЛИРОВАННЫМИ АЛКИЛФЕНОЛАМИ В ВОДНЫХ СРЕДАХ

Гатауллин А.Р., Кузнецов К.В., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
zulfat.azari@yandex.ru*

Углеродные наноструктуры (нанотрубки, фуллерены, графен), будучи новыми наноматериалами с уникальными физико-механическими, электрическими, оптическими свойствами привлекают внимание широкого круга исследователей. Одной из серьезных проблем в реализации полезных свойств углеродных наночастиц является их агрегированное состояние в органических и водных средах. При получении полимерных нанокомпозитов, это препятствует равномерному высокодисперсному распределению наномодификатора в объеме полимерной матрицы. В качестве диспергирующих и стабилизирующих агентов перспективно использование неионных поверхностно-активных веществ, применяемых в процессах получения и переработки полимеров. В связи с этим, целью данной работы было исследование водных дисперсий углеродных нанотрубок (УНТ) и фуллеренов C_{60} в присутствии неионных ПАВ для получения коллоидных систем с оптимальными свойствами.

В работе в качестве ПАВ использовались оксиэтилированные алкилфенолы (Неонолы АФ) с варьируемой средней степенью оксиэтилирования (n). Интенсивность диспергирования, структура и размеры частиц дисперсий, полученных методом ультразвуковой обработки, оценивались методами тензиометрии, абсорбционной спектроскопии, конфокальной микроскопии, динамического и электрофоретического рассеяния света. Показано, что введение ПАВ в оптимальных концентрациях приводит к снижению размера частиц и полидисперсности, а также увеличению стабильности коллоидной системы. Наиболее эффективным диспергатором и стабилизатором углеродных наноструктур для водных систем является оксиэтилированный алкилфенол со средней степенью оксиэтилирования $n=8$, что может быть связано с конформацией оксиэтиленовой цепи в молекулах ПАВ.

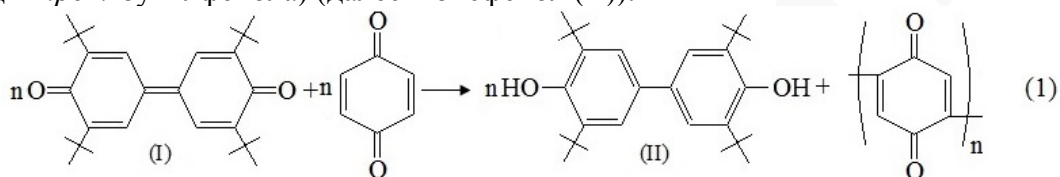
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта компании ОПТЭК.

РЕАКЦИЯ СИНТЕЗА РЕДОКС-АКТИВНОГО ПОЛИМЕРА – ПОЛИБЕНЗОХИНОНА И ФЕНОЛЬНОГО АНТИОКСИДАНТА – 4,4'-БИС(2,6-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛФЕНОЛА)

Гатиятуллин Д.Р., Нигматуллин Т.Ф., Ахмадуллин Р.М., Мукменева Н.А.

Институт полимеров, КНИТУ (КХТИ), Казань, РФ
gatiyatullin@mail.ru

Особое внимание в последнее время приобретают работы, посвященные синтезу и изучению редокс-активных полимеров, обладающих электрическими и оптическими свойствами и, как следствие, возможностью их широкого практического использования. В данной работе предложен новый подход: синтез полибензохинона окислительной полимеризацией 1,4-бензохинона в присутствии дегидрирующего агента – 3,3',5,5'-тетра-*трет*-бутил-4,4'-дифенохинона (далее дифенохинон (I)) [1], который в процессе реакции (1) восстанавливается до 4,4'-бис(2,6-ди-*трет*-бутилфенола) (далее – бисфенол (II)):



Используемый в экспериментах дифенохинон (I), синтезирован по методике описанной в работах [2,3]. Способ проведения реакции (1) и анализы, подтверждающие образование полимера, описаны в работе [4].

Практический интерес к этой реакции, на ряду с синтезом полимера, связан с бисфенолом (II), известным в литературе в качестве эффективного фенольного антиоксиданта для стабилизации каучуков [5], полиолефинов [6], дизельного топлива [7].

1. Л.К. Фазлиева, автореф. дисс. канд. хим. наук, Казань, 2000, 16 с.
2. R.M. Akhmadullin, et al., Res. J. Pharm. Bio. Chem. Sci, 2014, 5(6), 494-502.
3. Р.М. Ахмадуллин, и др., Вестник Казанского Технологического. Университета, 2014, 17, 2, 23-26.
4. Р.М. Ахмадуллин, и др., Вестник Казанского Технологического. Университета, 2014, 17, 6, 160-163.
5. R.M. Akhmadullin, et al., Int. Polymer Science and Technology, 2007, 34, 1, 41-44.
6. E.L. Shanina, et al., J. Appl. Polym. Sci., 2003, 87, 2226–2229.
7. Д.И. Бежан: автореф. дисс. канд. хим. наук, Уфа, 2002, 24 с.

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИСУЛЬФОНОВ

Гаянова А.З.^a, Булатова Г.Г.^{a,b}, Амирова Л.М.^{a,b}

^a КНИТУ им. А.Н.Туполева, Казань

^b Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
las994@mail.ru

Полисульфоны благодаря их высокой химической стойкости, тепло- и термостойкости, низкому водопоглощению, устойчивости к различным видам излучения (УФ-, гамма-, рентгеновского), формоустойчивости, хорошим электроизоляционным свойствам, низкой горючести находят применение в различных областях: электронике, аэрокосмической промышленности, медицине. Однако свойства композиций на их основе, особенно реологические свойства дисперснонаполненных композиций недостаточно изучены.

Целью данной работы являлось исследование тепло-физических и реологических свойств различных полисульфонов и композиций на их основе. В качестве объекта исследования использовались следующие марки полиэфирсульфонов – Ultrason E 3010, Ultrason P 3010, Ultrason E 2020 и полисульфон Ultrason S с M_n 26000 (BASF). В качестве наполнителей использовались графиты и дисульфид молибдена

Изучение теплофизических свойств проводили с использованием дифференциального сканирующего калориметра DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия), термомеханические свойства контролировали с помощью динамического механического анализатора DMA Q800 (TA Instruments), реологические свойства исследовали на реометре RheoStress RS6000 (HAAKE).

На основании полученных данных построены зависимости температуры стеклования и текучести от содержания наполнителей. Выявлено влияние природы наполнителя и его дисперсности на характер полученных зависимостей.

Изучены реологические свойства расплавов композиций, показана зависимость характера кривых вязкость-скорость сдвига от природы полимера, наполнителя, степени наполнения и дисперсности наполнителя. На основании реологических данных проведена оптимизация технологических режимов получения изделий из наполненных композиций методом литья и экструзии. Изучены свойства разрабатываемых композиций. Предложены составы с оптимальными технологическими и эксплуатационными свойствами.

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.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН В ПРИСУТСТВИИ ПРОТЕГРИНОВ МЕТОДОМ ^{31}P И ^2H ЯМР

Гибайдуллин А.Н., Рудакова М.А.

*Институт физики КФУ, Казань
amalgiba@gmail.com*

Изучение физических аспектов взаимодействия Протегринов, как представителя класса антимикробных пептидов (АМП), с липидными мембранами связано с необходимостью понимания деталей неспецифического липид-пептидного взаимодействия, лежащего в основе действия АМП на мембраны бактерий, грибов и т.д. Предполагается, что именно этот механизм действия АМП обуславливает их антибактериальную, противогрибковую и противовирусную активность [1,2], благодаря которой АМП рассматриваются как класс новых антибиотиков естественного происхождения с отсутствием эффекта выработки резистентности бактерий.

В данной работе при помощи методов ^{31}P и ^2H ЯМР спектроскопии исследуется влияние Протегринов на фазовое состояние и упорядоченность липидных мембран на примере суспензии липосом димистоилфосфотидилхолина и 54d - димистоилфосфотидилхолина. Отметим, что в работе исследуются два типа пептидов – Протегрин I и II, которые имеют отличие в первичной последовательности (Протегрин I состоит из 18 аминокислот, а Протегрин II - из 16, на одном из концов аналогичного набора отсутствуют 2 компонента).

В работе предпринята попытка оценить влияние различий в структуре АМП на характер его взаимодействия с липидной мембраной в условиях варьирования температуры и концентрации пептидов в системе.

1. Papagianni, M. Ribosomally synthesized peptides with antimicrobial properties: biosynthesis, structure, function, and applications// Biotechnol Adv. - 2003. - 21 (6). – P. 465–499.
2. Yount NY, Yeaman MR. Immunocontinuum: perspectives in antimicrobial peptide mechanisms of action and resistance// Protein Pept Lett. – 2005. – 12. – P. 49-67.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАТИВНЫХ ОБРАЗЦОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА ПРИ ДОБАВЛЕНИИ ИОНОВ ХЛОРИДА ЦЕЗИЯ

Гибизова В.В., Шленская А.В., Сергеева И.А., Петрова Г.П.

*Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
gibizova@physics.msu.ru*

В современном мире идет интенсивная разработка методов диагностики различных заболеваний, в частности, связанных с сывороткой крови человека и ее составляющими. Существует несколько способов исследования сыворотки крови такие, как биохимический, клинический, общий анализы крови и т.д. В данной работе объектом исследования явилась сыворотка крови человека (онкологически больных пациентов и пациентов, прошедших лечение) при добавлении ионов цезия. Клинические испытания показали, что хлорид цезия может быть эффективным противоопухолевым средством при комплексной терапии некоторых форм рака, а также при нейродегенеративных заболеваниях [1]. Все эксперименты были выполнены методом фотонно-корреляционной спектроскопии на установке "Photocor-Complex" [2], результаты были обработаны методом статического рассеяния света. Этот метод дает возможность прямого определения молекулярной массы M и второго вириального коэффициента B , для чего надо измерить коэффициент рассеяния R_{90} при нескольких концентрациях и экстраполировать полученную зависимость к $c=0$.

В ходе работы был определен наклон концентрационной зависимости параметра рассеяния cH/R_{90} для онкологических больных пациентов и пациентов, прошедших лечение.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке альтернативных методов диагностики и лечения онкологических заболеваний на ранних стадиях. Образцы были предоставлены Федеральным научно-клиническим центром детской гематологии, онкологии и иммунологии (ФНКЦ ДГОИ).

1. J.C. Low, K.M. Wasan, L. Fazli, A. Eberding, H. Adomat, E.S. Guns. J. Cancer Chemother Pharmacology, 2007, 6, 821-829.
2. <http://www.photocor.ru/dls-instrument/>

СИНТЕЗ КРИСТАЛЛОВ НАТРИЕВЫХ КОБАЛЬТАТОВ Na_xCoO_2 с $x = 0.5-0.8$

Гильмутдинов И.Ф., Мухамедшин И.Р.

Институт физики КФУ, Казань
 ildar.gilmutdinov@gmail.com

Натриевые кобальтаты Na_xCoO_2 привлекают интерес благодаря большому коэффициенту термо-ЭДС[1], сверхпроводимости и эффектам, связанным с сильными электронными корреляциями[2].

Для роста кристаллов натриевого кобальтата Na_xCoO_2 с $x > 0.75$ использовался метод зонной плавки с оптическим нагревом (рис. 1а). Процедура роста подробно описана в работе [3]. Образцы с меньшим содержанием натрия были получены электрохимическим методом. Для этих целей был разработан цифровой потенциостат/гальваностат и собрана электрохимическая ячейка. На рис. 1в приведен участок дифрактограммы, соответствующий рефлексу [008], для образцов Na_xCoO_2 с содержанием натрия $x=0.5, 0.66, 0.77$, подтверждающий, что полученные образцы не содержат примеси сторонних фаз.

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

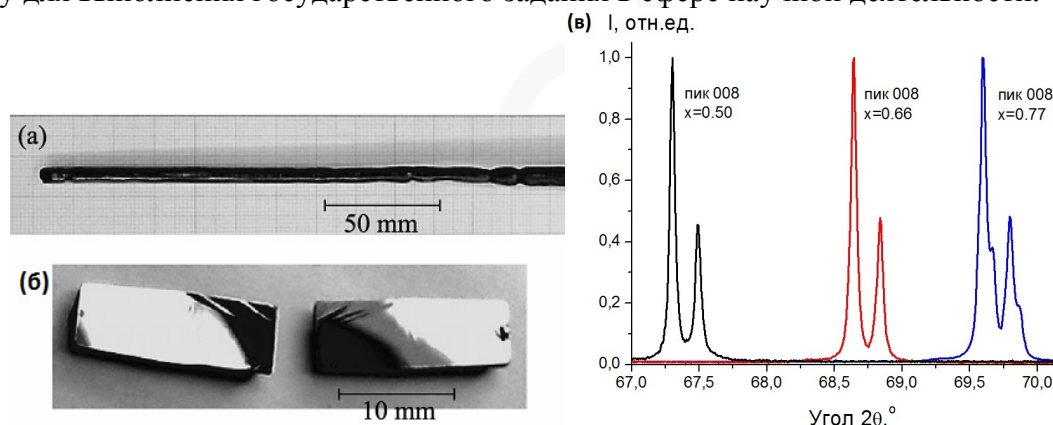


Рисунок 1. а) фотография выращенного кристалла $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$; б) скол кристалла $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$ вдоль плоскости спайности ab ; в) дифрактограмма кристаллов Na_xCoO_2 с различным содержанием натрия.

1. I. Terasaki, Y. Sasago, K. Uchinokura. Phys.Rev. B, 1997, 56, R12685–R12687.
2. Takada K. et al. Nature, 2003, 422, 53–55.
3. И.Р. Мухамедшин, И.Ф. Гильмутдинов, М.А. Салосин, А. Аллул. Письма в ЖЭТФ, 2014, 99, 542-546.

ДИНАМИКА АП-КОНВЕРСИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ЗАСЕЛЕНИЯ И РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В КРИСТАЛЛЕ $\text{LiYF}_4:\text{Yb}^{3+}:\text{Tm}^{3+}$

Гориев О.Г., Казаков Б.Н., Семашко В.В., Кораблева С.Л.

Институт физики КФУ, Казань
goriev.o.g@gmail.com

В настоящей работе исследуется динамика ап-конверсионного заселения высоковозбужденных электронных состояний ионов Tm^{3+} в кристалле $\text{LiYF}_4:\text{Yb}^{3+}(20\%):\text{Tm}^{3+}(1\%)$ при воздействии излучением инфракрасного лазерного диода в области полос поглощения ионов Yb^{3+} ($\lambda_{\text{возб}} = 935 \text{ нм}$). Исследованы зависимости спектров и кинетики люминесценции ионов Tm^{3+} в данной матрице при различных условиях импульсного периодического возбуждения. Показано, что варьируя плотность мощности возбуждения, длительность и период следования импульсов возбуждения удастся существенно изменять как вид спектров апконверсионной люминесценции, так и временные ее зависимости (рисунок 1).

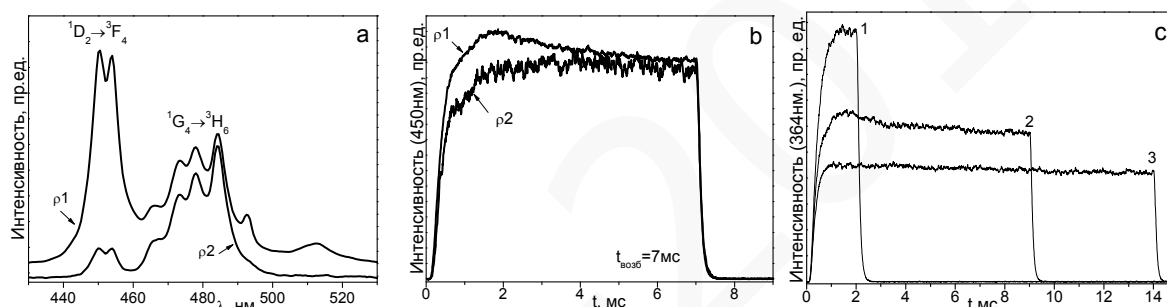


Рисунок 1. Спектр (а) и кинетика (б) люминесценции ионов Tm^{3+} в $\text{LiYF}_4:\text{Yb}^{3+}(20\%):\text{Tm}^{3+}(1\%)$ при высокой $p_1 \approx 5000 \text{ Вт/см}^2$ и низкой $p_2 \approx 90 \text{ Вт/см}^2$ поверхностной плотности энергии возбуждения; кинетика (с) люминесценции при различных значениях длительности импульсов $t_{\text{возб}} = 2 \text{ мс}$. (1); 9 мс . (2); 14 мс . (3) и $p_1 \approx 5000 \text{ Вт/см}^2$. ИК ЛЕД $\lambda_{\text{возб}} = 935 \text{ нм}$.; 300 К

Обсуждается возможность использования различных сочетаний параметров накачки для управления процессами заселения заданных энергетических состояний и достижения высоких значений их населенности. Приводятся результаты моделирования наблюдаемых процессов. Дискутируются отличия спектрально-кинетических характеристик при ап-конверсионном импульсно-периодическом возбуждении лазерными импульсами микро- и миллисекундных диапазонов длительностей и при возбуждении наносекундными импульсами [1].

1. А.М. Tkachuk, I.K. Razumova, M.-F. Joubert, R.Moncorge. Proc. SPIE, 1998, 3682.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛА $\text{Ce}^{3+}, \text{Pr}^{3+}:\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4$ В КАЧЕСТВЕ ПЕРСПЕКТИВНОЙ АКТИВНОЙ СРЕДЫ ЛАЗЕРА УФ ДИАПАЗОНА

Гориева В.Г., Семашко В.В., Кораблева С.Л., Марисов М.А., Павлов В.В.

*Институт физики КФУ, Казань
ekorre_v@mail.ru*

В настоящее время перестраиваемые по частоте твердотельные оптические квантовые генераторы (ОКГ, лазеры) УФ диапазона наиболее просто реализуются с использованием в качестве рабочих лазерных переходов межконфигурационных $4f^{n-1} 5d - 4f^n$ переходов редкоземельных ионов. При этом накачка таких ОКГ осуществляется УФ излучением гармоник серийных лазеров, работающих в видимом и инфракрасном (ИК) диапазоне, либо излучением мощных эксимерных лазеров. Однако, использование УФ накачки индуцирует в твердотельных активных элементах фотодинамические процессы (ФДП), которые обуславливают деградацию оптических свойств активных сред. Одним из способов, позволяющим избежать или значительно уменьшить вредное проявление ФДП, является использование апконверсионной накачки [1]. Поиск путей такого способа создания инверсной населенности также актуален и с точки зрения реализации эффективной накачки твердотельных УФ активных сред с использованием излучения полупроводниковых лазеров и создания компактных цельнотвердотельных устройств квантовой электроники УФ диапазона.

В настоящей работе исследуется возможность создания инверсной населенности между состояниями 5d- и 4f-конфигураций иона Ce^{3+} путем ступенчатого апконверсионного возбуждения состояний 4f5d-конфигурации ионов Pr^{3+} с последующей передачей энергии возбуждения от иона Pr^{3+} к иону Ce^{3+} . В качестве объекта исследований выбран кристалл $\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4:\text{Ce}^{3+}, \text{Pr}^{3+}$. В работе были определены абсолютные концентрации ионов Ce^{3+} и Pr^{3+} в кристаллах $\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4:\text{Ce}^{3+}, \text{Pr}^{3+}$, оценен коэффициент передачи энергии возбуждения от ионов Pr^{3+} к ионам Ce^{3+} , а также такие параметры, как сечения поглощения энергии накачки с возбужденного 4f5d состояния ионов Pr^{3+} в зону проводимости и с основного состояния ионов Ce^{3+} на возбужденное 5d состояние на длине волны 266 нм. Результаты проведенных исследований «накачка-зондирование» свидетельствуют о перспективности апконверсионной накачки для реализации кристаллических УФ лазеров на базе кристаллов $\text{LiY}_{0.3}\text{Lu}_{0.7}\text{F}_4:\text{Ce}^{3+}, \text{Pr}^{3+}$.

1. V.V. Semashko, M. F. Joubert, E. Descroix E, et.al. Proc. of SPIE, 2000, 4061, 306-316.

ОБРАТНООСМОТИЧЕСКОЕ ОБЕССОЛИВАНИЕ МИНЕРАЛИЗОВАННЫХ ШАХТНЫХ ВОД

Гомеля Н.Д., Трус И.Н., Грабитченко В.Н., Глушко Е.В.

*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
Киев, Украина
shymasya@mail.ru*

Засоление поверхностных и подземных источников является важной проблемой в настоящее время, что связано с возрастающими объемами сбрасывания минерализованных сточных вод, в том числе и шахтных. Проблема опреснения воды актуальна для многих регионов, особенно промышленных, это связано с природными и антропогенными факторами. Из известных методов опреснения наиболее энергосберегающим, экологически и экономически выгодным, является обратный осмос [1, 2]. Применение данных технологий позволит не только уменьшить объемы сбрасываемых минерализованных шахтных вод, но и будет способствовать улучшению качества подземных и грунтовых вод. При применении баромембранных процессов достаточно остро стоит проблема стабилизационной обработки воды для предотвращения осадкообразования на мембранах. Согласно литературным данным водопроводная вода, которая подается на баромембранные установки – обратноосмотические и нанофильтрационные, должна иметь мутность до $0,5 \text{ мг/дм}^3$ и цветность до 20 град. Но даже при остаточной мутности воды $0,5 \text{ мг/дм}^3$ происходит снижение производительности мембран, что уменьшает срок их эксплуатации. Поэтому целью работы было изучения влияния предварительной очистки на производительность и селективность мембраны. В работе было установлено, что предварительная доочистка способствует повышению продуктивности обратноосмотической мембраны и практически не влияет на селективность по хлоридам, сульфатам, ионам жесткости и гидрокарбонатам.

1. А.Г. Первов, Ю.В.Резцов, В.С. Коптев, С.Б. Милованов. Мембранная технология в подготовке питьевой воды. Водоснабжение и санитарная техника, 1995, 2, 28-33.
2. С.С. Духин, Н.В. Чураев, А.Э. Ярошук. Обратный осмос и диэлектрические свойства мембран. Химия и технология воды, 1984, 4, 291-304.

МИКРОПОРИСТЫЕ ПОЛИМЕРЫ В КАЧЕСТВЕ ПОДЛОЖКИ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОБЪЕКТОВ

Гребенщикова Е.С.^a, Давлетбаева И.М.^{a,b}, Зарипов И.И.^b, Давлетбаев Р.С.^c

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

^b Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^c Казанский национальный исследовательский технический университет, Казань
jewelery_77@mail.ru

Разработка и исследование микропористых полимеров является перспективным направлением как для фундаментальных исследований, так и для практического применения в качестве матрицы для оптических химических сенсоров, ионных жидкостей с протонной проводимостью и других функциональных молекулярных объектов. Наиболее перспективными являются исследования композиционных материалов на основе микропористых полимеров и ионных жидкостей в качестве высокоселективных газоразделительных мембран. Поиск новых газоразделительных полимерных мембран, обладающих улучшенными характеристиками по газопроницаемости и селективности, хорошими механическими и ресурсными свойствами является актуальной задачей для конкретных областей использования. Кроме того, сочетание полупроводниковых свойств с высокими механическими характеристиками и способностью сорбировать и удерживать гликоли делает такие микропористые полимеры перспективными для создания антистатических антиобледенительных покрытий для легких воздушных судов. В работе были получены ассоциированные в олигомерной среде кластеры кремнезема и использованы для модификации полимеров, проявляющих способность к микрофазовому разделению. Особенностью синтеза ассоциированных кластеров кремнезема является использование тетраэтоксисилана и термодинамически несовместимых олигомеров. В результате кремнезем, находясь в окружении различающихся по своей природе олигомеров, формирует ассоциаты калий-силоксанолятных групп на границе раздела фаз, проявляет низкую степень агрегации и благодаря лабильности ассоциативных связей и растворимость в различных средах. Благодаря выраженной способности к понижению поверхностного натяжения полимеробразующих систем органозамещенные кремнеземы оказывают значительное влияние на процессы микрофазового разделения в случае блок-сополимеров, составляющими которых являются амфифильные блок-сополимеры оксида этилена и оксида пропилена, полиизоцианураты и полидиметилсилоксаны, формируемые в процессе синтеза. Под воздействием кластеров кремнезема надмолекулярная структура таких полимеров формируется по типу ядро-оболочка. Изменение содержания органозамещенных кремнезёмов и особенностей его получения является путем направленного изменения соотношения диаметра жесткого ядра и гибкой оболочки. Важное значение здесь приобретает молекулярная масса и химическое строение гибкоцепной составляющей. Особенностью формирующихся при этом полимеров является значительное изменение их электрофизических свойств и сорбционной активности микропор в зависимости от толщины гибкоцепной оболочки.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ

ПРИМЕНЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В СОСТАВЕ ВОДНЫХ ДИСПЕРСИЙ ПОЛИМЕРОВ

Катнов В.Е., Катнова Р.Р., Гришин П.В.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
PVGrishin@live.ru*

Как известно, покрытия, получаемые из полимерных дисперсий на водной основе, существенно уступают по эксплуатационным характеристикам аналогичным органическим растворимым материалам, в связи с чем, не смотря на свою экологическую безопасность, зачастую оказываются менее предпочтительными к применению. Поэтому работы по совершенствованию таких материалов весьма актуальны.

Одним из путей улучшения лаковых материалов на водной основе является применение в составе наноразмерных наполнителей, содержание которых, как показано в ряде работ [1-4], до определенных значений позволяет повысить стойкость покрытий (Пк) на их основе к физико-механическим воздействиям без потери прозрачности. Введение нанодисперсной фазы в состав прозрачной среды не способствует ее помутнению, что связано со способностью видимого света огибать частицы с размером меньше длины его полуволны [5].

В ходе проведенных работ было исследовано влияние нанодисперсного наполнителя на основе диоксида кремния (SiO_2), полученного двумя разными методами, со средними размерами частиц 20-30 нм, на эксплуатационные и оптические свойства полимерных покрытий. Наночастицы (НЧ) SiO_2 были получены газофазным (ГФМ) [2,6] и золь-гель (ЗГМ) [7,8] методами в форме наносuspensions.

Результаты экспериментов показали, что использование в качестве наполнителя SiO_2 ГФМ, до определенного его содержания приводит к улучшению физико-механических характеристик полимерных Пк. В ряде последующих работ [6,7] было исследовано влияние модифицирования поверхности НЧ SiO_2 на свойства наполняемых им материалов. Исследования показали, что полимерные материалы имеют области оптимальных концентраций НЧ SiO_2 , при которых достигается существенное (в 2 раза) улучшение эксплуатационных характеристик без изменения их оптических свойств.

Таким образом, способ получения наночастиц влияет на свойства наполняемых им покрытий, а предварительная поверхностная модификация наночастиц позволяет увеличить степень сродства полимерной матрицы с неорганическими наночастицами.

1. В.Е. Катнов, С.Н. Степин, Катнова, Р.Р. Мингалиева, П.В. Гришин, Вестник Казанского технологического университета, 15, 7, 95-96 (2012);
2. П.В. Гришин, В.Е. Катнов, Р.Р. Катнова, В сб. Перспективное развитие науки, техники и технологий, 2013, 1, 342-346;
3. М.С. Петровнина, П.В. Гришин, В.Е. Катнов, В сб. Перспективное развитие науки, техники и технологий, 2013, 3, 70-74;
4. G. Michael, ЛКМ и их применение, 2007, 6, 42-47;
5. В.Е. Катнов, С.Н. Степин, Вестник Казанского технологического университета, 2010, 6, 275-279;
6. Гришин П.В., Вестник Казанского технологического университета, 2014, 17, с. 239, 335;
7. Гришин П.В., Баранский М.В., Катнова Р.Р. Материалы XIV Российской конф. РКТС- 14, 2014, 2, 300-304.
8. Н.А. Шабанова, Химия и технология нанодисперсных оксидов. ИКЦ «Академкнига», Москва, 2006. 309с.

РЕЦЕПТОРНЫЕ СВОЙСТВА И МОРФОЛОГИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОЛИГОПЕПТИДОВ

Губина Н.С.^a, Зиганшин М.А.^a, Герасимов А.В.^a, Горбачук В.В.^a, Зиганшина С.А.^b, Бухараев А.А.^b

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

^b *Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН, Казань
nadia.23@bk.ru*

В настоящее время ведется активный поиск супрамолекулярных рецепторов, способных к самоорганизации с образованием высокоупорядоченных структур, которые могут быть использованы для распознавания и хранения газов, разделения энантиомеров и биологически активных соединений, при разработке новых нетоксичных и биосовместимых материалов для решения проблем медицины, био- и нанотехнологии. Перспективными объектами для этих задач являются короткоцепные олигопептиды, образующие различные наноструктурированные материалы.

В работе были изучены термическая стабильность ряда короткоцепных олигопептидов (пяти дипептидов и одного трипептида), а также составы их клатратов с водой или органическим гостем с помощью совмещенного метода термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии с масс-спектрометрическим анализом уходящих газов. Для исследования рецепторных свойств олигопептидов, находящихся в тонких пленках по отношению к парообразным органическим соединениям, было использовано сенсорное устройство типа кварцевых микровесов на основе пьезоэлектрических резонаторов. Морфология тонких пленок олигопептидов исследовалась с помощью сканирующего зондового микроскопа в полуконтактном режиме.

В результате исследования было установлено, что для изученных олигопептидов в общем случае наблюдается уменьшение сорбционной емкости с увеличением размера молекул «гостей». Были определены интервалы термической стабильности олигопептидов. Показано, что для олигопептидов, содержащих остаток фенилаланина, при нагревании возможны химические реакции. Было установлено, что в результате взаимодействия некоторых парообразных соединений с тонкими пленками олигопептидов происходит изменение их морфологии с образованием микро- и наноструктур различной формы и размеров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №12-03-00590-а.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛЕТУЧИХ ИНГИБИТОРОВ АТМОСФЕРНОЙ КОРРОЗИИ

Гулян Р.И., Гулян А.А., Воробьева В.И., Чигиринец Е.Э.

*Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, Украина
romwin@ukr.net*

На сегодняшний день наиболее технологичным и экономически выгодным средством временной противокоррозионной защиты во время хранения и транспортировки является использование летучих ингибиторов атмосферной коррозии (ЛИАК). В настоящее время приоритетными являются научные исследования по разработке эффективных технологий комплексной переработки отходов производства, которые позволяют наиболее полно использовать исходное сырье с получением химических продуктов, избегая при этом накопления и попадания вредных веществ в окружающую среду. Перспективным сырьем для получения ингибиторов коррозии являются многотоннажные отходы сельского хозяйства, в первую очередь те, которые концентрируются на перерабатывающих предприятиях [1]. Для создания новых ЛИК в Украине наибольший интерес представляет такая техническая культура как рапс, поскольку после его переработки количество отходов составляет сотни тонн. Поэтому целью работы явилось исследование ингибирующей эффективности экстрактов шрота рапса в качестве летучих ингибиторов атмосферной коррозии.

Установлено, что экстракт шрота рапса обеспечивает высокую противокоррозионную защиту стали в качестве ЛИАК в условиях периодической конденсации влаги в течение 21 суток (~90 %). В результате проведенных электрохимических исследований показано, что пленка, образованная на поверхности стали из паровой фазы, влияет в большей степени на кинетику протекания катодной поляризационной кривой. Показано, что пленка образуемая на поверхности металла обеспечивает эффект защитного последствия в условиях периодической конденсации влаги растворов 1 н Na₂SO₄ и 3 % NaCl, что указывает на ее хемосорбционную природу. Исследование состава изопропанольного экстракта шрота рапса показало, что в нем содержится около 20 индивидуальных компонентов, среди которых доминируют гликозиды (сахароза, гуанозин, ксантонозин), сиреневый альдегид, кетон – 3,5-диметоксиацетофенон, стероиды (β и γ-ситостерол, кампестерол и др.), а также насыщенные и ненасыщенные жирные кислоты, представленные пальмитиновой, олеиновой, линолевой кислотами.

1. О.Е. Чигиринець, В.І. Воробйова. Дослідження протикорозійної ефективності рослинних екстрактів // Наукові вісті «КПІ». - 2010.- №6.- С.152-156.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ СТЕАРАТА КАЛЬЦИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ

Момзяков А.А., Дебердеев Р.Я., Дебердеев Т.Р., Мукменева Н.А., Киселев А.В.

*ФГБОУ ВПО «Казанский научный исследовательский технологический университет», Казань
alex-m-v@yandex.ru; deberdeev@mail.ru*

Резюме. Несмотря на расширение областей применения и растущие потребности рынка, наличие сырьевой базы в России нет производства стеарата кальция, все потребности рынка удовлетворяются за счет импорта. В работе предлагается технологически простое, экологичное решение получения стеаратов металлов, основанное на взаимодействии в твердой фазе.

Краткое содержание.

Стеарат кальция широко применяется в качестве эффективного стабилизатора при производстве полистирола, полиамида, ПВХ, полиолефинов. Он используется при производстве кабельных и трубных термопластов, строительных и отделочных материалов на основе известняка и цементных смесей. Является антиагломерирующей добавкой для синтетических каучуков, применяется в качестве вспомогательного сиккатива при производстве лакокрасочных изделий.

Благодаря тому, что стеарат кальция нетоксичен, его возможно применять при производстве изделий, предназначенных для контакта с пищевыми продуктами. В строительной промышленности (в частности – при производстве цемента), а также при производстве текстильных материалов, он широко используется в качестве эффективной водоотталкивающей добавки (как гидрофобизатор).

Кроме этого, сфера применения стеарата кальция включает в себя следующие направления: как эмульгатор для препаратов косметического назначения, парфюмерная промышленность, производство медицинских материалов, производство пишущих карандашей – как пластификатор, производство литейных формовочных смесей – как смазка (лубрикант).

В настоящее время основным способом промышленного получения карбоксилатов двухвалентных металлов является двухстадийный способ, основанный на реакции обратимого взаимодействия. Этот способ широко используется в мировой промышленности, но имеет ряд недостатков. Основными недостатками являются: применение больших количеств воды, до десятикратного количества, используемой для отмывки конечного продукта от исходных компонентов – стеариновой кислоты и щелочи, и необходимость последующей сушки для удаления влаги.

Нами предложен способ получения карбоксилатов металлов в одну технологическую стадию. Способ основан на протекании химического процесса взаимодействия стеариновой кислоты и оксидов металлов в рабочем цилиндре планетарного экструдера, в котором обеспечивается высокая интенсивность и площадь взаимодействия компонентов реакционной смеси. Лабораторные исследования показали высокую эффективность процесса (выход ~ 98%) и стабильность характеристик получаемых стеаратов металлов. При этом отсутствует стадия промывки непрореагировавшего продукта от компонентов реакционной системы, а соответственно и отсутствует стадия сушки.

Работа выполняется при финансировании в рамках базовой части госзадания МинОбрНауки РФ.

МОДИФИКАЦИЯ НИЖНЕГО ОБОДА П-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА ПРОИЗВОДНЫМИ АНИЛИНА И ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ

Демидова А.С., Марышева А.Р., Горбачук В.В., Стойков И.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Annet110@ya.ru*

Сопряжённые электропроводящие полимеры находят применение в составе электрохимических сенсоров, солнечных батарей, каталитических систем и систем микроэкстракции. Одним из интенсивно развивающихся направлений исследований является разработка материалов на основе анилина с повышенной селективностью связывания субстратов. В качестве подходов к решению данной задачи используется введение молекул-рецепторов в материалы на основе полианилина и синтез молекулярно импринтированных материалов. Однако практически отсутствуют работы, в которых рецепторные фрагменты, вводились бы непосредственно в качестве заместителей в полимерных цепях полианилина.

В рамках данной работы разработана стратегия функционализации нижнего обода тиакаликс[4]арена производными анилина, с защищёнными фталимидными фрагментами аминогруппами. Снятием защитных групп были получены производные тиакаликс[4]арена, содержащие по нижнему ободу фрагменты замещённого анилина. Реализована окислительная полимеризация взаимодействием полученных производных тиакаликс[4]арена, содержащих фрагмент анилина с персульфатом аммония и солями переходных металлов.

Структура и состав полученных макроциклических производных охарактеризованы комплексом физических и физико-химических методов: ЯМР ^1H , ИК-, УФ-спектроскопии, MALDI масс-спектрометрии и элементного анализа. Размеры и морфология продуктов окислительной полимеризации охарактеризованы методами сканирующей, просвечивающей электронной микроскопии и методом динамического светорассеяния.

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

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ $\text{Ln}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Fe}_{1-y}\text{Cu}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$)

Дерябина К.М., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
deryabina.ksenia@yandex.ru

Синтез образцов для исследования осуществляли по глицерин-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при 1000-1100°C на воздухе в течение 120 часов с промежуточными перетираниями и последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав полученных оксидов определяли рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008». Кислородную нестехиометрию (δ) однофазных сложных оксидов изучали методом термогравиметрического анализа (ТГА) как функцию температуры (в интервале 25 – 1000°C) на воздухе. Абсолютное значение кислородного дефицита определяли методом йодометрического титрования, для чего образцы были медленно охлаждены до комнатной температуры. Электротранспортные свойства сложного оксида $\text{SmBaCuFeO}_{5\pm\delta}$ изучали с помощью 4-контактного метода в широком интервале температур и парциальных давлений кислорода. Величину коэффициента термического расширения (КТР) рассчитывали из дилатометрических данных на воздухе. Химическую совместимость оксидов с материалом твердого электролита топливного элемента ($\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{2-\delta}$ и $\text{Zr}_{0.85}\text{Y}_{0.15}\text{O}_{2-\delta}$) определяли методом контактных отжигов при $800 \leq T, ^\circ\text{C} \leq 1100$ на воздухе.

Сложные оксиды $\text{SmBaCu}_{1-x}\text{Fe}_{1+y}\text{O}_{5\pm\delta}$.

По данным РФА установлено, что твердые растворы $\text{SmBaCu}_{1-y}\text{Fe}_{1+y}\text{O}_{5\pm\delta}$, со структурой двойного перовскита, образуются при $-0.3 \leq y \leq 0.3$. Рентгенограммы всех однофазных оксидов были проиндексированы в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $P4/mmm$. По данным ТГА и йодометрического титрования установлено, что величина кислородной нестехиометрии δ увеличивается с ростом концентрации меди и температуры. Это связано с тем, что медь становится полностью или частично акцептором электронов и способствует возникновению кислородных вакансий и/или электронных дырок. Общая электропроводность образца $\text{SmBaCuFeO}_{5\pm\delta}$ растет с увеличением парциального давления кислорода и температуры, что свидетельствует о полупроводниковом типе проводимости. Значение КТР сложного оксида $\text{SmBaCuFeO}_{5\pm\delta}$ в интервале 25-1000°C составляет $14.5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Установлено, что $\text{SmBaCuFeO}_{5\pm\delta}$ не взаимодействует со стабилизированным оксидом церия вплоть до 900°C и реагирует с оксидом циркония уже при 800°C.

Сложные оксиды $\text{Ba}_{1-x}\text{Ln}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$).

Для определения возможности образования сложных оксидов $\text{Ba}_{1-x}\text{Ln}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ был синтезирован ряд образцов с $x = 0.3; 0.35; 0.375; 0.4$. По данным РФА установлено, что твердые растворы $\text{Ba}_{1-x}\text{Nd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ существуют в интервале составов $0.3 \leq x \leq 0.4$, тогда как при $\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$ образуются единственные соединения с $x = 0.375$. Структура всех однофазных соединений была описана в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$. Показано, что параметры элементарной ячейки растут с понижением концентрации бария в образцах и увеличением радиуса лантанида. Для всех однофазных образцов методом йодометрического титрования определена величина содержания кислорода при комнатной температуре.

СТЕКЛА ДЛЯ ОБОЛОЧЕК ЖЕСТКОГО ОПТИЧЕСКОГО ВОЛОКНА

Дяденко М.В.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь
dyadenko-mihail@mail.ru*

Жесткое оптическое волокно представляет собой систему, состоящую из световедущей жилы и двух (светоотражающей и защитной) оболочек.

При разработке составов стекол для оболочек наиболее сложной задачей являлось их согласование со стеклом световедущей жилы по реологическим характеристикам, от которых зависит стабильность геометрических параметров волокна и чистота поля зрения волоконно-оптических изделий. Стекло для светоотражающей оболочки синтезировано на основе системы $K_2O-Na_2O-B_2O_3-SiO_2$. Определена область составов стекол, характеризующихся устойчивостью стеклообразного состояния при шестичасовых изотермических выдержках в интервале температур 600–1100 °С, показателем преломления менее 1,49 и величиной температурного коэффициента линейного расширения, находящегося в пределах $(60-65) \cdot 10^{-7} K^{-1}$. Исследовано влияние оксидов Al_2O_3 и BaO на реологические свойства опытных стекол и определено, что их оптимальное содержание, обеспечивающее температурный интервал изменения вязкости стекол для светоотражающей оболочки от 10^9 до 10^4 Па·с не менее 360 °С, составляет 1–2 мол. %.

Стекло для защитной оболочки получено на основе системы $Na_2O-K_2O-Al_2O_3-B_2O_3-SiO_2$. В качестве модифицирующих добавок вводились красящие оксиды CoO , NiO , Cr_2O_3 и Mn_2O_3 . Их использование связано с необходимостью обеспечить высокую оптическую плотность в видимой области спектра. Установлено, что высокая поглощающая способность исследуемых стекол для защитной оболочки, обеспечивается при введении оксидов хрома, кобальта и марганца в соотношении 3:1:2 соответственно.

Таким образом, разработаны составы стекол для оболочек жесткого оптического волокна, устойчивые к кристаллизации в интервале температур 600–1100 °С при их термообработке до 6 ч и согласованы со стеклом световедущей жилы по показателю преломления, величине ТКЛР и вязкостным характеристикам таким образом, что обеспечивается повышенное светопропускание готового волоконно-оптического элемента и пониженный на 10–12 % выход некондиционной продукции в сравнении с промышленными аналогами.

ОПТИЧЕСКИЕ СТЕКЛА ДЛЯ ИЗДЕЛИЙ ОФТАЛЬМОЛОГИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Дяденко М.В., Елизар Ю.А.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь
dyadenko-mihail@mail.ru*

К изделиям офтальмологической оптики относят очковые, контактные, интраокулярные, корректирующие и офтальмологические линзы, а также вискохирургические имплантаты. Конкуренентоспособность стекла как материала для очковой линзы в сравнении с органическими материалами может быть повышена за счет уменьшения ее толщины, что достигается при высоком показателе преломления стекла. В связи с этим настоящая работа посвящена разработке составов стекол для изделий офтальмологического назначения с показателем преломления не менее 1,65 и минимально возможным значением плотности.

Для решения поставленной задачи в качестве основы выбрана система $K_2O-TiO_2-SiO_2$ при следующем содержании оксидов, мол. %: SiO_2 55–75, TiO_2 10–30, K_2O 15–35. По результатам градиентной термообработки установлено, что с повышением содержания оксида кремния до значений 70–75 % стекла характеризуются ярко выраженной объемной кристаллизацией.

Установлено, что величина показателя преломления зависит главным образом от количества оксида титана, вводимого в состав синтезированных стекол, а значения данного показателя в пределах 1,65–1,70 достигаются при содержании TiO_2 20–30 %. Максимальные значения плотности характерны для стекол, содержащих 30–35 % K_2O , а минимальные – для стекол с содержанием TiO_2 25–30 %. Данный факт связан с различием в радиусах вводимых катионов, которые определяют плотность упаковки структурных элементов.

Выявлено, что введение оксидов калия, бария, титана и циркония в базовый состав стекла системы $K_2O-TiO_2-SiO_2$ в соотношениях $K_2O:BaO$, равном 4:1, и $TiO_2:ZrO_2$, составляющем 3:1, позволяет синтезировать стекло для очковых линз, устойчивое к кристаллизации при его градиентной термообработке в интервале температур 600–1100 °С в течение 1 ч, с показателем преломления 1,702 и плотностью 2703 кг/м³. Кроме того, стекло указанного состава характеризуется величиной микротвердости 3670 МПа и светопропусканием 90 % при длине волны 540 нм.

РАДИОПРОЗРАЧНЫЕ СТЕКЛА РАДИОТЕХНИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Дяденко М.В., Мицкевич Н.Р.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь
dyadenko-mihail@mail.ru*

В настоящее время существует потребность в недорогих радиопрозрачных материалах, которые могут быть использованы для изготовления экранов и корпусов различных радиотехнических устройств. В Беларуси и России активизируется деятельность в области разработки и выпуска СВЧ аппаратуры и оборудования, в котором используются радиопрозрачные стекла. Основными требованиями к таким стеклам являются: устойчивость к кристаллизации при их градиентной термообработке в интервале температур 600–1100 °С в течении 1 ч; поглощение электромагнитного излучения радиочастотного диапазона не должно превышать 5 %; показатели термостойкости должны быть не ниже 150 °С; диэлектрическая проницаемость – не выше 5, а тангенса угла диэлектрических потерь не должен превышать 0,1.

Синтез радиопрозрачных стекол проводился на основе системы $K_2O-BaO-TiO_2-SiO_2$ при следующем содержании оксидов, мол. %: K_2O 7,5; BaO 12,5–32,5; TiO_2 10–30; SiO_2 50–70.

Установлено, что стекла с содержанием оксида титана свыше 25 мол. % склонны к поверхностной кристаллизации при их градиентной термообработке в течении 1 ч.

Радиопрозрачность опытных стекол оценивалась в диапазонах 8–11,3 ГГц и 26–35 ГГц. Установлено, что на величину поглощения опытных стекол в указанных диапазонах оказывает влияние оксид титана: повышение его количества от 10 мол. % до 30 мол. % вызывает увеличение поглощения стекол на 2–6 %. Однако при постоянном содержании TiO_2 поглощение в указанных радиодиапазонах определяется количеством оксида бария.

Требуемые показатели термостойкости опытных стекол достигаются при соотношении $(K_2O+BaO)/TiO_2$, составляющем 0,65–2. Стекла с содержанием BaO 17,5–27,5; TiO_2 10–20 характеризуются диэлектрической проницаемостью не выше 5 и тангенсом угла диэлектрических потерь, равным 0,1–0,02.

Таким образом на основе системы $K_2O-BaO-TiO_2-SiO_2$ синтезированы стекла, характеризующиеся поглощением электромагнитного излучения радиочастотного диапазона не выше 5 %, с требуемым комплексом электрических и термических характеристик.

СТЕКЛОВИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СТЕКЛОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЦЕМЕНТОВ

Дяденко М.В.

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика Беларусь
dyadenko-mihail@mail.ru*

Целью данной работы является получение легкоплавкого стекла для производства стеклокристаллического цемента, предназначенного для вакуумплотного соединения волоконно-оптических элементов с металлической оправой.

Стеклокристаллический цемент является композиционным материалом, состоящим из смеси легкоплавкого стекла с требуемым уровнем физико-химических характеристик и кристаллического наполнителя, в качестве которого использовался циркон. Основными требованиями, предъявляемыми к стеклу, являются величина температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР) должна составлять $(94 \pm 1) \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$, температура деформации – не менее $470 \text{ }^\circ\text{C}$, растекаемость при температуре $470 \text{ }^\circ\text{C}$ – 25–26 мм.

Синтезированы стекловидные материалы на основе системы $\text{ZnO-PbO-B}_2\text{O}_3$, включающей, мол. %: 5–40 ZnO; 50–85 PbO; 10–45 B_2O_3 . Установлено, что определяющее влияние на фазовые превращения при термической обработке стекол оказывает соотношение $\text{ZnO}/(\text{PbO}+\text{B}_2\text{O}_3)$. Развитие кристаллизационных процессов характерно для стекол с указанным соотношением, составляющим свыше 0,20, с выделением в качестве кристаллической фазы $3\text{ZnO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3$. Определено, что температура стеклования опытных стекол изменяется в пределах от 305 до $490 \text{ }^\circ\text{C}$. По влиянию на реологические свойства опытных стекол, а именно снижение вязкости в интервале температур $300\text{--}500 \text{ }^\circ\text{C}$ компоненты располагаются в следующий ряд: $\text{B}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{ZnO} \rightarrow \text{PbO}$.

Показатели ТКЛР опытных стекол изменяются в пределах от $60,5 \cdot 10^{-7}$ до $118,4 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$. Плотность упаковки структурных элементов опытных стекол с содержанием оксида бора свыше 25 мол.% снижается в связи с увеличением доли групп $[\text{BO}_3]$, что оказывает влияние на термические свойства стекол.

По результатам исследований определена область составов стекол с показателем ТКЛР свыше $80 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$, которые могут быть использованы для стеклокристаллического цемента, содержащего кристаллический наполнитель.

РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТОРОВ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ М-ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ, ПРИМЕНЯЕМЫХ В КОМПАКТНОЙ ДИАГНОСТИКЕ

Егоров А.Н., Таюрская Г.В.

Институт физики КФУ, Казань
derectrev@mail.ru

Важнейшим классом псевдослучайных последовательностей являются последовательности, формируемые на основе регистров сдвига с линейными обратными связями. Аппаратурный генератор с линейными обратными связями описывается следующим рекуррентным соотношением

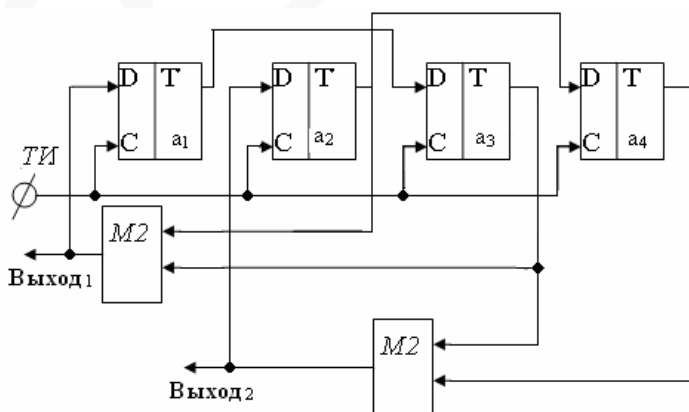
$$a_i = \sum_{k=1}^{m \oplus} \alpha_k a_{i-k} \quad i = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

где i – номер такта, $a_i \in \{0,1\}$ – символы выходной последовательности, $\alpha_k \in \{0,1\}$ – постоянные коэффициенты, знак \sum^{\oplus} означает суммирование по модулю два.

При соответствующем выборе коэффициентов $\{\alpha_i\}$ на основании характеристического

полинома $\varphi(x) = 1 \oplus \alpha_1 x^1 \oplus \alpha_2 x^2 \oplus \dots \oplus \alpha_{m-1} x^{m-1} \oplus \alpha_m x^m$, который должен быть примитивным и неприводимым, последовательность имеет максимальную длину, равную $T = 2^m - 1$. Такая последовательность называется М-последовательностью. [1]

Функциональная схема двухканального генератора М-последовательности с порождающим полиномом $\varphi(x) = x^4 \oplus x^3 \oplus 1$ выглядит так:



1. В.Н. Ярмолик, С.Н. Демиденко. Генер. и прим. псевдослуч. сигн. в сист. испытаний и контроля, 1986, 8, 200.

ПОЛУЧЕНИЕ МОНОМЕРОВ ДЛЯ СИНТЕЗА ПОЛИИМИДНЫХ МАТРИЦ

Егоров А.С., Возняк А.И., Иванов В.С., Чигорина Е.А., Садовская Н.Ю., Ретивов В.М.

ФГУП «ИРЕА», г. Москва
egorov@irea.org.ru

Полимерные нанокомпозиты, которые представляют новый класс материалов, обладают уникальными барьерными свойствами, электропроводимостью, теплопроводностью, повышенной прочностью, теплостойкостью и термостабильностью, а также пониженной горючестью [1]. Сейчас в мире авиапромышленность является одной из ведущих отраслей-потребителей композиционных материалов. В целом, перспективы потребления нанокомпозитов в авиастроении связаны с государственными планами по повышению конкурентоспособности российского авиастроения.

В настоящее время полиимидные смолы применяются в качестве матриц для создания армированных композитов на основе легких углеродных волокон, в качестве замены металлических деталей в аэрокосмической промышленности и деталей корпуса летательных аппаратов, в связи с их выдающейся термической и механической стойкостью.

В ходе нашей работы были разработаны методики получения таких важных мономеров для синтеза полиимидных матриц, как диангидрид перилена-3,4,9,10-тетракарбоновой кислоты, пиромеллитовый диангидрид, диангидрид 3,3',4,4'-бензофенонтетракарбоновой кислоты, диангидрид 3,3',4,4'-дифенилоксидтетракарбоновой кислоты, тетрафтор-м-фенилендиамина в смеси с тетрафтор-п-фенилендиамином и 4,4'-диаминооктафторбифенил. В дальнейшем эти мономеры будут использованы для создания композиционных материалов нового поколения с повышенной термостойкостью и повышенной стойкостью к коротковолновому, в том числе рентгеновскому излучению на основе наполненной углеродными нанотрубками, углеродными волокнами и наноструктурированным карбидом кремния полиимидной матрицы.

Прикладные научные исследования выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России в рамках Соглашения о предоставлении субсидии №14.625.21.0003 от 25 августа 2014 года. (Уникальный идентификатор прикладных научных исследований (проекта) RFMEFI62514X0003).

1. Михайлин Ю.А. Термоустойчивые полимеры и полимерные материалы.— СПб.: Профессия, 2006 – 624 с.

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ КРЕАТИНКИНАЗЫ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Егоров П.Г., Аненкова К.А., Федорова К.В.

*Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
holland16@rambler.ru*

Исследования последних лет показали, что увеличение смертности среди мужчин молодого и среднего возраста связано в основном с сердечно-сосудистыми заболеваниями. Это делает вопрос профилактики и лечения инфаркта миокарда, а также выявления ранней сердечной недостаточности в разряд приоритетных для здравоохранения.

В настоящее время ферментные препараты широко используют в медицине. Ферменты в медицинской практике находят применение в качестве диагностических и терапевтических средств. Энзимодиагностика заключается в постановке диагноза заболевания на основе определения активности ферментов в биологических жидкостях человека [1].

Определение активности креатинкиназы в плазме крови имеет диагностическое значение при инфаркте миокарда (происходит повышение уровня МВ-изоформы).

Метод динамического рассеяния света [2] позволяет исследовать влияние различных примесей, имитирующих стрессовые ситуации, на структуру фермента, а также выявить форму, в которой фермент существует в растворе при больших концентрациях (димеры или октамеры) [3].

В процессе таких исследований было изучено поведение креатинкиназы в чистом водном растворе, а также в присутствии NaCl и Pb(NO₃)₂. и определены пороговые значения концентрации, при которых происходит переход от мономеров к более сложным формам (димерам и октамерам) [4].

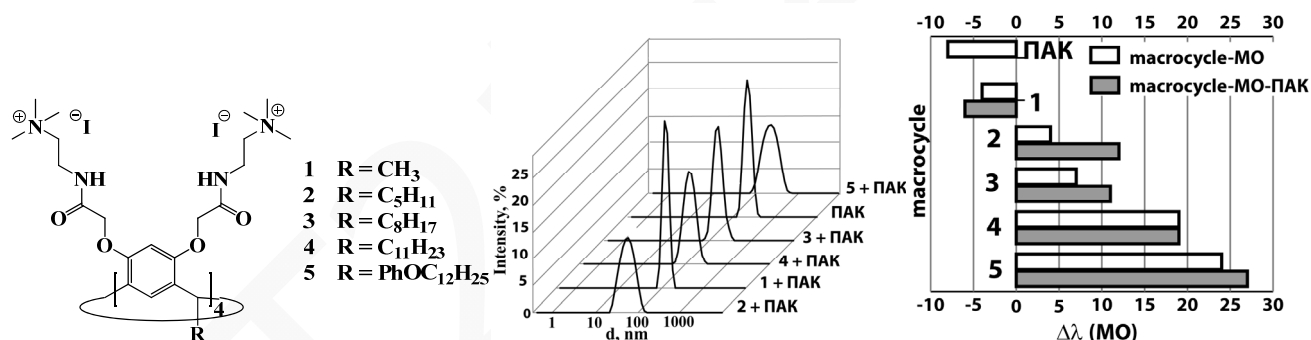
1. Под ред. Е.С. Северина, Биохимия: Учеб. для вузов, 2003, 779.
2. Г.П.Петрова Учебное пособие по спецкурсу кафедры молекулярной физики, Москва, Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, 2008, 34-35.
3. Gregg G.G. Hoffman, Electronic Theses, Treatises and Dissertations, The Florida State University, 2005, 3992.
4. Olivier Marcillat, Hortense Mazon, Christian Vial, Nova Science Publishers, 2006, 90-100.

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ АММОНИЙНЫХ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ

Ермакова А.М., Морозова Ю.Э., Сякаев В.В., Шалаева Я.В., Казакова Э.Х., Коновалов А.И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН
alinochka1201@mail.ru*

Нековалентные супрамолекулярные полимерные системы – это супрамолекулярные комплексы, в которых водорастворимый полимер взаимодействует с гидрофильными молекулами (сурфактантами, водорастворимыми макроциклами) посредством образования нековалентных связей, таких как электростатические взаимодействия, образование водородных связей, гидрофобный эффект. Целью изучения систем полимер-макроцикл является получение новых самоорганизующихся структур, свойства которых изменяются под воздействием внешних факторов (рН, температура и т.д.), что отражается на процессах связывания/высвобождения субстратов. Супрамолекулярные системы полимер-макроцикл представляют собой новый класс «умных материалов», которые могут использоваться для контролируемой доставки лекарственных средств, а также в катализе. В нашей работе мы изучили супрамолекулярные системы на основе каликс[4]резорцинарен (1-5), модифицированных амидоаммонийными группами по верхнему ободу и алкильными группами разной длины по нижнему ободу, и полиакриловой кислоты (ПАК). Супрамолекулярные системы каликс[4]резорцинарены - ПАК изучены методом динамического светорассеяния и спектрофотометрическим методом. Показано образование тройных систем каликс[4]резорцинарены - Метилловый Оранжевый – ПАК.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 13-03-00147-а) и Программы 6 ОХНМ РАН.

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ И АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ГУАНИНА И АДЕНИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ПЛЕНКОЙ ИЗ ГЕКСАХЛОРОРУТЕНАТА РУТЕНИЯ

Жалдак Э.Р., Гедмина А.В., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Химический институт им. А.М. Бутлеров КФУ, г. Казань,
E.hafizova@gmail.com*

Гуанин и аденин относятся к классу пуриновых оснований и являются структурными фрагментами дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК). Уровень их содержания в ДНК рассматривается как важный параметр мутационных изменений ДНК, используемый при диагностике и лечении различных заболеваний.

В настоящей работе изучены электрокаталитические свойства химически модифицированного электрода (ХМЭ) на основе стеклоуглерода (СУ) с иммобилизованной пленкой из гексахлорорутената рутения (RuRuCl_6), при электро-окислении гуанина и аденина с целью разработки высокочувствительного и селективного способа определения этих пуриновых оснований.

Установлено, что пленка RuRuCl_6 проявляет каталитическую активность по отношению к гуанину и аденину. Каталитический эффект выражается в многократном увеличении тока окисления субстрата на ХМЭ по отношению к току окисления модификатора, а также в уменьшении перенапряжения окисления пуриновых оснований на ХМЭ по сравнению с немодифицированным СУ. Предложена схема и рассчитаны кинетические параметры электроокисления гуанина и аденина на ХМЭ. Благодаря способности пленки RuRuCl_6 к электрохимическому генерированию нескольких каталитических центров, электроокисление гуанина и аденина происходит при разных потенциалах, что позволяет разработать способ селективного определения гуанина и аденина при совместном присутствии. Разработан способ вольтамперометрического определения гуанина и аденина на ХМЭ с пленкой RuRuCl_6 . Нижняя граница определяемых содержаний гуанина и аденина составляет 5×10^{-6} М.

Электрод RuRuCl_6 -СУ был использован для амперометрического детектирования пуриновых оснований в условиях проточно-инжекционного анализа (ПИА). Использование ПИА позволило автоматизировать процесс анализа, увеличить его производительность и на порядок (до 5×10^{-7} М) уменьшить предел обнаружения аналитов по сравнению со стационарными условиями.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-97031).

ПОСЕВНАЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ И ПОСЕВНАЯ ПЛОДОРОДНОСТЬ В РАЗЛИЧНЫХ АГРОТЕХНОЛОГИЯХ

Шодиев У.У., Жуманиёзова Ш.И., Машарипов А.А.

*Ургенчский государственный университет, факультет естествознания и географии, Ургенч,
Узбекистан
shohnozadjumaniyazova@mail.ru*

В последние годы в Республике Узбекистан с развитием реформ в аулах возникла система новых занятий земледелием. Вследствие исполненных научных исследований хлопчатника и пшеницы, повторная посевная плодотворность выращивания, создана региональная агротехнология и они еще совершенствуются.

В последние годы в нашей стране в условиях изменения погоды и недостатка воды выращивание хлопчатника и пшеницы в агротехнологиях нужно еще больше совершенствовать.

Имея в виду вышесказанные слова, в Республике, в условиях почвенного климата различных агротехнологий хлопчатника и пшеницы, рост и развитие повторительных посевов, качество урожая и качественность, а также почвы агрохимических и агрофизических свойств за состояние мелиоративного влияния и употребляемая агротехническая агросоциальная плодотворность одна из важных задач сегодняшнего дня.

Многолетние и разносторонние проведенные научные исследования в нашей Республике в различных почвенных и климатических подходящих условиях хлопчатника и пшеницы разработано и использовано на практике оптимальное агротехнологическое выращивание. Созданная агротехнология в различных элементах постоянным образом исследуется и совершенствуется.

В Узбекистане для орошаемых земель создана и совершенствуется агротехнология выращивания пшеницы.

В настоящее время наблюдаемые изменения климата и погоды, в том числе недостаток воды и других факторов применяемые в этих условиях агротехнологии, рост посевов оказывает свое влияние на развитие и плодотворность.

В Республике в условиях земельного климата поочередное обсаживание хлопчатника и пшеницы в системе различных агротехнологий, изучение использования плодотворности обладает и теоретической и практической значимостью.

1. Почвоводоохранное земледелие. Каштанов А.Н., Заславский М.Н. 1984.
2. Почвоведение. Кауричев И.С. (ред.) 1969.
3. Основы учения о почвах, В 2ч. Ч.1. Ковда В.А., 1973.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОКРЕМНИСТЫХ ЦЕОЛИТОВ ZSM-5 И БЕТА В РЕАКЦИИ СКЕЛЕТНОЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-БУТЕНОВ В ИЗОБУТЕН

Залялиев Р.Ф., Ламберов А.А., Мухамбетов И.Н.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
zalyaliev.r@gmail.com*

Скелетной изомеризации н-бутенов уделяется большое внимание в связи с практическим интересом к процессам получения изобутена – мономера в производстве синтетических каучуков. На настоящий момент в нашей стране промышленное применение имеет алюмооксидный катализатор (на ОАО «Нижнекамскнефтехим»). Катализатор эксплуатируется в следующих условиях: температура – 520-560 °С, мольное отношение сырье:пар – 1:(4÷8), объемная скорость подачи сырья – 200 ч⁻¹, регенерация водяным паром с последующим окислительным выжигом при температуре 450-560 °С. В этих условиях конверсия н-бутенов составляет 31 %, селективность – 88 %.

В то же время известно [1,2], что цеолитсодержащие катализаторы проявляют высокую активность (>70%) в реакции скелетной изомеризации при более низких температурах (400-450°С), однако характеризуются низкой первоначальной селективностью (< 50%). Целью данной работы является исследование высококремнистых цеолитов zsm-5 и beta в реакции скелетной изомеризации н-бутенов в изобутен с использованием смеси водяного пара и промышленной бутан-бутеновой фракции.

Были проведены испытания каталитической активности цеолитов zsm-5 и beta в реакции скелетной изомеризации. Методами низкотемпературной адсорбции азота, температурно-программируемой десорбции аммиака изучено изменение текстурных и кислотных характеристик исследованных образцов. Установлено, что в зависимости от концентрации кислотных центров, цеолиты подвергаются или значительному зауглероживанию, или интенсивно катализируют крекинг углеводородов. Решающую роль в увеличении выхода изобутена, предположительно, играет рост влияния стерического фактора вследствие накопления коксовых отложений.

1. Van Donk S., Bitter J.H., de Jong K.P. // Applied Catalysis A: General. 2001. Vol. 212. P. 97.
2. Butler A.C., Nicolaidis C.P // Catal. Today. 1993. Vol. 18. P. 443.

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ВЫСОКООРИЕНТИРОВАННОГО ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ГРАФИТА

Запивахин А.А., Лысогорский Ю.В., Киямов А.Г.

*Институт физики КФУ, Казань
majioruk@gmail.com*

Сверхпроводимость при комнатной температуре является сейчас одной из самых интригующих тем в физике перспективных материалов. Доказательства существования гранулярной сверхпроводимости при комнатной температуре в порошках графита были получены еще в 1970х годах [1,2]. Недавние измерения магнитных свойств смоченного водой порошка графита подтверждают существование сверхпроводимости при высоких температурах [3]. Также неожиданное проявление сверхпроводимости было описано в работе [4]. Однако остается множество вопросов по поводу достоверности результатов эксперимента. Поскольку в работе [4] автор использовал графитовые хлопья, для попытки воспроизведения результатов необходимо синтезировать достаточное количество хлопьев графита. Известно, что один из способов создания графитовых хлопьев – это механическое отслоение из образцов высокоориентированного пиролитического графита. Тем не менее, поскольку образцы ВОПГ по своей структуре могут сильно отличаться, успех создания графитовых хлопьев обусловлен не только процедурой изготовления, но и свойствами исходного образца ВОПГ. В рамках данной работы, ставилась задача исследования особенностей структуры различных образцов ВОПГ на предмет их пригодности для изготовления графитовых хлопьев. С помощью методов рентгеноструктурного анализа определялись межслоевые расстояния между плоскостями графита, оценивались размер кристаллитов графита в образцах ВОПГ в направлении [001] и идеальность их упаковки. Полученные в рамках данной работы результаты позволяют определить наиболее подходящие для изготовления графитовых хлопьев образцы ВОПГ.

1. Antonowicz K. Nature, 1974,247, 358–360.
2. Antonowicz K. Phys. Status Solidia, 1975, 28, 497–502.
3. Scheike T, Bohlmann W, Esquinazi P, Barzola-Quiquia J, Ballestar A, Setzer A. Advanced Materials, 2012, 24, 5826-5831
4. Yasushi Kawashima. AIP Advances, 2013, 3, 052132.

НАНОПОРИСТЫЕ ПОЛИМЕРЫ В КАЧЕСТВЕ ГАЗОРАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ МЕМБРАН ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ АММИАКА ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Зарипов И.И.^a, Давлетбаева И.М.^{a,c}, Мазильников А.И.^c, Давлетбаев Р.С.^b, Воротынцев И.В.^d

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^b Казанский национальный исследовательский технический университет, Казань

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

^d Нижегородский государственный технический
университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород
zaripovilnaz@gmail.com

Метод мембранного газоразделения по сравнению с традиционными физико-химическими методами разделения, такими как дистилляция, кристаллизация и сорбция является более энергоэффективным процессом, более экологически безопасным, а также отличается относительной простотой реализации масштабного перехода. Развитие мембранных процессов связано в первую очередь с поиском новых мембранных материалов, обладающих высокой производительностью и разделительными свойствами, т.е. проницаемостью и селективностью. Кроме того, мембранные материалы должны обладать хорошими механическими свойствами, т.е. обладать достаточными прочностными и ресурсными характеристиками.

В данной работе получены новые полимерные газоразделительные мембраны на основе амфифильных блок-сополимеров, пустоты в которых формируются за счет направленного изменения их макромолекулярной и надмолекулярной архитектуры. В основе создания таких полимеров лежат особенности полиприсоединения ароматических изоцианатов, инициируемого калий-замещенными открытоцепными аналогами краун-эфиров. Направленное изменение реакционных условий, природы и молекулярной массы макроинициаторов, создания узлов гиперразветвления являются факторами, позволяющими влиять на макромолекулярную архитектуру и геометрию надмолекулярной организации полимеров и, соответственно, на их способность формировать сообщающиеся между собой наноразмерные пустоты. Размер и химическое строение каналов обуславливают возможность транспорта или сорбции функциональных молекулярных объектов. Если внутренняя обкладка наноразмерных каналов состоит из блок-сополимеров оксида этилена и оксида пропилена, то происходит растворение в ее составе и последующее передвижение полярных молекул, при этом становится невозможным проникновение неполярных молекул. Такие полимеры проявили высокоселективные газотранспортные свойства при разделении газовых смесей, содержащих аммиак.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ.

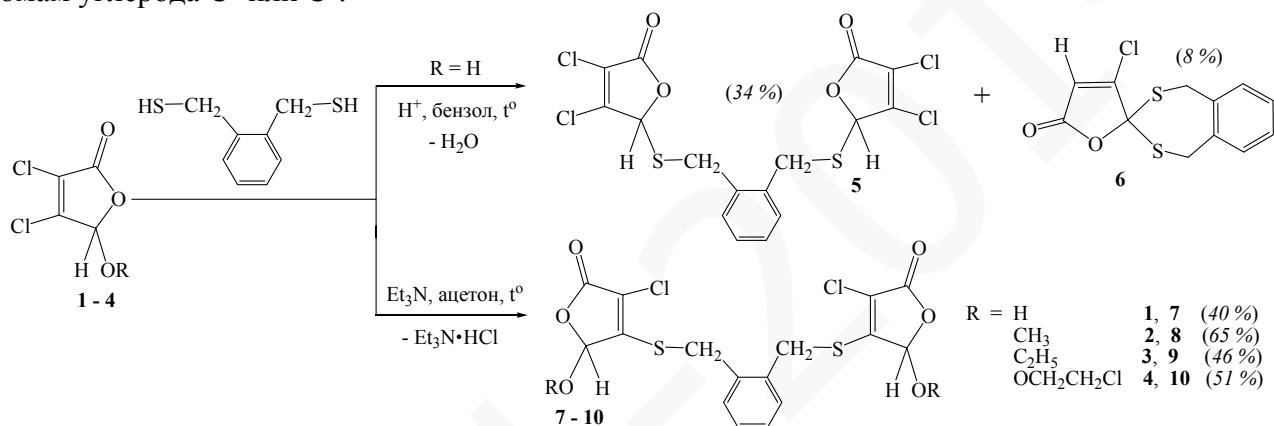
СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИЙ 3,4-ДИХЛОР-2(5H)-ФУРАНОНОВ С ФЕНИЛЕНДИМЕТАНТИОЛАМИ

Зарипова А.Р.^a, Хоанг Тхи Лиен^a, Лодочникова О.А.^b, Бердников Е.А.^a, Чмутова Г.А.^a,
Курбангалиева А.Р.^a

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

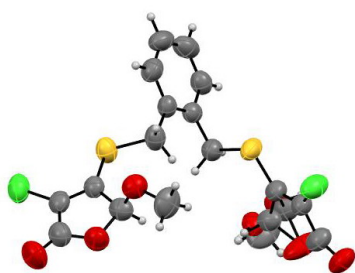
^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань
a_zaripova@inbox.ru

В данной работе изучена реакционная способность 3,4-дихлорпроизводных 2(5H)-фуранона **1–4** по отношению к *o*- и *m*-фенилендиметантиолам. При проведении реакций с *o*-фенилендиметантиолом в условиях кислотного и основного катализа получены *бис*-тиоэферы **5**, **7–10**, в молекулах которых два лактонных цикла связаны посредством фрагмента дитиола по атомам углерода C⁵ или C⁴:

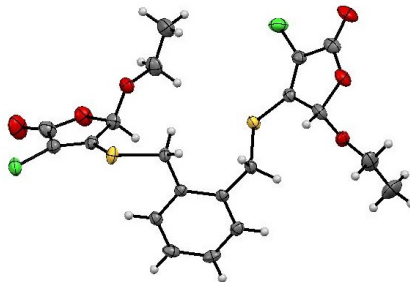


Продукты аналогичного строения образуются в реакциях фуранонов с *m*-фенилендиметантиолом. Изучена кристаллизация диастеремерных смесей *бис*-тиоэфиров **7–10**, молекулярная и кристаллическая структура выделенных индивидуальных диастереомеров детально охарактеризована методом РСА.

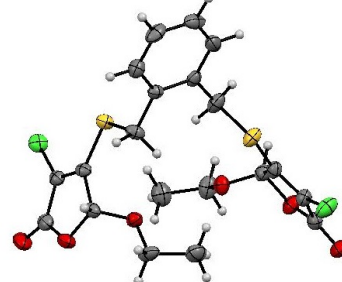
Сокристаллизат **8**



мезо-диастереомер **9**



dl-диастереомер **9**



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-03-00898-а)

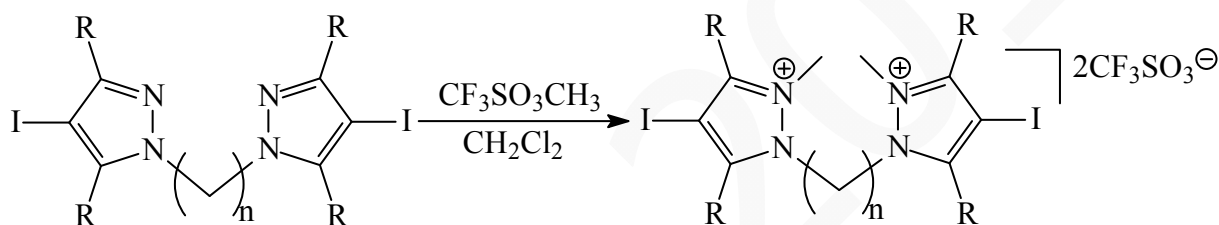
ПОЛУЧЕНИЕ СОЛЕЙ ДИПИРАЗОЛИЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИИОДПРОЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛА С МЕТИЛ ТРИФЛАТОМ

Затонская Л.В., Потапов А.С.

Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова, Барнаул
linok662@mail.ru

Соли пиразолия способны образовывать с комплексными соединениями металлов N-гетероциклические карбены, которые благодаря своим свойствам представляют большой интерес в органическом синтезе [1]. Именно поэтому разработка способов получения солей бис(пиразолил)производных является актуальной в настоящее время.

Из ранее полученных нами по методике [2] дииодпроизводных пиразола были синтезированы соли дипиразолия. Сам способ получения солей дипиразолия основан на переводе бис(4-иодпиразол-1-ил)алканов и бис(4-иод-3,5-диметилпиразол-1-ил)алканов с линкером, содержащим семь, девять, одиннадцать и двенадцать метиленовых групп, в соли путем метилирования атома азота во втором положении пиразольных циклов метил трифлатом ($\text{CF}_3\text{SO}_3\text{CH}_3$):



$R = \text{H}, \text{Me}; n = 7, 9, 11, 12$

Предложенный метод алкилирования отличается простотой: после растворения дииодпроизводного в дихлорметане и добавлении алкилирующего агента реакция протекала за 2 часа. В результате выходы целевых продуктов составили более 76 %, которые выделялись в виде осадков.

Таким образом в данной работе был предложен удобный способ получения солей дипиразолия, не требующий применения нестабильных алкилирующих агентов и сложных процедур выделения продуктов реакции.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 13-03-98033 р_сибирь_a и № 12-03-31197 мол_a.

1. Nan Y., Lee L.J., Huynh H.V. Chem. Eur. J, 2010, 16, 771.
2. Потапов А.С., Затонская Л.В., Хлебников А.И. Ползуновский вестник, 2013, 1, 7-9.

ПРОТОННЫЙ ЯМР ВОДНЫХ КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ НАНОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ LaF_3 И $\text{LaF}_3:\text{Gd}^{3+}$

Алакшин Е.М., Гизатуллин Б.И., Захаров М.Ю., Клочков А.В., Салихов Т.М., Скирда В.Д., Тагиров М.С.

*Институт физики КФУ, Казань
mikhailzakharo@yandex.ru*

Исследована ядерная магнитная релаксация протонов воды серии коллоидных растворов наноразмерных частиц трифторида лантана и фторида лантана, допированного гадолинием с массовым содержанием 0,5%. Сигнал ЯМР протонов регистрировался спектрометром «Протон-20М (Хроматэк)». Установлены зависимости скорости продольной релаксации от концентрации наночастиц в водном растворе и от их размера. Показано, что скорость релаксации протонов раствора $\text{LaF}_3:\text{Gd}^{3+}$ увеличивается с ростом концентрации парамагнетика в наночастицах и уменьшается с увеличением размера частиц.

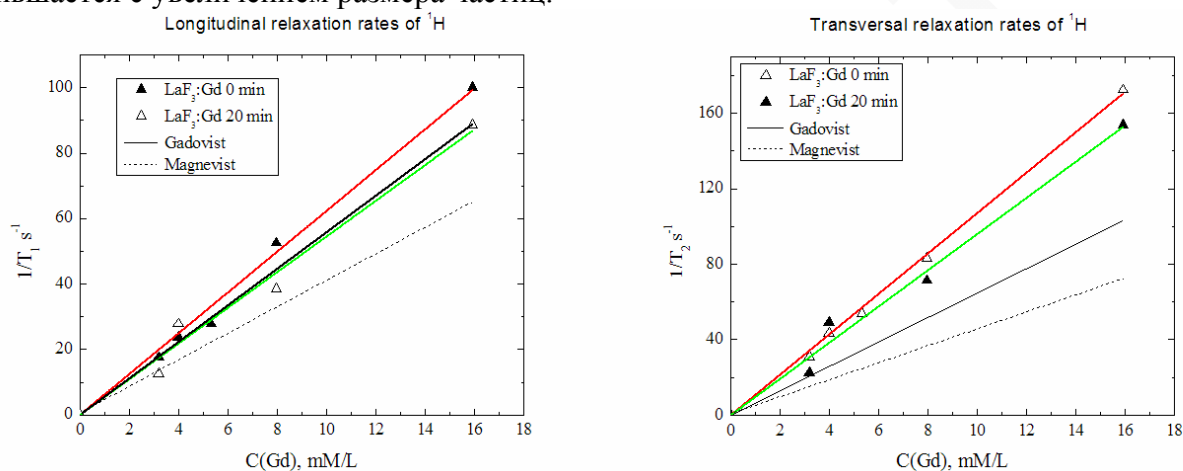


Рисунок 1. Скорости продольной и поперечной релаксации протонов для коллоидных растворов $\text{LaF}_3:\text{Gd}^{3+}$ с различными концентрациями Gd^{3+} и коммерческих препаратов Magnevist®, Gadovist®. Эксперимент проводился при температуре 37°C .

1. Е.М. Алакшин, Б.И. Гизатуллин, М.Ю. Захаров, А.В. Клочков, Т.М. Салихов, В.Д. Скирда, М.С. Тагиров Физика низких температур, 2015, 41, 1, 86–89.

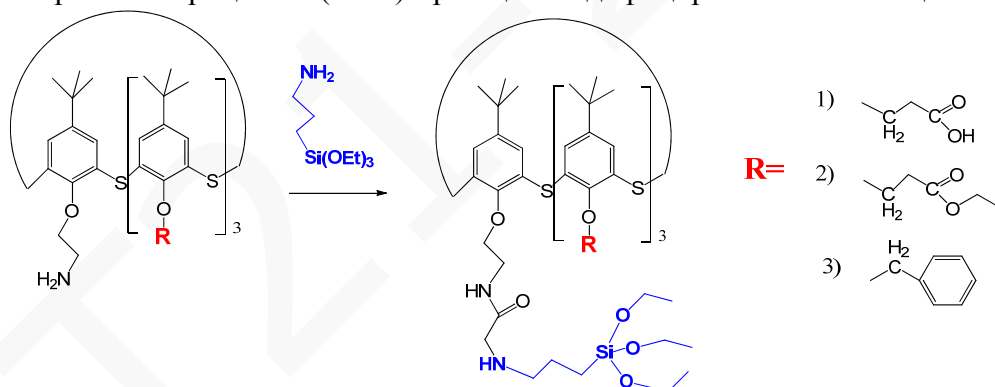
ГИБРИДНЫЕ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ АЛКОКСИСИЛАНОВ

Зиятдинова Р.В., Якимова Л.С., Стойков И.И.

Химический институт им. А.М. Бутлерова, КПФУ, Казань
ramilia91@mail.ru

Одним из актуальных направлений исследований в области материаловедения и коллоидной химии на данный момент является получение гибридных органо-неорганических пористых материалов с контролируемой стереохимией и геометрией пор.

Целью работы является получение коллоидных частиц с силесквioxановым скелетом на основе монозамещённых кремнийорганических производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена. Уникальность тиакаликс[4]аренов заключается в доступности исходных макроциклов одностадийным синтезом; возможности модификации «верхнего» и «нижнего» ободов и построения систем с несколькими центрами связывания. Нами предложено объединить термомеханические свойства коллоидных частиц полисилесквиоксана, как неорганического каркаса гибридных материалов, и комплексообразующей способности тиакаликсаренов, что позволит создать новые материалы на основе супрамолекулярных систем, обладающие специфическими функциями. В качестве прекурсоров нами были предложены монозамещённые производные тиакаликсарена, содержащие в своем составе акриламидные функции по нижнему ободу макроцикла. Акриламидные производные содержат активированную двойную С-С связь, что позволяет вовлекать данные соединения в реакции с триалкоксисиланами. В результате были получены кремнийорганические соединения, которые в дальнейшем конденсировались для изучения закономерностей процессов (само)агрегации модифицированных частиц.



Полученные соединения были охарактеризованы рядом физико-химических методов: методом динамического светорассеяния, MALDI масс-спектрометрии, ИК-, УФ- и ЯМР-спектроскопии, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 13-03-12055_офи_м.

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ ТЕПЛОВЫМ РАСШИРЕНИЕМ

Зимин Т.М., Лысогорский Ю.В.

*Институт физики К(П)ФУ, Казань
zimintm612@gmail.com*

Почти все материалы расширяются при нагревании, поэтому исключения вызывают неподдельный интерес. В последнее время наблюдается рост популярности исследований отрицательного теплового расширения (ОТР), например, в таких соединениях как ScF₃ и ему подобных [1,2]. Перспектива данного соединения в том, что ОТР у него наблюдается в широком интервале температур, если быть точнее, в диапазоне 7 – 750 К. Компьютерное моделирование в данном случае является очень мощным инструментом, так как позволяет рассчитать параметр Грюнайзена,

$$\gamma = \frac{\sum_i \gamma_i c_{v,i}}{\sum_i c_{v,i}}, \quad (1)$$

который рассчитывается через параметры Грюнайзена отдельных колебательных мод

$$\gamma_i = -\frac{V}{\omega_i} \frac{\partial \omega_i}{\partial V}. \quad (2)$$

Этот параметр связан с коэффициентом теплового расширения α как

$$\gamma = \frac{\alpha K_T}{C_{v\rho}}, \quad (3)$$

и определяет его величину и знак. В данной работе были рассмотрены соединения с группой симметрии, аналогичной группе симметрии ScF₃ (Pm-3m), как бинарные (например, TaF₃, NbF₃, MoF₃), так и тернарные (например, AgZnF₃, LiBaF₃, RbCaF₃). Для данных соединений были рассчитаны (с помощью пакета программного обеспечения MedeA [3]) фоновые спектры и вычислены спектры параметров Грюнайзена по формуле (2). Основываясь на полученных спектрах, были выделены соединения, теоретически способные продемонстрировать эффект ОТР, которые будут более подробно изучены в дальнейшем.

1. Chen W. Li, Xiaoli Tang, J.B.Keith et al. PhysRevLett., 2011, 107, 195504.
2. Cody R. Morelock, Benjamin K. Greve, Leighanne C. Gallington et al. Journal of Applied Physics, 2013, 114, 213501.
3. MedeA® and Materials design®, 2013, www.materialsdesign.com.

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ФАЗ СИСТЕМЫ Sm-Sr-Fe-O

Зубаткина Л.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
lada.zubatkina@yandex.ru

Целью настоящей работы является исследование фазовых равновесий в системе Sm-Sr-Fe-O, а также изучение кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии и физикохимических свойств индивидуальных соединений, образующихся в данной системе.

Синтез образцов проводили по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CellRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008». Кислородную нестехиометрию (δ) сложных оксидов $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ ($x=0-0.5$) и $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4\pm\delta}$ ($y=0.8$) изучали методом термогравиметрического анализа (ТГА) как функцию температуры (в интервале 25 – 1100°C) на воздухе. Измерения относительного увеличения размера образцов $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ ($0 \leq x \leq 0.5$) с ростом температуры проводили в температурном интервале 25 – 1100°C при $p_{O_2} = 0.21$ атм.

Согласно результатам РФА закаленных образцов в системе Sm-Sr-Fe-O при 1100°C на воздухе образуются три типа твердых растворов: $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$, $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4\pm\delta}$ и $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$.

Кристаллическая структура незамещенного феррита стронция $SrFeO_{3-\delta}$ удовлетворительно описывается в тетрагональной ячейке (пр. гр. $I4/mmm$), а твердых растворов на его основе $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ ($0.1 \leq x \leq 0.50$) – в кубической (пр. гр. $Pm\bar{3}m$). Рентгенограммы образцов $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ ($0.85 \leq x \leq 1.0$), подобно недопированному $SmFeO_{3\delta}$, были обработаны в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. $Pbnm$). Сложные оксиды $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4\pm\delta}$ ($0.7 \leq y \leq 0.8$) имеют структуру типа K_2NiF_4 , кристаллизуются в тетрагональной ячейке пространственной группы $I4/mmm$. Ферриты $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$ ($0 \leq z \leq 0.30$) имеют тетрагональную ячейку (пр. гр. $I4/mmm$). Из рентгенографических данных рассчитаны параметры элементарной ячейки всех однофазных оксидов.

Абсолютное значение кислородного дефицита определяли методами прямого восстановления образцов в токе водорода и окислительно-восстановительного титрования. Показано, что величина кислородной нестехиометрии δ уменьшается с увеличением содержания самария в $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$. Соединение $Sr_{1.2}Sm_{0.8}FeO_4$ является строго стехиометричным по кислороду во всем исследованном интервале температур.

Показано, что с увеличением концентрации допанта в $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ значение КТР незначительно уменьшается.

Исследована химическая совместимость сложных оксидов $Sr_{1-x}Sm_xFeO_{3-\delta}$ ($x=0-0.5$) и $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4\pm\delta}$ ($y=0.8$) с материалом электролита топливного элемента в температурном интервале 800-1100°C. Показано, что твердые растворы указанных составов нельзя использовать в качестве электродов топливных элементов, где электролитом является стабилизированный оксид циркония. Если в качестве электролита выступает стабилизированный оксид церия $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{2-\delta}$, то использование электродов из данных материалов возможно при температурах, не превышающих 1100°C.

По результатам РФА всех исследуемых образцов, закаленных на комнатную температуру, предложен изобарно-изотермической разрез диаграммы состояния системы SmSrFeO при 1100°C на воздухе.

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА САЖЕНАПОЛНЕННЫХ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Ибатуллин И., Магсумова А.Ф.

Казанский национальный исследовательский технический университет

им. А.Н.Туполева – КАИ, Казань

ibatullinildar@mail.ru, ajzamags@mail.ru

Одной из сфер применения углеродных саж в технологии производства лакокрасочных, строительных материалов, синтетических волокон, парфюмерной промышленности является необходимость достижения интенсивного черного цвета изделий. Кроме того их введение позволяет обеспечить устойчивость материалов к действию ультрафиолетового излучения, замедляя при этом процесс старения, однако сажа сильно повышает вязкость композиций.

Целью данной работы было достижение эффекта окрашивания эпоксидных связующих в интенсивный черный цвет путем введения в их состав технического углерода (сажи) с незначительным повышением вязкости композиций. В качестве наполнителей были выбраны следующие марки саж, отличающиеся способами получения, активностью, показателем дисперсности и структурности: канальный (диффузионный) технический углерод марки К354 (гранулированный); печной техуглерод - П234, П701, П514 (гранулированный); термический техуглерод – Т900 (негранулированный) (ГОСТ 7885-86). Степень наполнения эпоксидных составов техуглеродом варьировалась от 5 до 50%. Основой для наполнения являлись низковязкие эпоксидные смолы отечественного производства - ЭД-22.

Реологические свойства саженаполненных эпоксидных композиций при разных температурах изучали на ротационном динамическом реометре «Reostress» 6000 фирмы Хаак при различных скоростях сдвига. Изменение плотности дисперснонаполненных эпоксидных составов определяли пикнометрическим методом. Оптические свойства композиций изучали по изменению показателя преломления в результате наполнения на рефрактометре ИРФ-22.

Проанализировано влияние дисперсности, показателя структурности частиц техуглерода различных марок, степени наполнения на реологию, плотность и оптические свойства саженаполненных связующих.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСА 1-ГЕКСАДЕЦИЛ-4-АЗА-1-АЗОНИАБИЦИКЛО[2.2.2]ОКТАН БРОМИДА С ИОНОМ МЕДИ(II) ([CuBr₂DABCO-16])

Ибатуллина М.Р.^a, Кутырева М.П.^a, Улахович Н.А.^a, Жильцова Е.П.^b, Захарова Л.Я.^b,
Катаева О.Н.^b, Зиганшина С.А.^c

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

^c Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского, Казань
marina_ibatullina@mail.ru

Одним из наиболее перспективных направлений в современное время является создание веществ с прогнозируемыми свойствами. Перспективными объектами для этой цели являются металлокомплексы с амфифильными лигандами, которые находят применение в однородном и гетерогенном катализе расщепления фосфодиэфирных связей, медицине (имитируют активный центр и гидрофобную микросреду природных гидролаз), в качестве наноконтейнеров для транспортировки лекарственных веществ, мезопористых материалов, тонкопленочных устройств.

Для оценки возможностей практического применения комплекса 1-гексадецил-4-аза-1-азониабцикло[2.2.2]октан бромида с ионом меди(II) ([CuBr₂DABCO-16]) проведено исследование его физико-химических свойств. Методом рентгеноструктурного анализа была доказана структура комплекса Cu(II) с DABCO-16. Атом меди в данном комплексе имеет координацию тригональной бипирамиды с координационным числом 5. Исследованием самоорганизации водных растворов DABCO-16 и [CuBr₂DABCO16] доказано существование мелких (порядка 1-9 нм) и крупных (в пределах 150-300 нм) агрегатов. Наличие двухфазной системы в лиганде и комплексе подтверждено методом атомно-силовой микроскопии. С помощью метода флуоресцентной спектрофотометрии была определена ККМ комплекса, которая составила 5.23×10^{-4} М. Числа агрегации для водных растворов с концентрациями 1×10^{-3} М, 4×10^{-3} М, 8×10^{-3} М равны, соответственно, 25, 31 и 29.

РАСЧЕТ СПЕКТРА ЯМР В ПОРОШКАХ

Ившин К.А., Егоров А.В.

Институт физики КФУ, Казань
 kamil.ivshin@yandex.ru

Многие материалы доступны только в форме порошка или керамики. Помимо этого существует ряд причин, из-за которых физикам необходимо использовать порошковые образцы в ЯМР-исследованиях. Но использование таких образцов вызывает некоторые сложности. Из-за того что порошки состоят из множества случайно ориентированных частиц, квадрупольное расщепление делает спектр ЯМР очень широким и сложным для анализа [1-3]. В данной работе был построен алгоритм численного моделирования спектров ЯМР в порошке.

В данном алгоритме было рассмотрено не только расщепление энергетических уровней, но также вероятности переходов под воздействием радиочастотного возмущения. Кроме этого было учтено равновероятное распределение порошинок по телесному углу [4]. Для отладки алгоритма и подтверждения правильности выбранного нами метода моделирования, был рассчитан порошковый спектр ЯМР изотопов меди ^{63}Cu , ^{65}Cu : системы с ядерным спином $I=3/2$, представленный на рисунке 1. Совокупность всех кривых полностью описывает экспериментальный спектр меди в образце $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [5]. Данный алгоритм пригоден для произвольного гамильтониана.

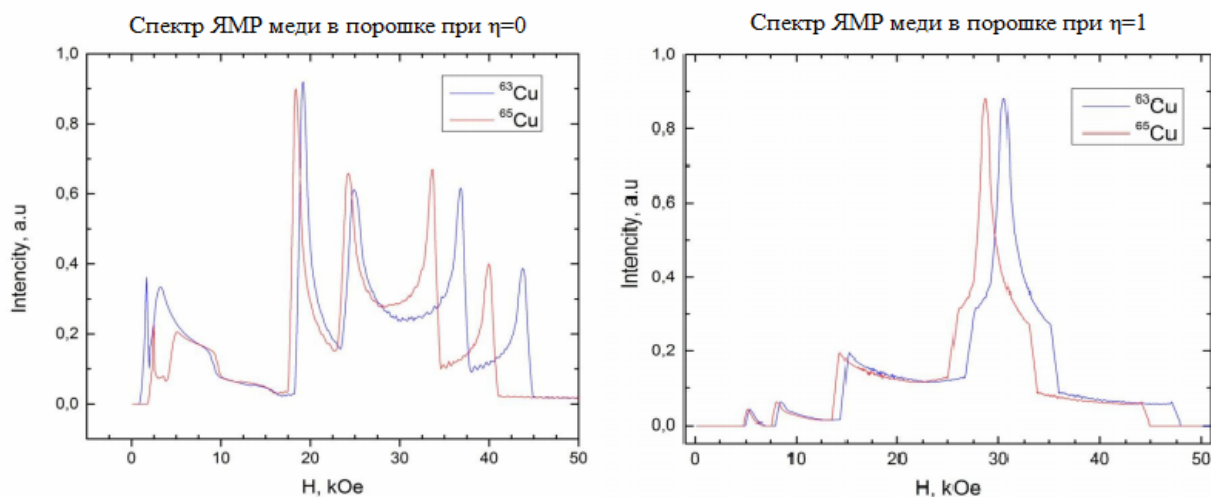


Рисунок 1. Спектры ЯМР меди в порошке при различном параметре асимметрии η . Моделирование проводилось для частоты $\nu=34,5$ МГц.

ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ АКТИВИРОВАННЫХ АЛКИНОВ

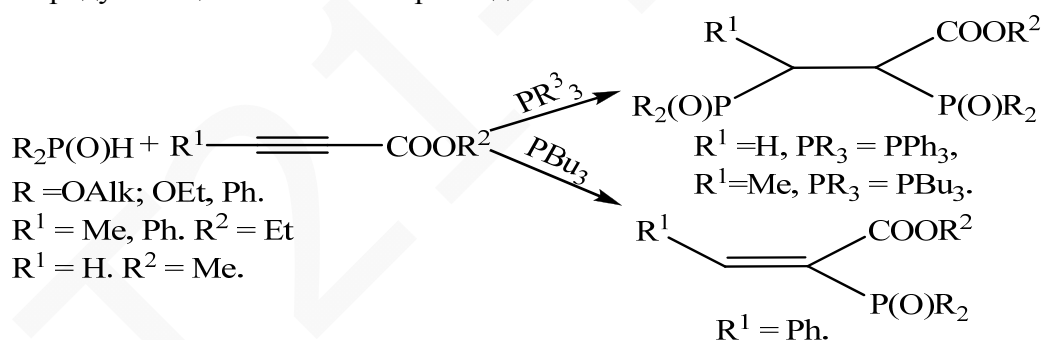
Ильин А.В., Фатхутдинов А.Р., Шамсутдинова Ф.Г., Салин А.В.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Antonilin.1989@mail.ru*

Известно, что третичные фосфины обладают необычной особенностью менять направление реакций нуклеофильного присоединения к активированным алкинам с классического β -присоединения на присоединение по α -углеродному атому [1]. Нам представлялось интересным изучить реакции присоединения гидрофосфорильных соединений (ГФС) к активированным алкинам в присутствии третичных фосфинов.

Первоначально была изучена реакция диэтилфосфита с этиловым эфиром фенилпропиоловой кислоты. Для данной реакции оба возможных продукта (α - и β -присоединения), полученные иными способами, были описаны ранее. При катализе реакции трибутилфосфином был получен продукт, спектральные характеристики которого оказались полностью идентичными этил-2-(диэтоксифосфорил)-3-фенилакрилату, свидетельствуя о присоединении по α -атому углерода. Аналогичным образом, то типу α -присоединения, протекают реакции данного алкина с другими ГФС.

При проведении реакции диэтилфосфита с метилпропиолатом в присутствии трифенилфосфина оказалось, что независимо от молярного соотношения реагентов основным продуктом реакции всегда является метил-2,3-бис(диэтоксифосфорил) пропаноат, образовавшийся в результате вицинального присоединения двух молекул диалкилфосфита. Основным продуктом реакции этилового эфира метилпропиоловой кислоты с диэтилфосфитом так же являлся продукт вицинального бисприсоединения.



1. B. M. Trost, G. R. Dake. J. Am. Chem. Soc., 1997, 119, 7595–7596.

СТРОЕНИЕ АМФИФИЛЬНЫХ СОЛЕЙ ФОСФОНИЯ В КРИСТАЛЛЕ

Исламов Д.Р.^a, Катаева О.Н.^{a,b}, Криволапов Д.Б.^b, Ермолаев В.В.^b, Архипова Д.М.^b,
Милюков В.А.^b

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

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
daut1989@mail.ru

Фосфониевые соли с алифатическим фрагментом являются перспективными соединениями, благодаря проявлению биологической активности и возможности использования в доставке лекарственных средств.

В данной работе определена кристаллическая структура 7 новых соединений, показанных на рисунке 1. Изучено взаимодействие три-*трет*-бутил замещенных катионов фосфония с различными анионами и выявлена закономерность строения кристаллов амфифильных фосфониевых солей.

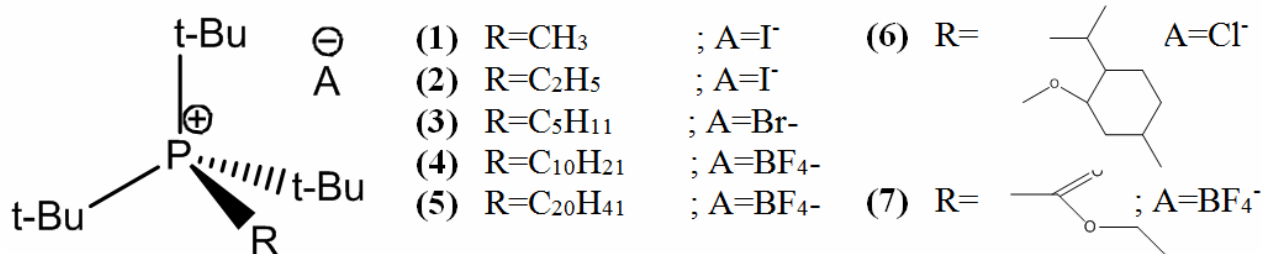


Рисунок 1. Структурная формула, заместители, и анионы 7 рассмотренных соединений.

В рассмотренных солях катион фосфония окружают либо 4, либо 6 анионов. Например, катионы фосфония в соединении 1 окружают шесть анионов, два со стороны метильного заместителя, два со стороны *трет*-бутильных заместителей и два аниона между *трет*-бутильными заместителями. Оптимизация геометрии ионной пары метил-три-*трет*-бутилфосфония и иодид иона показала 4 энергетически неэквивалентных положения аниона относительно катиона. Наименьшей по энергии геометрии ионной пары соответствует положение аниона со стороны заместителя R, реализующаяся во всех рассмотренных соединениях. В кристаллах 1 это положение аниона соответствует расстоянию P...I= 5,173(2) Å и выгоднее на 26 кДж/моль, по сравнению с положением со стороны *трет*-бутильных заместителей с расстоянием P...I равным 5,911(2) Å.

Таким образом, рассмотрев строение амфифильных солей фосфония в кристалле, можно прийти к следующему выводу. Несмотря на различные заместители, анионы и способ упаковки молекул в кристалле, анион располагается со стороны заместителя R катиона фосфония.

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.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВЫХ КОМПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА ПИЦЕН-F₄-TCNQ

Исламов Д.^a, Катаева О.^a, Mahns В.^b, Hampel S.^b, Knupfer M.^b, Büchner В.^b

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

^b IFW Dresden, Germany

daut1989@mail.ru

Возобновление интереса к органическим комплексам с переносом заряда связано как с фундаментальными вопросами о природе новых электронных состояний, так и с их новым применением в молекулярной электронике. В качестве молекул донора в последнее время активно применяются полиароматические углеводороды, в том числе и пицен. В 2012 году получен сверхпроводник на основе пицена с интеркалированными щелочными металлами.

В данной работе представлены результаты исследования новых комплексов с переносом заряда пицен- F₄TCNQ (1:1) методами квантовой химии и РСА.

Пицен с F₄TCNQ образуют смешанные кристаллы состава 1:1. В кристалле образуются стопки, в которых чередуются молекулы донора и акцептора (рисунок 1). Молекулы пицена и F₄TCNQ – плоские, плоскости молекул практически параллельны друг другу. Среднее расстояние между F₄-TCNQ и пиценом составляет 3.28 Å, что значительно меньше межплоскостного расстояния 3.5 Å, характерного для стэкинг-взаимодействия. Пицен и F₄TCNQ имеют близкие минимальные размеры, в то время как их максимальные размеры различны и примерно равны 13 и 9 Å, соответственно. Для компенсации этих различий стопки располагаются парами, что обеспечивает плотную упаковку.

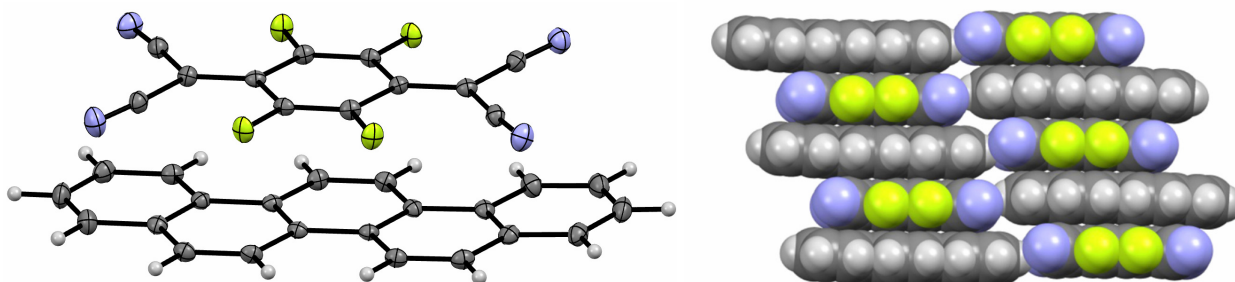


Рисунок 1. Структура системы пицен-F₄TCNQ в кристалле.

Согласно квантовохимическим расчетам разница между энергиями высшей занятой молекулярной орбитали пицена и низшей свободной молекулярной орбитали F₄-TCNQ мала, что способствует их эффективному взаимодействию. Перенос заряда в данном кристалле составляет примерно 0.2 e по результатам оценки, проведенной по перераспределению длин связей в молекуле F₄-TCNQ [1].

1. Kistenmacher, T. J.; Emge, T. J.; Bloch, A. N. et al. Acta Crystallogr. 1982, B38, 1193-1199.

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ И АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДОФАМИНА И АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ ПРИ СОВМЕСТНОМ ПРИСУТСТВИИ НА ЭЛЕКТРОДЕ С ПЛЕНКОЙ ИЗ ГЕКСАХЛОРОПЛАТИНАТА МЕДИ

Ишназарова Л.Р., Жалдак Э.Р., Гедмина А.В., Челнокова И.А. Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Химический институт им. А.М. Бутлеров КФУ, Казань
E.hafizova@gmail.com*

Использование химически модифицированных электродов (ХМЭ), функционирующих на основе принципов медиаторного электрокатализа, позволяет значительно повысить не только чувствительность, но и селективность вольтамперометрического определения широкого круга органических соединений, в том числе биологически активных.

Изучены электрокаталитические свойства полимерной неорганической пленки из гексахлороплатината меди (CuPtCl_6), электроосажденной на поверхности электрода из стеклоуглерода (СУ), при окислении дофамина (ДА) и аскорбиновой кислоты (АК) с целью разработки высокочувствительного и селективного вольтамперометрического способа их определения при совместном присутствии.

Иммобилизованная пленка CuPtCl_6 проявляет каталитическую активность при электроокислении ДА и АК. Каталитический эффект выражается в многократном увеличении тока окисления субстратов по отношению к току окисления модификатора, а также в уменьшении перенапряжения окисления субстратов по сравнению с немодифицированным СУ. Электроокисление ДА и АК происходит при разных потенциалах, что позволяет разработать способ селективного определения этих соединений при совместном присутствии. Разработан способ селективного вольтамперометрического определения ДА и АК на этом ХМЭ при их совместном присутствии в растворе. Нижняя граница определяемых содержаний ДА составляет 5×10^{-6} М. Показана возможность использования ХМЭ на основе пленки CuPtCl_6 для амперометрического детектирования ДА и АК в условиях проточно-инжекционного анализа (ПИА). Изучена зависимость ПИА-сигнала от гидродинамических и электрохимических параметров проточной системы. Использование ПИА позволило автоматизировать процесс анализа, увеличить его производительность и на порядок уменьшить предел обнаружения аналитов по сравнению со стационарными условиям – до 5×10^{-7} М.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-97031).

ТЕПЛОСТОЙКИЕ ЭПОКСИДНЫЕ СВЯЗУЮЩИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМБИНИРОВАННЫХ АМИННЫХ ОТВЕРДИТЕЛЕЙ

Карамова А.И.^{а,б}, Амирова Л.М.^{а,б}

^а *КНИТУ им.А.Н.Туполева, Казань*

^б *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань*
inga230193@mail.ru

Для получения теплостойких эпоксидных связующих наиболее оптимально использование ароматических аминов в качестве отвердителей. Однако все ароматические амины являются твердыми кристаллическими соединениями с температурой плавления свыше 70 °С и плохо растворимы в эпоксидных олигомерах. Поэтому актуальной задачей является снижение температуры плавления и улучшение растворимости подобных систем. Одним из возможных путей достижения указанной задачи является применение смесей различных ароматических аминов и других соединений. Однако в литературе сведения по данному вопросу крайне ограничены.

Целью работы являлось исследование фазовых диаграмм двойных систем на основе ароматических аминов, а также изучение процесса отверждения эпоксидных олигомеров эвтектическими смесями.

В качестве объектов исследования были взяты следующие ароматические амины: 4,4'-диаминодифенилметан, 4,4'-диаминодифенилсульфон, 4,4'-диаминодифенилоксид, орто, пара, и мета-фенилендиамины. В качестве эпоксидного олигомера использовали эпоксиноволачные смолы: NPPN-631. NPPN-638,

Исследования выполняли на дифференциально-сканирующем калориметре DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия). Вязкость и жизнеспособность композиций определяли на реометре НААКЕ RheoStress RS6000. Степень конверсии эпоксидных групп находили с помощью ИК-спектроскопии на приборе TENSOR 27 с фурье-преобразованием.

По данным ДСК были определены составы эвтектических смесей и получены соответствующие им температуры плавления. Эвтектические составы использовали для отверждения эпоксидных олигомеров. Показана возможность снижения температуры и улучшения технологичности процесса отверждения эпоксидных олигомеров эвтектическими смесями ароматических аминов. Изучены теплофизические свойства эпоксиаминных полимеров, получены теплостойкие связующие для композитов.

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.

НОВОЕ САМОВОССТАНАВЛИВАЮЩЕЕСЯ ЭПОКСИДНОЕ СВЯЗУЮЩЕЕ НА ОСНОВЕ ТЕРМООБРАТИМОЙ РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА

Копицына М.Н., Карелина Н.В., Бессонов И.В.

*Межотраслевой инжиниринговый центр «Композитные материалы»
при МГТУ имени Н.Э. Баумана, Москва
nataliya.karelina@emtc.ru*

Самовосстанавливающиеся материалы обладают способностью при термообработке без участия человека восстанавливать механические свойства после механических и термических повреждений, благодаря своей структуре. Термообратимая реакция Дильса-Альдера является достаточно простым и удобным способом для создания самовосстанавливающихся связующих.

В настоящей работе мы остановились на обратимой реакции 4+2 циклоприсоединения между парой фуран-малеимид. Прямая реакция Дильса-Альдера между различными фурановыми соединениями и замещенными малеимидами обычно протекает в области 20-70 °С, обратная – 90-130°С, что позволяет рассчитывать на создание материала, отверждаемого при относительно невысоких температурах с термостойкостью, превышающей 100 °С. Для получения связующего с возможностью самовосстановления, было синтезировано и полностью охарактеризовано методами ИК- и ЯМР-спектроскопии эпоксидное связующее, содержащее фурановый фрагмент. Был разработан ряд многокомпонентных эпоксидных композиций. В композициях мы использовали 1,1'-(метилendi-4,1-фенилен)бисмалеимид и несколько ангидридных отвердителей, таких как метилтетрагидрофталевый и гексагидрофталевый.

Протекание прямой и обратной реакции Дильса-Альдера было подтверждено методами ДСК и ИК-Фурье спектроскопии. Полученное эпоксидное связующее обладает способностью самовосстановления при определенном температурном режиме, что позволило устранить специально сделанные в нем трещины. Этот материал потенциально обладает широким спектром применений.

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ ПОЛИПРОПИЛЕНА ЕГО СВОЙСТВА

Карноухов В.Е., Хайруллин Р.З.

ФГБОУ ВПО «КНИТУ», Казань
khayrullinz@gmail.com

Полипропилен (ПП) – крупнотоннажный термопластичный полимер, который перерабатывают в изделия различными методами переработки полимеров (литьё под давлением, экструзия). Одной из важнейших характеристик, определяющей комплекс его свойств, является молекулярная масса (ММ). От значения ММ полимера во многом зависят его реологические и физико-механические характеристики. Поэтому представляет существенный практический интерес установить взаимосвязь между значением ММ ПП и его свойствами.

Для проведения исследований был взят ряд ПП с различных ММ, поставленный компанией Sigma-Aldrich Corporation. Установлена четкая корреляция между значением ММ ПП и его физико-механическими свойствами (разрушающее напряжение при растяжении (σ_p) и относительное удлинение при разрыве (ϵ)), а также показателем текучести расплава (ПТР) (таблица 1).

Таблица 1 – Физико-механические и реологические свойства ПП, различных ММ

Условное обозначение	σ_p , МПа	ϵ , %	ПТР, г/10мин (230°C; 2,16 кг)
ПП190	30,5	16	17,2
ПП250	35,5	19	9,1
ПП340	32,2	15	3,5
ПП580	31,9	1049	0,4

Можно видеть, что наибольшее влияние ММ оказывает на вязкость расплава ПП, а также его эластические характеристики, что можно объяснить, вероятно, увеличением длины макромолекул ПП с ростом его ММ, а также увеличением разветвленности макромолекул ПП, что оказывает существенное влияние на характер течения расплава.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА ОСОБЕННОСТЕЙ ДОПИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ РУТИЛА ИОНАМИ КОБАЛЬТА

Касимов Д.З., Гильмутдинов И.Ф., Киямов А.Г.

*Институт физики КФУ, Казань
realnippo22@gmail.com*

Кристаллы рутила TiO_2 , допированные кобальтом, относятся к классу магнитных полупроводников - материалов, обладающих как свойствами ферромагнетика, так и свойствами полупроводника. Столь высокий интерес к магнитным полупроводникам обусловлен широкими перспективами использования в полупроводниковой спинтронике [1]. Сам по себе рутит является немагнитным материалом, однако имплантированные кобальтом тонкие пленки TiO_2 демонстрировали ферромагнетизм при температурах до 400 К [2]. На сегодняшний день доподлинно неизвестно, является ли существование магнитного порядка результатом особенностей структуры рутила, либо магнитное упорядочение являлось следствием ограниченной геометрии образца [2]. Исследование магнитных свойств объемного образца рутила, допированного кобальтом, может пролить свет на данный вопрос.

Кристаллы рутила с содержанием кобальта 0,1% и 1% были выращены методом оптической зонной плавки (FZ-T-4000-N-VII-VPO-PC, Crystal System Corporation). Полученные кристаллы были неоднородны по цвету, что может свидетельствовать о различном содержании ионов кобальта и кислородных вакансий в разных частях образца. Для исследования особенностей допирования рутила ионами кобальта разные части кристалла исследовались методом рентгеноструктурного анализа. Полученные результаты подтверждают неравномерное распределение кобальта по образцу и могут быть использованы для выделения допированной кобальтом части образца и оценки степени допирования.

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

1. Y. G. Joh, H. D. Kim, C. R. Cho. Journal of the Korean Physical Society, 2004, 44(2), 360–364.
2. S.M. Koohpayeh, D. Fort, A.I. Bevan, A.J. Williams, J.S. Abell. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2008, 320, 887–894.

НАНЕСЕНИЕ СЕРЕБРЯНОЙ ОБОЛОЧКИ НА ДИОКСИД КРЕМНИЯ

Катнова Р.Р., Степин С.Н., Катнов В.Е.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
Rimza1988@mail.ru*

В данной работе было проведено исследование, направленное на получение наночастиц (НЧ) со структурой «ядро из диоксида кремния –оболочка из серебра». Процесс получения НЧ диоксида кремния с серебряной оболочкой осуществляли двумя способами в несколько стадий. В качестве ядра использовались НЧ SiO_2 в виде водного золя, полученные газофазным методом [1] на высокочастотной индукционной плазменной установке при атмосферном давлении. Прекурсором серебряной оболочки служил нитрат серебра, для стабилизации и закрепления НЧ на поверхности ядра в процессе синтеза по первому способу использовали полиакриловую кислоту (ПАК), по второму аминопропилтриметоксисилан (АПТМС). Процесс образования композиционных НЧ (КНЧ) со структурой «ядро-оболочка» контролировали методами динамического рассеивания света и электронной микроскопии.

Процесс получения КНЧ на первой стадии предусматривал обработку НЧ SiO_2 стабилизирующим веществом с целью его адсорбции на поверхности. Затем в смесь приливался раствор аммиачного комплекса серебра $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$, при нахождении которого вблизи НЧ SiO_2 происходило образование серебряной оболочки на его поверхности. Процесс восстановления серебра сопровождался постоянным облучением смеси ультрафиолетовой лампой и периодической обработкой ультразвуковым полем.

Исследования показали возможность получения КНЧ со структурой «ядро-оболочка» описанными методами. Однако изучение свойств, синтезированных КНЧ выявило необходимость оптимизации процесса нанесения серебряной оболочки на поверхность наночастиц. Применение полученных КНЧ в оптических и биологических приложениях показали их перспективность.

1. Катнов В.Е., Петрова Е.В., Степин С.Н., Дресвянников А.Ф., Гафаров И.Г. Вестник Казанского технологического университета, 17, 220-222 (2011).

^1H ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ПАРАМАГНИТНЫХ РАСТВОРОВ СПИН-ПЕРЕМЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ Fe(III) С ПРОИЗВОДНЫМИ ОСНОВАНИЙ ШИФФА

Клышева Э.Р., Конов А.Б.

КФТИ КазНЦ РАН, Казань
sun_moonlove@mail.ru

Целью работы является изучение магнитных свойств растворов парамагнитных комплексов железа (III), а именно: регистрация спинового перехода в исследуемых системах. Интерес к изученным системам связан с потенциальной возможностью создания новых материалов, обладающих уникальной способностью - изменять магнитный момент иона внешними воздействиями.

Для регистрации спинового перехода использована спектроскопия ядерного магнитного резонанса на ядрах водорода (^1H ЯМР), а именно наблюдение температурной зависимости резонансного сигнала растворителя парамагнитного комплекса в спектрах ЯМР (метод Эванса).

Спиновый переход приводит к изменениям в электронной структуре парамагнитного комплекса (d-орбиталь), наблюдаемым как изменение цвета и, что самое важное, магнитного момента вещества. В методе Эванса в основную ампулу помещается раствор исследуемого образца (парамагнитный), а во внутренний коаксиальный капилляр – чистый растворитель. В спектре наблюдаются две линии от растворителя: одна от чистого растворителя в капилляре, а вторая от растворителя, находящегося в растворе с парамагнитным образцом, смещенная в сторону высоких полей.

Исследованы четыре комплекса железа (III) – $[\text{FeSaltenPic}]\text{BPh}_4$, $[\text{FeSaltenHim}]\text{BPh}_4$, $[\text{FeAcen}(\text{Imd})_2]\text{BF}_4$, $[\text{Fe}_2\text{Salten}_2\text{Bpy}](\text{NO}_3)_2$, где Salten – N,N'-бис(2-окси-4-октадецилоксибензалиден)-1,7-диамино-4-азагептан, Acen – N,N'-бис(1-метил-3-оксобутилиден)этилендиамин, Pic - 4-метилпиридин, Him - имидазол, Imd - 4-метилимидазол, Bpy - 4,4'-бипиридин, NO_3 - нитроанион, BPh_4 - тетрафенилборат анион.

Измерения проводились на спектрометре Bruker Avance 400 в ампулах диаметром 5 мм методом ССИ (90° -ССИ) с последующим преобразованием Фурье. Частота резонанса 400 МГц, длительность 90° импульса 9.50 мкс, задержка перед применением каждого импульса для достижения протонами равновесной ориентации была 5.00 с, в диапазоне температур от 253 до 323 К с шагом в 5 К. С изменением температуры наблюдается смещение положения линий исследуемого образца вследствие изменения объемной магнитной восприимчивости парамагнитного раствора. Положение линии от чистого растворителя не меняется, так как относительно нее нормировалась шкала химических сдвигов.

В результате проведенных экспериментов во всех четырех изученных комплексах, $[\text{FeAcen}(\text{Imd})_2]\text{BF}_4$, $[\text{Fe}_2\text{Salten}_2\text{Bpy}](\text{NO}_3)_2$ и $[\text{FeSaltenPic}]\text{BPh}_4$, $[\text{FeSaltenHim}]\text{BPh}_4$, обнаружен размытый в широком температурном интервале спиновый переход.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КВАЗИКРИСТАЛЛОВ СИСТЕМЫ Al-Co-Cu

Клюева М.В., Шулятев Д.А., Козловская Н.А., Шакин А.А.

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», кафедра
теоретической физики и квантовых технологий, Москва
23sh82vd@gmail.com*

Особенность сочетания в структуре декагональных квазикристаллов периодических и аperiodических направлений, позволяет с высокой степенью достоверности исследовать влияние квазикристалличности на ряд физических свойств. Декагональные квазикристаллы представляют из себя десятиугольную призму, вдоль оси которой периодическим образом уложены квазипериодические плоскости.

Разработана методика позволяющая получать декагональные монокристаллы системы Al-Co-Cu из области перетектоидного превращения длиной до 2 мм. и толщиной до 1 мм. путём кристаллизации из раствора в расплаве с уменьшающейся скоростью охлаждения. Также подобрана термообработка для получения поликристаллических образцов той же системы.

На данный момент рассмотрены предварительные измерения электросопротивления монокристаллов Al-Co-Cu в диапазоне температур от 4 до 300 К и магнитных полях до 9 Тл в периодическом и аperiodическом направлениях. При температуре около 100 К и полях начиная с 5 Тл наблюдается небольшой скачок электросопротивления, предположительно связанный с наличием в образце магнитных примесей.

Работа выполнена при поддержке проектов: РФФИ № 14-02-01100-а, РФФИ № 14-02-92706 ИНД_а, грант № 14.Y26.31.0005.

ПАРОПРОНИЦАЕМОСТЬ ПЛЕНОК ПОЛИПРОПИЛЕНА РАЗЛИЧНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ

Князьков Н.А., Хайруллин Р.З.

ФГБОУ ВПО «КНИТУ», Казань
khayrullinrz@gmail.com

Полимерные пленочные материалы в последние годы находят широкое применение, в том числе для упаковки пищевых продуктов. Одной из фундаментальных характеристик полимера, определяющей его основные свойства, является молекулярная масса. Представляет практический интерес установление зависимости комплекса свойств полимерного материала от его молекулярной массы (ММ).

Для упаковочных материалов также важное значение имеет показатель паропрооницаемости (WVTR, $\text{г}/(\text{м}^2 \cdot 24\text{ч})$), который характеризует количество влаги, проходящее через поверхность упаковки площадью 1 м^2 за 24ч. В ходе работы была экспериментально установлена зависимость WVTR для пленок полипропилена (ПП) от значения его ММ.

Пленки для проведения экспериментов были получены из ПП различных молекулярных масс (Sigma-Aldrich) прессованием при температуре 230°C в течение 5 мин. Показатель паропрооницаемости определялся на приборе TSY-W3 (Labthink instruments) при температуре 38°C и 90%RH по стандартным методикам.

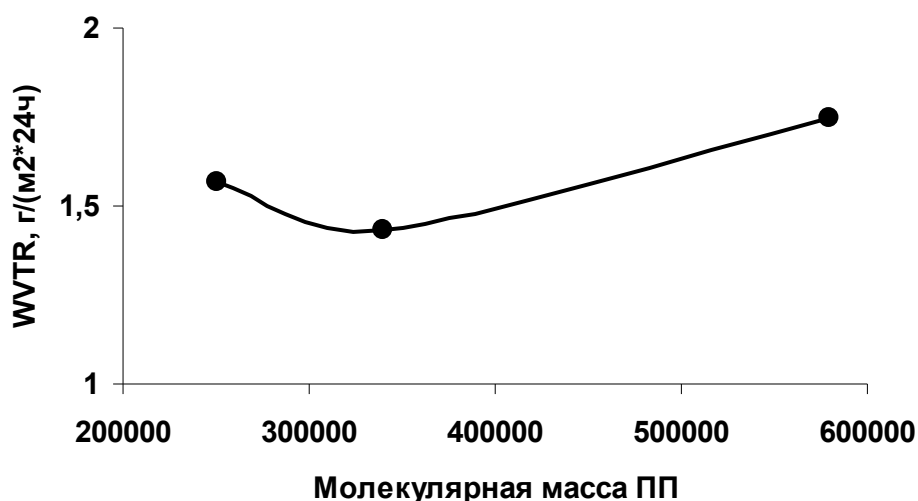


Рисунок 1 – Зависимость показателя паропрооницаемости от ММ ПП.

Установлено, что с ростом ММ ПП возрастает WVTR (рисунок 1), что, вероятно, связано с тем, что при увеличении ММ ПП упаковка его макромолекул в полимере становится менее упорядоченной, при этом образуются «поры», через которые могут свободно проходить молекулы воды.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ ВИН НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ПОЛИЭВГЕНОЛОМ

Козлова Е.В., Зиятдинова Г.К.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Kozlova.Ekaterina1992@mail.ru*

Виноградные вина содержат широкий круг фенольных антиоксидантов (АО), которые обеспечивают благоприятное воздействие на здоровье человека. Поэтому оценка антиоксидантных свойств вин представляет теоретический и практический интерес. Поскольку фенольные АО окисляются на поверхности электродов, то для оценки их содержания используют вольтамперометрию. В настоящее время для улучшения аналитических характеристик определения аналитов активно применяют химически модифицированные электроды.

Найдены условия электрополимеризации фенольного антиоксиданта эвгенола на стеклоуглеродном электроде, модифицированном многослойными углеродными нанотрубками (полиэвгенол/МУНТ/СУЭ). Показано, что созданный электрод проявляет в кислой среде электрокаталитическую активность по отношению к фенольным АО.

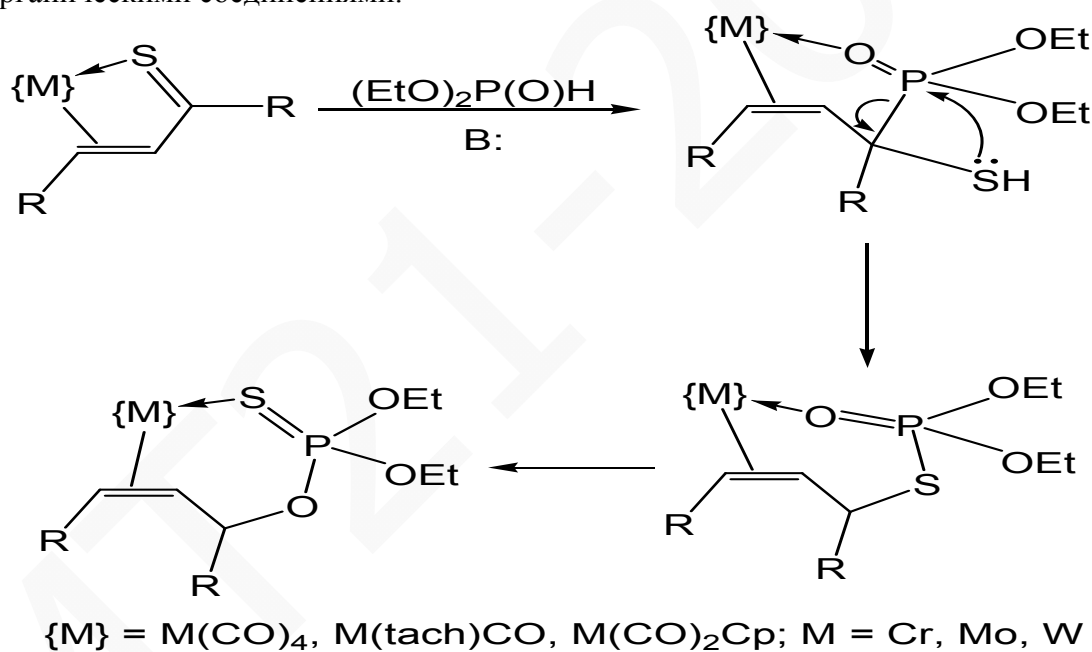
Установлено, что компоненты красных и белых сухих вин электрохимически активны в анодной области потенциалов на полиэвгенол/МУНТ/СУЭ в условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии на фоне 0.1 М HClO_4 . При этом на вольтамперограммах наблюдаются пики окисления при 0.52 В, а также слабовыраженная ступень окисления при 0.74 В для красных вин. Аналитические сигналы вин носят интегральный характер, что подтверждено методом стандартных добавок индивидуальных антиоксидантов. Пик окисления вин при 0.52 В можно использовать для оценки их антиоксидантной емкости (АОЕ), которую выражали в эквивалентах катехина в пересчете на 1 л вина. Величины АОЕ красных и белых вин достоверно отличаются. Установлены положительные корреляции АОЕ с общепринятыми параметрами, характеризующими антиоксидантные свойства вин: общим содержанием фенольных антиоксидантов ($r=0.9944$) и антиоксидантной активностью ($r=0.9840$). Разработанный способ можно применять для скрининга антиоксидантных свойств вин как альтернативный метод, характеризующийся простотой, доступностью и надежностью получаемых результатов.

**СИНТЕЗ π ,N-КОМПЛЕКСОВ 1-ТИО-1,3-ДИЕНОВ С МЕТАЛЛАМИ
ПОДГРУППЫ ХРОМА. ВНУТРИКООРДИНАЦИОННОЕ
ГИДРОФОСФОРИЛИРОВАНИЕ α -ЕНТИОНОВ**

Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Черкасов Р.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
argironet@gmail.com*

Получены новые 1-тио-1,3-диеновые комплексы хрома(0), молибдена(0) и вольфрама(0), в которых реализуется бидентатный способ координации α -ентионового лиганда с металлоцентром через π -систему двойной связи и НЭП серы гетеродиена. Неэмпирическими методами расчета оценены геометрические, электронные и энергетические параметры координированного 1-тио-1,3-диена, установлены факторы, определяющие способ координации. Гидрофосфорилирование полученных металлоорганических соединений протекает по тиокарбонильной группе координированного гетеродиена; образующиеся при этом металлоорганические α -меркаптофосфонаты могут последовательно подвергаться внутрикоординационным меркаптофосфонат-тиолфосфатной и тиолфосфат-тионфосфатной перегруппировкам, протекающим с сохранением взаимодействия между металлоцентром и фосфорорганическими соединениями.



ОПТИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ЗАРОДЫШЕВЫХ КОРРОЗИОННЫХ ТРЕЩИН

Копицын Д.С., Тиунов И.А., Котелев М.С., Новиков А.А.

РГУ нефти и газа имени И. М. Губкина, Москва
kopicin.d@inbox.ru

Мониторинг коррозионных процессов на оборудовании нефтегазовой отрасли крайне важен для своевременной остановки на ремонт и предотвращения экологических катастроф. Перспективным способом диагностики коррозионных повреждений на ранних стадиях их возникновения является разрабатываемое в нашем университете контрастирование зародышевых трещин оптически активными наночастицами металлов.

Разрабатываемый способ диагностики основан на детектировании излучения наночастиц металлов, образующегося за счет фотолюминесценции и генерации второй гармоники при возбуждении наночастиц фемтосекундным лазером [1]. При помощи наночастиц различного размера можно осуществлять картирование пространственного распределения трещин на поверхности образца, а также дифференцировать поверхностные деформации от глубоких зародышевых трещин.

Важным условием применимости наночастиц золота и серебра для визуализации микротрещин является однородность размеров и формы наночастиц. Получение моодисперсных сферических наночастиц золота и серебра с размерами более 50 нм осуществлялось многостадийным зародышевым методом по Bastus *et al.* [2] с модификациями для подавления вторичной нуклеации наночастиц.

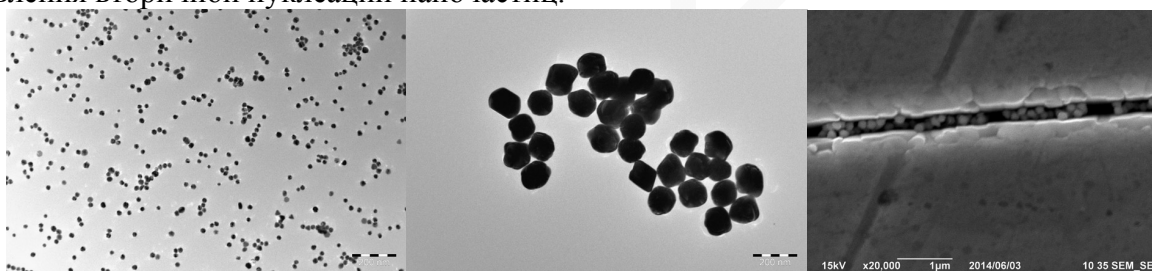


Рисунок 1 – Изображения наночастиц золота на второй (слева) и одиннадцатой (по центру) стадиях синтеза, а также контрастированная модельная микротрещина (справа)

Данный тезис подготовлен при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения базовой части государственного задания (проект №1256).

1. H.-D. Deng, G.-C. Li, Q.-F. Dai, M. Ouyang, S.Lan, V.A. Trofimov, T.M. Lysak. *Nanotechnology*, 24, 075201 (2013).
2. N.G. Bastus, J. Comenge, V. Puentes. *Langmuir*, 27, 11908-11105 (2011).

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА С ДОБАВКАМИ МОНТМОРИЛЛОНИТА МЕТОДОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Коржов А.А., Гусев Ю.А.

*Институт физики КФУ, Казань
Korzhov.a.a@mail.ru*

В современной жизни человек повсеместно использует композиционные материалы. Для получения специальных свойств материалов используют различные матрицы и наполнители. Один из самых распространенных типов матриц – полимерная матрица. В данной работе была измерена и проанализирована зависимость диэлектрической проницаемости композиционного материала на основе полиэтилена с разными по концентрации добавками монтмориллонита от частоты и температуры. Что бы в этом разобраться, в данной работе рассмотрены основы композиционных материалов, монтмориллонит [1] и полиэтилен, а также метод их исследования – диэлектрическая спектроскопия.

В ходе эксперимента на диэлектрическом спектрометре Novocontrol [2,3] был получен график зависимости логарифма времени релаксации от обратной температуры:

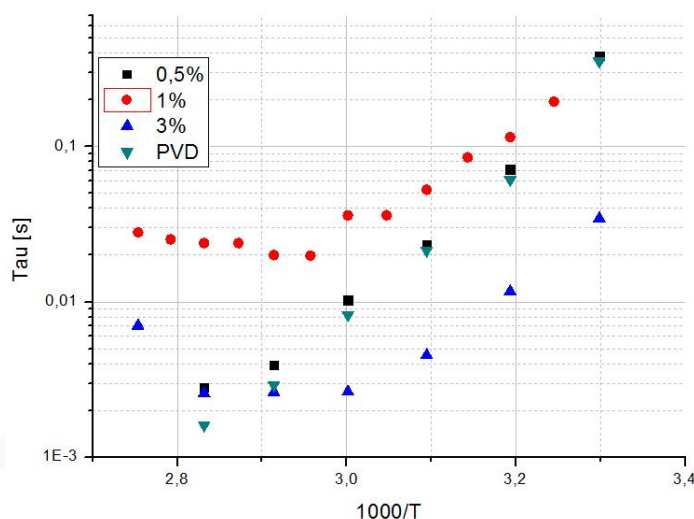


Рисунок 1. Зависимости логарифма времени релаксации от обратной температуры.

По коэффициенту наклона линейных частей графика были высчитаны энергии активации. При анализе численных значений энергии активации было замечено, что при увеличении процентного соотношения глины в полимере энергия активации убывает, материал меняет свойства. Вероятнее всего из-за этого полиэтилен с глиной менее хрупок, т.е. более пластичен.

1. M.A. Vasilyeva, Yu.A. Gusev, V.G. Shtyrilin, A. Greenbaum (Gutina), A. Puzenko, P. Ben Ishai, and Yu. Feldman Dielectric Relaxation of Water in Clay Minerals // *Clays and Clay Minerals*, Vol. 62(1),2014.P.62-73.
2. The Methodology of the Experiment on the Dielectric Spectrometer Novocontrol BDS Concept 80. Part 1. Dielectric Measurements from 10-5 Hz to 3•10⁹ Hz on the Dielectric spectrometer Novocontrol BDS Concept 80: Study guide / M.A.Vasilyeva, I.V. Lounev, Yu.A. Gusev. – Kazan: Kazan University, 2013.–P.65.
3. The Methodology of the Experiment on the Dielectric Spectrometer Novocontrol BDS Concept 80. Part 2. WinDETA 5.81 Software to Perform the Experiments from 10-5 Hz to 3•10⁹ Hz on the Dielectric Spectrometer Novocontrol BDS Concept 80: Study guide / M.A. Vasilyeva, I.V. Lounev, Yu.A. Gusev. – Kazan: Kazan University, 2013. – P. 52.

ЭФФЕКТ КУРКУМИНА НА БИСЛОИ ФОСФОЛИПИДОВ ПО ДАННЫМ 31P И 2H СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

Котенков С.А., Филиппов А.В., Гнездилов О.И., Мунавиров Б.В.

*Институт физики КФУ, Казань
kotenkov.sergey@gmail.com*

Куркумин - натуральный полифенол, получаемый из приправы куркумы, используется в азиатской традиционной медицине и как пищевая приправа. Интерес к куркумину вызван его антиоксидантными, противовоспалительными, противораковыми свойствами, так же в его присутствии наблюдается снижение амилоидных бляшек, характерных для болезни Альцгеймера [1]. Предположительно, такой широкий спектр фармакологических свойств куркумина вызван его способностью встраиваться в мембраны клеток так же, как холестерин, делая их более упорядоченными и устойчивыми к патогенным условиям.

Эксперименты, проведенные на везикулах ДОФХ (31P) и ДМФХ (2H и 31P) в присутствии куркумина, показали, что фосфорные и дейтериевые спектры имеют характерные формы для ламеллярной фазы липидов.

Результаты ЯМР спектроскопии липидных везикул показывают увеличение квадрупольного расщепления 2H ЯМР спектров липидов ДМФХ в присутствии куркумина в концентрации до 40 моль%.

Наличие куркумина в концентрации 5 моль% показывает увеличение квадрупольного расщепления 2H спектров от 1,73 кГц до 1,76 кГц, а наличие холестерина в той же концентрации увеличивает расщепление значительно больше (до 1,96 кГц). Скорее всего, это связано с разными областями их взаимодействия с молекулами липидов ДМФХ.

Результаты исследования 31P ЯМР показали, что некоторая часть липидных молекул имеет очень короткие времена релаксации. Вероятно, это связано с формированием жестких агрегатов в присутствии куркумина.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта 2.2792.2011 в рамках государственного заказа Казанского (Приволжского) федерального университета 2014г.

1. Darvesh, S. Curcumin and neurodegenerative diseases: a perspective / S. Darvesh, R. Carroll et al. // Expert Opin. Investig. Drugs. – 2012. – V. 21 (8). – P. 1123-1140.

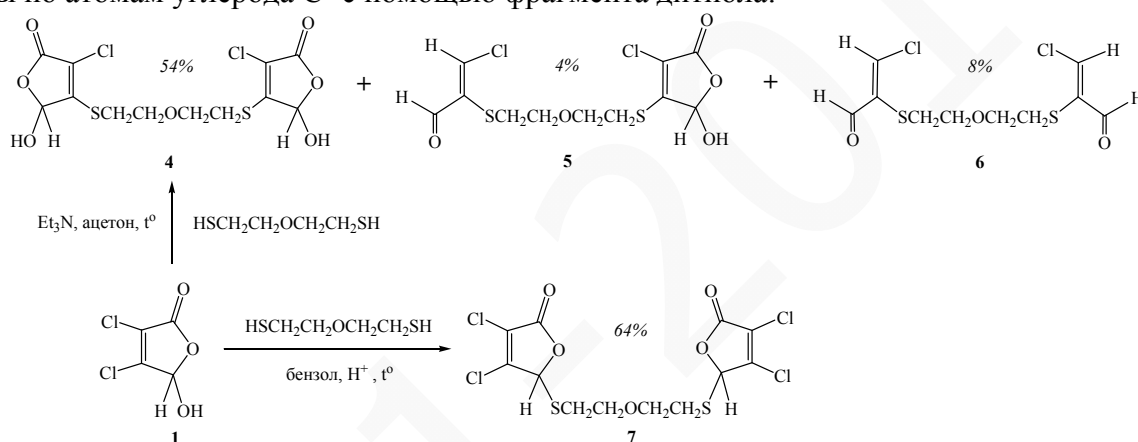
РЕАКЦИИ 3,4-ДИХЛОР-2(5H)-ФУРАНОНОВ С 2,2'-ОКСИДИЭТАНТИОЛОМ

Кузьмичева М.Ю.^a, Хоанг Тхи Лиен^a, Лодочникова О.А.^b, Чмутова Г.А.^a, Курбангалиева А.Р.^a

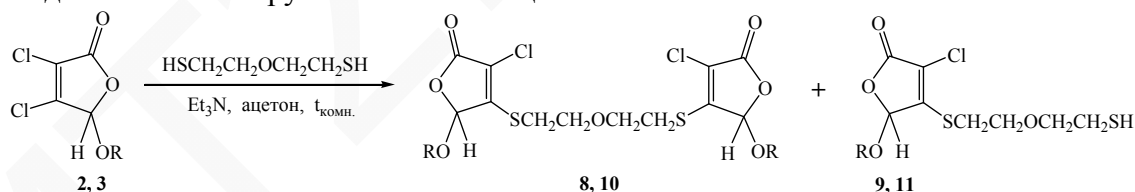
^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань
kuzmi4eva.ev@yandex.ru

Данная работа посвящена разработке препаративных методов синтеза новых тиопроизводных гетероциклов на основе полифункциональных субстратов ряда 3,4-дихлор-2(5H)-фуранона. Нами изучена реакционная способность фуранонов **1–3** по отношению к серосодержащему бинуклеофильному реагенту – 2,2'-оксидиэтантиолу. В условиях основного катализа мукохлорная кислота **1** реагирует с дитиолом с образованием смеси продуктов циклического и ациклического строения **4–6**, тогда как единственным продуктом кислотно-катализируемой реакции является бис-тиоэфир **7**, в молекуле которого два γ -лактонного цикла соединены по атомам углерода C⁵ с помощью фрагмента дитиола:



При взаимодействии 5-алкоксипроизводных **2** и **3** с 2,2'-оксидиэтантиолом в присутствии триэтиламина помимо ожидаемых бис-тиоэфиров **8** и **10** образуются продукты монозамещения **9** и **11** со свободной тиольной группой в боковой цепи:



R = CH₃ **2, 8** (42%), **9** (31%)
R = C₂H₅ **3, 10** (52%), **11** (34%)

Тиол **9** как S-нуклеофил был вовлечен в реакцию с фураноном **3** для получения «смешанного» бис-тиоэфира с фрагментами разных фуранонов. Тиолы **9** и **11** использованы в качестве прекурсоров в синтезе новых тиамacroциклов, содержащих γ -лактонное кольцо.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭПОКСИАМИННЫХ ОЛИГОМЕРОВ С АЗОХРОМОФОРАМИ

Левицкая А.И., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

*Институт органической и физической химии им.А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
april-90@mail.ru*

Современные органические материалы, проявляющие квадратичную нелинейно-оптическую (НЛО) активность, обладают рядом свойств, обуславливающих их практическое применение в фотонике и оптоэлектронике. Органический НЛО материал представляет собой полимерную матрицу с введенными в нее хромофорами, отвечающими за проявление НЛО эффекта на молекулярном уровне. Основной задачей при создании НЛО активного материала является усовершенствование его свойств, при этом полезными являются квантово-химические расчеты и атомистическое моделирование, позволяющие осуществить предварительную оценку электрических характеристик синтезируемого материала с учетом эффекта среды. Однако не всегда силовые поля, встроенные в доступные программные комплексы для моделирования, верно описывают структуру и динамику исследуемых систем. Поэтому целью настоящей работы стал подбор частичных зарядов, модифицирующих силовое поле для моделирования нового композиционного материала, представляющего собой хромофор-содержащую полимерную матрицу с введенными в нее дополнительными хромофорами-гостями. Матрица моделировалась эпоксиаминными олигомерами с ковалентно присоединенными дендритными 1,3-бис[6-(N-метил-4-(4'-нитрофенилазо)анилино)-гексаокси]-2-пропильными фрагментами; в качестве хромофора-гостя был применен 4-амино-4'-трицианоэтинилазобензол. Исследование названных олигомеров проводили методами конформационного поиска и молекулярной динамики с силовым полем MMFFs94 в пакете программ *MacroModel* [1]. Модификация силового поля проводилась путем замены встроенных частичных зарядов на рассчитанные квантово-химически [2] электростатические заряды ESP и RESP в следующих приближениях: HF/6-31G**//HF/6-31G*; B3LYP/cc-pVTZ/IEFPCM//HF/6-31G** [3].

Установлено, что рассчитанные квантово-химически ESP- и RESP-заряды адекватно описывают зарядовое распределение в хромофорах, которые являются системами с разделением зарядов.

Особенности структуры исследованных эпоксиаминных олигомеров, установленные в ходе моделирования с использованием зарядов стандартного силового поля, сохраняются при его модификации с помощью ESP-зарядов: реализуется самоорганизация хромофорных групп, в которой участвуют как гости, так и хромофоры дендритных фрагментов.

1. MacroModel, version 10.2, Schrodinger, LLC, New York, 2013.
2. A. Alex. Granovsky, Firefly v.8.0.1, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
3. RESP ESP charge Derive Server Development; <http://q4md-forcefieldtools.org>

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОФАМИНА И ТИРАМИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ ЗОЛОТО-ПАЛЛАДИЙ

Дегтева М.А., Лексина Ю.А., Челнокова И.А., Гедмина А.В., Шайдарова Л.Г.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Degteva_marina@rambler.ru*

Вольтамперометрия является распространенным методом определения органических соединений. Использование химически модифицированных электродов (ХМЭ) с электрокаталитическими свойствами позволяет повысить чувствительность, селективность и воспроизводимость метода. Золото и платиновые металлы являются достаточно универсальными катализаторами для многих электрохимических реакций.

Изучена каталитическая активность бинарной системы Au-Pd, электро-осажденной на поверхности электрода из стеклоуглерода (СУ) при электроокислении тирамина и дофамина, которые являются важными биологическими объектами анализа.

В кислой среде тирамин и дофамин окисляются на немодифицированном СУ при близких потенциалах и с плохой воспроизводимостью вольтамперных характеристик. Использование ХМЭ на основе бинарной системы Au-Pd ведет к уменьшению перенапряжения окисления рассматриваемых соединений и увеличению тока их окисления по сравнению с током окисления модификатора. Кроме того, данный ХМЭ обладает высокой стабильностью каталитического отклика.

Разработан вольтамперометрический способ определения тирамина и дофамина по электрокаталитическому отклику ХМЭ на основе бинарной системы Au-Pd. Величина каталитического тока пропорциональна концентрации аналита в интервале от 1×10^{-7} до 5×10^{-3} моль/л. Использование ХМЭ по сравнению с немодифицированным электродом позволяет увеличить диапазон определяемых концентраций и снизить нижнюю границу определяемых содержаний тирамина и дофамина на два порядка. Относительное стандартное отклонение (S_r) не превышает 5 % во всем диапазоне концентраций. Установлена возможность совместного определения тирамина и дофамина в присутствии аскорбиновой кислоты с помощью разработанного ХМЭ. Достигнутая разность потенциалов пиков окисления рассматриваемых органических соединений на этом ХМЭ составляет 200-300 мВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-03-01101).

ТЕРМОСТОЙКИЕ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ ПОЛИИМИДОВ И ПОЛИЭФИРИМИДОВ

Логачева А.С.^a, Беззаметнов О.Н.^{a,b}, Амирова Л.М.^{a,b}

^a *КНИТУ им. А.Н.Туполева, Казань*

^b *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань*
las994@mail.ru

Полиимиды являются весьма интересной группой термопластичных полимеров, обладающих очень высокими прочностными характеристиками и устойчивостью к воздействию высоких температур. Сочетание таких свойств представляет широкие возможности использования полиимидов в различных областях: медицине, электронике, аэрокосмической промышленности.

Целью данной работы являлось исследование теплофизических и реологических свойств термопластичных полиимидов и композиций на их основе. В качестве объекта исследования использовались полиимиды марок «Extem UN1016» (термопластичный полиимид), «Ultem 1000» (полиэфиримид). В качестве наполнителей использовались сажи: канальный (диффузионный) технический углерод марки К354 (гранулированный); печной техуглерод - П234, П701, П514 (гранулированный); термический техуглерод – Т900 (негранулированный).

Изучение теплофизических свойств проводили с использованием дифференциального сканирующего калориметра DSC 204F1 Phoenix (Netzsch, Германия), термомеханические свойства контролировали с помощью динамического механического анализатора DMA Q800 (TA Instruments), реологические свойства исследовали на реометре HAAKE RheoStress RS6000.

На основании полученных данных построены зависимости температуры стеклования и текучести от содержания наполнителей. Выявлено влияние природы наполнителя и его дисперсности на характер полученных зависимостей.

Изучены реологические свойства расплавов композиций, показана зависимость характера кривых вязкость-скорость сдвига от природы полимера, наполнителя, степени наполнения и дисперсности наполнителя. На основании реологических данных проведена оптимизация технологических режимов получения изделий из наполненных композиций методом литья и экструзии. Предложены составы с оптимальными технологическими и эксплуатационными свойствами.

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.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АНТИСТАТИЧЕСКИХ ЗАЩИТНЫХ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ПОКРЫТИЙ

Мазильников А.И.^a, Зарипов И.И.^b, Каримуллин Р.Р.^b, Давлетбаев Р.С.^c, Давлетбаева И.М.^{a,b}

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

^b Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

^c Казанский национальный исследовательский технический университет, Казань
mazillove001@gmail.com

В известных на сегодняшний день разработках для придания полиуретанам антистатических свойств в их состав вводятся значительные количества высокопроводящих дисперсных наполнителей различной природы. Такой подход приводит к заметному удорожанию и ухудшению прочности полимерных материалов. В работе установлена возможность повышения электропроводности полиуретанов путем их металлокомплексного структурирования. Для этих целей на основе переходных металлов и органических соединений, способных вступать в окислительно-восстановительные реакции, разработаны объемные высокоупорядоченные координационные соединения переходных металлов. Показано, что металлокомплексная система имеет колончатое строение, которое сохраняется и в структурированных ими полиуретанах. Большая протяженность цепочки связанных между собой ионов переходных металлов в составе полимерной матрицы явилось причиной увеличения их электропроводности на 4-5 порядков. Структурирование сегментированных блочных полимеров разработанными координационными соединениями приводит к значительной сегрегации жестких блоков. Подобная способность координационного связывания жестких блоков позволяет целенаправленно изменять физико-механические свойства полимерных материалов и усиливать их прочностные показатели. В связи с этим для получения высокомодульных ударопрочных полиуретанов, наиболее пригодных для создания защитных покрытий были разработаны сегментированные полиуретаны с протяженными упорядоченными жесткими блоками. Жесткие блоки включают до шестидесяти ароматических фрагментов, где на каждые два ароматических кольца приходится одна уретановая группа. Такие полиуретаны, проявляя напряжение 35-45 МПа при 5-10% удлинении способны к удлинению при разрушающем напряжении до 200% за счет значительной энергии когезии уретановых групп в составе жестких блоков.

Металлокомплексное структурирование сегментированных полиуретанов, отличительной особенностью которых является большая протяженность ароматических блоков и высокая мольная доля уретановых групп в их составе явилось основной посылкой для достижения у защитных покрытий на их основе антистатических свойств, высокой адгезии к различным поверхностям, исключительно высокой маслбензосойкости, огнестойкости и высокого модуля, сочетающегося со значительной пластической деформацией.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований грант № 12-03-97021

ДИНАМИКА КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В НИКЕЛЕ ПРИ РАДИАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Маркидонов А.В.^a, Смирнова М.В.^b

^a *Филиал Кузбасского государственного технического университета в г. Новокузнецке,
Новокузнецк*

^b *Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк
markidonov_artem@mail.ru*

Известно, что наличие дислокаций определяет способность материала к пластической деформации, а их динамика лежит в основе многих важных физических свойств. Поэтому изучение на микроуровне воздействия ударных послекаскадных волн, возникновение которых обусловлено различием между временем термализации атомных колебаний в некоторой конечной области, подверженной радиационному облучению, и временем отвода из нее тепла, на дислокации и их динамику является вполне актуальной задачей. В связи с этим, целью настоящей работы является изучение динамики краевой дислокации в кристалле, подверженному воздействию ударной послекаскадной волны. Исследование проводилось методом молекулярной динамики с помощью пакета МД-моделирования XMD [1].

Известно, что движение дислокации определяется девиаторной компонентой тензора напряжений. Расчет напряжений при прохождении ударной волны и волны разгрузки показал следующее. Нормальное напряжение достигает максимума при прохождении через расчетную область фронта ударной волны, а касательное напряжение – при прохождении волны разгрузки. Релаксация касательных напряжений происходит в результате перемещения дислокации.

Проведенное исследование показало, что изменение дислокационной структуры облученного материала обусловлено не столько ударными послекаскадными волнами, сколько следующими за ними волнами разгрузки. Смещение дислокаций в кристалле приводит к изменению полей напряжений, что должно оказывать влияние на диффузию атомов, и, как следствие, может служить причиной радиационно-стимулированной диффузии. Представленные положения могут найти применение при изучении проблем радиационного материаловедения.

1. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. Mode of Access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.

ВЛИЯНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛА НА ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ

Медведева О.И., Кутырева М.П., Улахович Н.А., Гатаулина А.Р.

*Химический Институт им. А.М. Бутлеров КФУ, Казань
olga-medvedeva28@yandex.ru*

Гиперразветвленные полимеры (ГРП) могут служить в качестве нанореакторов или самоорганизующихся систем для синтеза полимеримобилизованных наночастиц металлов. Широкий спектр генераций позволяет оптимизировать состав, структуру и свойства получаемых материалов, которые могут найти применение в качестве лекарственных препаратов нового поколения.

Для получения полимеримобилизованных наночастиц (НЧ) меди использовали метод химического восстановления соли металла ($\text{CuSO}_4 \times 5\text{H}_2\text{O}$) в среде избытка или недостатка полимера, при этом варьировали соотношение полимер:соль и генерацию полимера. В качестве стабилизатора использован гиперразветвленный полиэфирополиол (ГРПО) на основе 2,2-дигидроксиметилпропановой кислоты второй, третьей и четвертой генерации. С увеличением доли полимера от 1:34 до 30:1 цвет НЧ изменялся от красно-коричневого до желтого. В результате были получены НЧ меди в виде суспензии и порошка, который удалось выделить, высушить и исследовать методом РФА. Образование наночастиц подтверждено также методом УФ-спектрофотометрии и просвечивающей электронной микроскопии.

Установлено, что полоса плазмонного резонанса (ППР) с уменьшением доли ГРПО третьей генерации смещается от 585 до 597 нм. Методом РФА были исследованы соединения, синтезированные при соотношении $\text{H}_3\text{O}:\text{Cu}^{2+}$ 1:5, 1:10, 1:15, 1:20 и 1:34, для всех соединений характерно наличие металлической меди. Средний диаметр составил 27 ± 5 нм, для соотношений $\text{H}_3\text{O}:\text{Cu}^{2+}$ 1:5, 1:15 и 1:34 дополнительно присутствовала оксидная фаза Cu_2O , ее размер составил 30 ± 6 нм. С увеличением генерации ГРПО от второй к четвертой ППР смещалась от 590 до 610 нм, размер частиц $\text{Cu}/\text{H}_2\text{O}$ составил 24 ± 5 нм, $\text{Cu}/\text{H}_3\text{O}$ 30 ± 6 нм, $\text{Cu}/\text{H}_4\text{O}$ 36 ± 6 и $\text{Cu}_2\text{O}/\text{H}_4\text{O}$ 49 ± 5 нм. С уменьшением доли полимера ($\text{H}_3\text{O}:\text{Cu}^{2+}$ от 20:1 до 1:34) форма НЧ меди изменялась от сферической (20 ± 5 нм) до гексагональной (30 ± 6 нм).

ДЕФОРМАЦИЯ ГЕТЕРОДИЕНА МЕТАЛЛОЦЕНТРОМ КАК ХАРАКТЕРИСТИКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В КООРДИНИРОВАННЫХ ОКСО-, АЗА- И ТИОКСОДИЕНОВ

Мирзаянов И.И., Курамшин А.И., Черкасов Р.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
ildar4016@mail.ru*

Проведенные ранее исследования [1] позволили сделать предположение, что роль металлоцентра во внутрисферном региоселективном гидрофосфорилировании гетеродиенов более сложна, чем просто роль защитной группы.

Чтобы изучить причины изменений реакционной способности 1-гетеро-1,3-диенов, вызванных координацией с переходным металлом, мы провели квантово-химические расчеты свойств металлоорганических производных α -енонов с помощью DFT.

Результаты наших расчетов показали важность искажения геометрии оксодиена, координированного с металлоцентром. Мы наблюдали значительное удлинение связей C=C и C=O, а также искажение валентных и торсионных углов.

Изменение в геометрии приводит к утрате молекулой оксодиена планарного строения. Таким же образом изменяются геометрические параметры 1-аза-1,3-диенов и 1-тиоксо-1,3-диенов, координированных с металлоцентрами различного типа. Мы посчитали, что такое изменение геометрии координированных лигандов может привести к утрате сопряжения между связями C=C и C=X, которое и влияет на результат внутрисферной функционализации лиганда.

Для проверки этих предположений мы оценили значения «энергии деформации лиганда» в соответствии с уравнением:

$$E_{stress} = \Delta H_{SP} - \Delta H_{GO} \quad (1), \text{ где:}$$

E_{stress} – энергия деформации лиганда, кДж/моль; ΔH_{SP} – энергия лиганда в том геометрическом состоянии, которое он принимает в металлоорганическом соединении, кДж/моль; ΔH_{GO} – энергия свободного гетеродиена в наиболее энергетически выгодной конформации, кДж/моль.

В докладе обсуждаются значения энергий деформации лиганда металлокомплексами и тенденции их изменения в комплексах различной гаптовости.

1. Курамшин А.И., Курамшина Е.А., Черкасов Р.А. Журн. орг. хим. 2004. Т.40. Вып.9. С.1315-1323

ТЕРМОДИНАМИКА СОРБЦИИ ИНСУЛИНА НА НАНОРАЗМЕРНОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ

Митрофанов А.А., Колоницкий П.Д.

*Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург
mitrofanov_a@icloud.com*

В последние годы активное развитие получают высокоселективные методы выделения органических и биоорганических соединений из биологических образцов и объектов окружающей среды [1]. Широкую популярность приобретают сорбционные методы, где в качестве сорбентов используются высокопористые наноразмерные объекты. Поиск подходов к получению таких объектов осуществляется до сих пор [2].

В рамках данной работы был разработан и оптимизирован метод синтеза наноразмерного оксида алюминия синтезом из растворов, индуцированным микроволновым излучением.

Структура и морфология полученных образцов были изучены методами лазерной дифракции, рентгенофазового анализа, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), термогравиметрии, дифференциальной калориметрии и низкотемпературной адсорбции азота.

Методом рентгенофазового анализа было установлено, что размеры кристаллитов не превышают 10 нм, что согласуется с рассчитанными из удельной поверхности значениями среднего размера частиц (6-7 нм). С помощью метода СЭМ доказана высокоразвитая пористая поверхность.

Была изучена сорбция инсулин-гларгина на полученном пористом материале при разных температурах, рассчитаны термодинамические параметры процесса сорбции. Величины изменения энтальпии и энтропии равновесия сорбция-десорбция инсулина на синтезированном оксиде алюминия составили 130 кДж/моль и 530 Дж/моль К соответственно.

1. О.А. Кельцьева, В.Д. Гладилович, Е.П. Подольская. *Научное приборостроение*, 2013, 80, 74-85.
2. Н.Г. Суходолов, Н.С. Иванов, Е.П. Подольская. *Научное приборостроение*, 2013, 23, 86-105.

НОВЫЕ ЭФФЕКТИВНЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ КВАТЕРНИЗОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА

Морозов А.С., Нуждина А.В., Бессонов И.В.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва
morozovas84@gmail.com

Борьба с патогенными микроорганизмами является очень важной задачей, в частности, при использовании изделий медицинского назначения, таких как имплантаты и катетеры. Для этой цели применяются два подхода: дезинфекция и использование антимикробных покрытий. Полимерные антимикробные покрытия имеют целый ряд преимуществ, в частности, они имеют длительный срок службы и не вызывают развития резистентности микроорганизмов в отличие от большинства антимикробных агентов.

В данной работе был получен ряд соединений на основе кватернизованного полиэтиленimina с использованием как методов классического органического синтеза, так и активации реакций микроволновым излучением. В качестве алкилирующих агентов использовали различные алкил бромиды, а в качестве сшивающих агентов применяли 1,5-дибромпентан, глутаровый альдегид и бифункциональные эфиры хлоруксусной кислоты на основе моно-, ди-, три- и полиэтиленгликоля. Метилирование алкилированных производных полиэтиленimina осуществляли, используя метил йодид и диметил сульфат. Полученные полимерные соединения проявили высокую бактерицидную активность по отношению к грамотрицательным (*P.aeruginosa*) и грамположительным (*S.aureus*) бактериям. Также были выявлены закономерности между активностью и растворимостью в воде, длиной алкильного заместителя, степенью и природой сшивки в полимерной молекуле.

Было показано, что кватернизованные производные полиэтиленimina являются эффективными антимикробными присадками к коммерчески доступным полимерам, таким как полистирол, полиметилметакрилат и полиуретан; так, введение добавки в количестве 3-8% в полимерную матрицу приводит к возникновению стойкого антимикробного эффекта на поверхности материала, при этом водные вытяжки не оказывают токсического действия на лабораторных животных.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЕПТИДНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ *n*-трет- БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА С ДНК

Мостовая О.А.^a, Падня П.Л.^a, Кадырова А.Н.^a, Стойков И.И.^{a,b}

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

^b Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН, Казань
olga.mostovaya@mail.ru

Создание рецепторных структур на ДНК – одна из актуальных задач современной химии. Повышенный интерес к подобным структурам обусловлен важной проблемой современности: лечением наследственных и ген-зависимых заболеваний. Придание сродства к ДНК осуществляется посредством введения полярных групп. Широко применяются в качестве участков связывания положительно заряженные аммонийные и гуанидиновые группы [1,2]. Ранее нами было получено гуанидиновое производное *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, способное к взаимодействию с некоторыми природными ДНК [3]. В настоящей работе изучено взаимодействие водорастворимых пептидных производных данного макроцикла, содержащих положительно заряженные аммонийные группы, с ДНК из молок лосося.

Спектральными методами (УФ и флуоресцентной спектроскопией, методом динамического светорассеяния) показано взаимодействие полученных производных тиакаликс[4]арена с биополимером. Установлено образование агрегатов между данными макроциклами и биополимером в нанометровом диапазоне.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (13-03-00498-а).

1. C.J. Breitkreuz, R. Zadnard, T. Schrader. *Supramolecular Chemistry*, 2008, 20, 109.
2. F. Sansone, M. Dudic, G. Donofrio, C. Rivetti, L. Baldini, A. Casnati, S. Cellai, R. Ungaro. *Journ. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128, 14528.
3. О.А. Мостовая, А.В. Галухин, И.С. Антипин, А.И. Коновалов, И.И. Стойков. Бутлеровские сообщения, 2011, 28, 57.

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АВ-ПЕПТИДОВ С МОДЕЛЬНЫМИ ЛИПИДНЫМИ МЕМБРАНАМИ

Мунавиров Б.В., Котенков С.А., Филиппов А.В.

*Институт физики КФУ, Казань
bulat.munavirov@kpfu.ru*

Болезнь Альцгеймера – одна из наиболее частых причин смерти людей пожилого возраста. Возникновение и развитие заболевания сопровождается образованием в головном мозге пациентов амилоидных бляшек, особую роль в образовании бляшек играет нарушение метаболизма для белков, при нормальных условиях присутствующих в организме в неагрегированной форме и выполняющих определенные физиологические функции. В частности, амилоидный Аβ-пептид, имеющий 37-49 аминокислотных остатков и играющий наиболее важную роль в развитии болезни Альцгеймера, является продуктом каталитического расщепления трансмембранного пептида APP (Amyloid Precursor Protein) и содержится в плазме крови здоровых людей. Существует ряд доказательств, что олигомерные агрегаты Аβ-пептида, имеющие сравнительно небольшие размеры и высокую трансляционную подвижность, способны образовывать на поверхности клеточных мембран ионные каналы, что приводит к неконтролируемому поступлению ионов кальция в клетку, что в свою очередь приводит к её гибели. Внутренняя структура олигомерных агрегатов Аβ-пептида и некоторых его фрагментов изучалась с помощью ЯМР твердого тела и было установлено, что молекулы пептида образуют параллельные либо антипараллельные β-структуры. Известно, что пептидный состав амилоидных агрегатов разнороден. Однако, систематического изучения влияния точечных мутаций ни на складывание молекул пептидов в агрегатах, ни на особенность взаимодействия агрегатов с мембранами не проводилось.

Целью данной работы является исследование особенностей взаимодействия Аβ-пептида с модельными липидными мембранами. Исследовано влияние характера точечной мутации пептида на особенности организации липидного бислоя по данным ЯМР спектроскопии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-04-31375 мол_a

О МНОГОЗНАЧНОСТИ СИГНАЛА ПЕРЕФОКУСИРОВАННЫХ АТОМОВ, ЭМИТИРОВАННЫХ С ПОВЕРХНОСТИ ГРАНИ (001) Ni

Мусин А.И., Самойлов В.Н.

Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
ai.musin@physics.msu.ru

В ряде работ, например [1], было показано, что при распылении монокристаллов под действием ионной бомбардировки на стадии эмиссии происходит сильное перераспределение вылетающих атомов по углам и энергии в результате взаимодействия с атомами поверхности. В настоящей работе проведено моделирование эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni методом молекулярной динамики. В наблюдаемом угловом распределении распыленных атомов, сравнивая начальный азимутальный угол вылета φ_0 и азимутальный угол наблюдения φ распыленного атома, можно выделить собственные, фокусированные и перефокусированные атомы [1,2]. Обнаружена многозначность сигнала перефокусированных атомов по углам φ и φ_0 (рисунок 1). Показано, что в ее основе находится многократное рассеяние эмитированного атома на атомах поверхности. Эту особенность важно учитывать при обратном преобразовании углового и энергетического распределений, получаемых экспериментально при анализе поверхности.

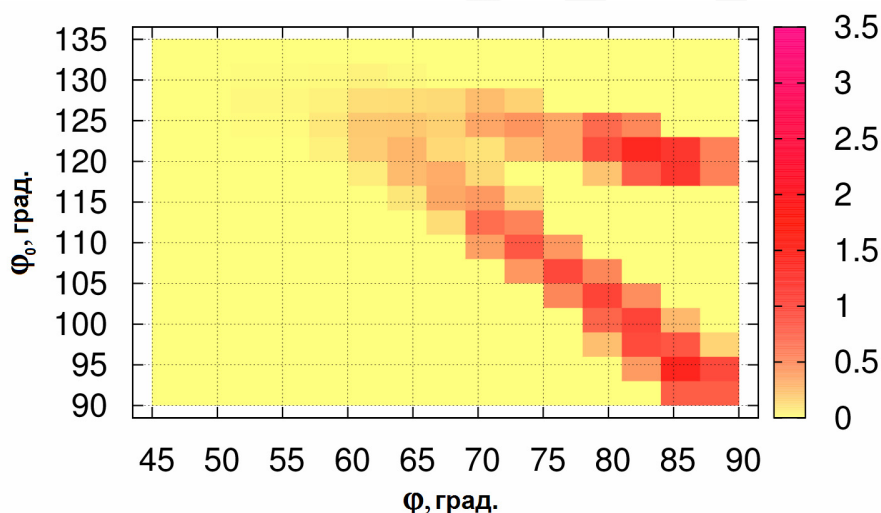


Рисунок 1. Распределение перефокусированных атомов для полярных углов ϑ [56.3°, 57.8°] и энергии $E = 2.5 \pm 0.4$ эВ, наблюдаемых в интервале углов φ [45°, 90°].

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ [3].

1. В.Н. Самойлов, Н.В. Носов. Поверхность, 2014, № 3, 81-92.
2. О.С. Корсакова, В.А. Алешкевич, В.Н. Самойлов и др. Поверхность, 1997, № 2, 77-92.
3. Вл.В. Воеводин, С.А. Жуматий, С.И. Соболев и др. Открытые системы, 2012, № 7, 36-39.

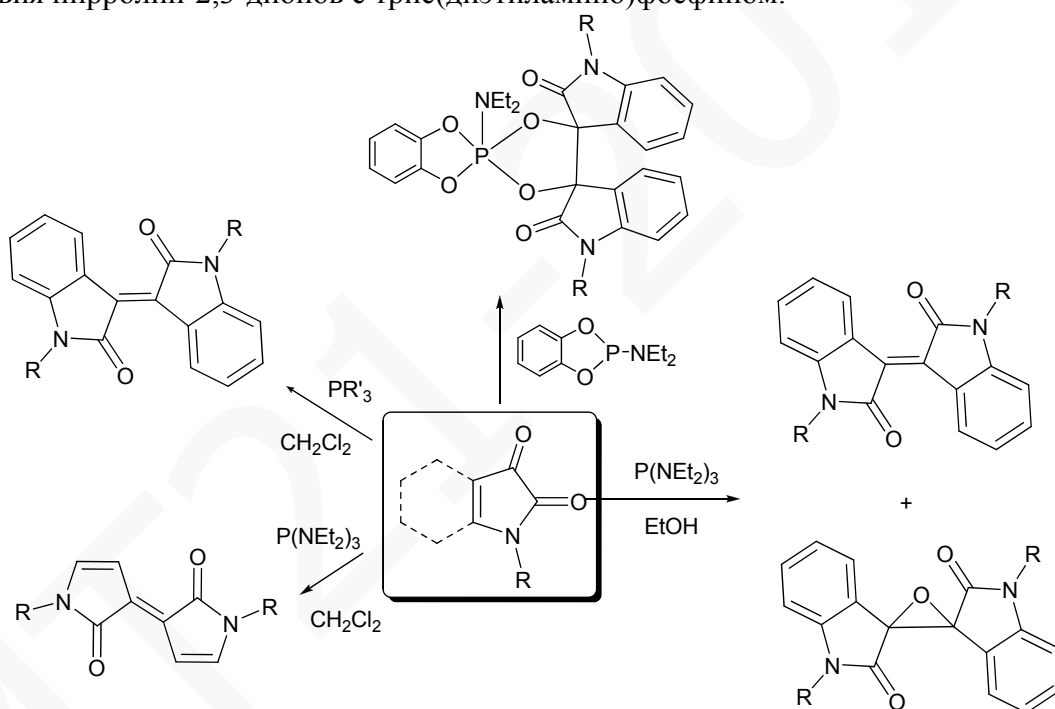
МНОВОВАРИАНТНОСТЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АМИДОВ Р(III) С ПРОИЗВОДНЫМИ ИЗАТИНА И ПИРРОЛ-2,3-ДИОНА

Мусин Л.И., Богданов А.В., Миронов В.Ф.

ФГБУН ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
777lenar@list.ru

Исследования последних десятилетий показывают, что среди производных изатина немало соединений, обладающих высокой биологической активностью. Среди них обнаружены соединения, проявляющие антитуберкулезную, противовоспалительную, антимикробную, анти-ВИЧ, противовирусную, противосудорожную и противогрибковую активность.

Ранее нами был найден уникальный и мягкий способ дезоксигенирования различных производных пирролин-2,3-диона, позволяющий получать с высокими выходами, селективностью и конверсией реакции различные бис(пирролин-2-он)илиденные структуры. В данной работе было исследовано влияние заместителей как при атоме фосфора, так и при атоме азота гетероцикла, а также условий проведения реакции на синтетический результат взаимодействия пирролин-2,3-дионов с трис(диэтиламино)фосфином.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-03-31717 мол_a).

СТРУКТУРА, СВОЙСТВА И СПОСОБЫ ПЕРЕРАБОТКИ ГИДРОЛИЗНОГО ЛИГНИНА

Мусин Т.Р.^a, Герасимов А.В.^a, Грачев А.Н.^b, Варфоломеев М.А.^a

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

^b *Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань*
teslanovic@gmail.com

Лигнин является вторым по распространенности в мире органическим полимером, который содержится в клеточной стенке растений, выполняя защитную функцию. Ежегодно перерабатывается несколько миллиардов тонн растительного сырья, в результате чего образуется большое количество отходов лигнина, которые потенциально могут стать основной для получения практически полезных материалов. В связи с этим возникает потребность в изучении свойств лигнина и создании методов его переработки. Следует отметить, что в зависимости от способа обработки древесины получают различные виды лигнина, которые существенно отличаются по своим физическим и химическим параметрам.

В настоящей работе мы провели исследование гидролизного лигнина, который получается в качестве отходов переработки древесины на одном из крупнейших предприятий России по производству биоэтанола ООО «БиоХимЗавод». Данный вид лигнина получается при гидролизе древесины под действием концентрированной серной кислоты. В ходе этого процесса целлюлоза и другие составляющие древесины переходят в жидкое состояние, а лигнин и его производные остаются в твердом остатке, который в дальнейшем нейтрализуется и промывается. Получаемый таким образом лигнин чаще всего сжигается для получения дополнительной энергии и просто утилизируется.

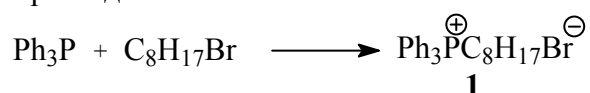
Нами была изучена теплотворная способность лигнина и продуктов его пиролиза (уголь и жидкий остаток), проанализирована возможность их использования в качестве топлива. Исследовано термическое поведение лигнина с помощью метода совмещенного ТГ-ДСК анализа с масс-спектрометрическим детектором. Также проведены опыты по экстракции различных компонентов лигнина с использованием органических растворителей. Основываясь на том, что мономерами лигнина являются фенольные производные, была оценена антиоксидантная активность полученных экстрактов методом УФ-спектроскопии.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНОЙ СОЛИ ФОСФОНИЯ И АММОНИЕВОЙ СОЛИ ТРИФТОРБОРАНА

Мустафаева Д.Г., Собанов А.А., Галкина И.В.

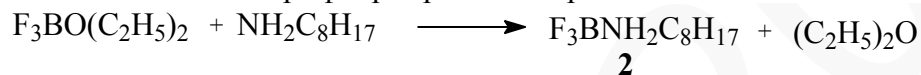
*Химический Институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
mustafaeva.diana@mail.ru*

Для создания антибактериальной и антимикотической фармацевтической композиции на основе соли фосфония и аммониевой соли трифторбарана на первом этапе работы нами была получена четвертичная соль фосфония **1** по реакции трифенилфосфина с *n*-октилбромидом:



Синтезированная соль **1** проявила высокую антибактериальную активность в отношении патогенной и условно патогенной микрофлоры человека и животных.

Для расширения круга антимикотической активности была синтезирована октиламмониевая соль трифторборана **2** по реакции:



Полученная соль **2** показала выраженную антимикотическую активность и умеренную антибактериальную (изучена на кафедре микробиологии Казанской государственной медицинской академии под руководством профессора Поздеева О.К.).

После установления по отдельности биологической активности солей **1** и **2** нами была получена фармацевтическая композиция **3** состава 1:1 (*n*-октилтрифенилфосфонийбромид и *n*-октиламмониевая соль трифторборана), структура которой пока не установлена, но изучена ее биоактивность.

Высокую биологическую активность фармацевтической композиции **3** мы связываем с возможностью октильных радикалов солей **1** и **2** встраиваться в липидные слои биомембран патогенной микрофлоры, что может приводить к разрушению последней.

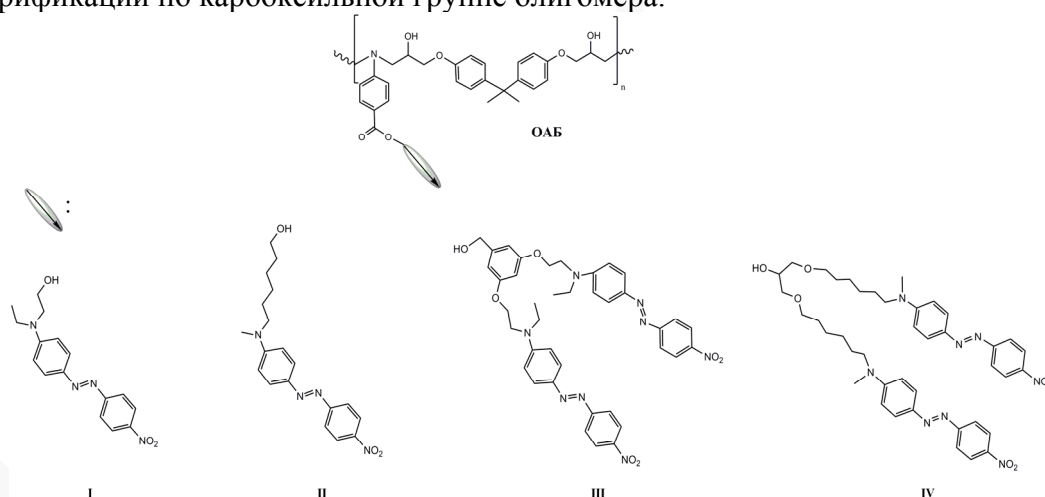
ХРОМОФОР-СОДЕРЖАЩИЕ ПОЛИЭФИРПОЛИОЛЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Назмиева Г.Н., Вахонина Т.А., Шарипова С.М., Иванова Н.В., Смирнов М.А., Балакина М.Ю.

ФГБУН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук, Казань
nazmievagn@iopc.ru

НЛО материалы с квадратичными нелинейно-оптическими (НЛО) свойствами являются перспективными для использования в фотонике и оптоэлектронике: на их основе могут быть созданы модуляторы и переключатели оптических сигналов, управляемые внешним электрическим полем. За проявление эффекта на молекулярном уровне отвечают хромофор-содержащие НЛО-активные единицы, которые могут быть как обычного, так и дендритного строения. Интерес к последним обусловлен тем, что пространственная структура хромофор-содержащих дендритных фрагментов позволяет свести к минимуму нежелательные диполь-дипольные взаимодействия между хромофорами, приводящие к их антипараллельному выстраиванию, и снижающему НЛО активность.

На основе ДГЭБА и *p*-аминобензойной кислоты нами был синтезирован полиэфирполиол ОАБ с реакционноспособными карбоксильными и гидроксильными группами в боковой цепи [1]. В качестве НЛО-активных единиц были использованы азохромофоры **I**, **II** и хромофор-содержащие дендритные фрагменты **III** и **IV**, которые были введены в боковую цепь олигомера реакцией этерификации по карбоксильной группе олигомера.



На основе полученных материалов методом наливки при вращении из раствора в циклогексаноне были изготовлены тонкие пленки. Полученные пленки были переведены в электретное состояние посредством полинга в поле коронного разряда. НЛО свойства полученных материалов изучались методом генерации второй гармоники. Так для **ОАБ-I** и **ОАБ-IV** коэффициент d_{33} составил 21 и 20 пм/В, соответственно.

1. Назмиева Г. Н. , Вахонина Т. А., Шарипова С. М., Иванова Н. В., Низамеев И. Р., Валитов М. И., Смирнов Н. Н., Якиманский А. В. , Балакина М. Ю. Бутлеровские сообщения. Т.35, №7, С.59-67 (2013).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ РАБОТЫ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА

Наконечный С.Н.

Ивановский институт ГПС МЧС России, Иваново
serny@mail.ru

В настоящее время соединения галогенидов лантанидов находят довольно широкое применение в различных научных областях – эмиссионной электронике, микроэлектронике, электрооптике. Они используются в качестве сцинтилляторов, присадок металл-галогенных ламп, твердотельных лазеров. В отличие от ранних исследований авторов [1, 2], проведенные нами испытания указывают на присутствие в насыщенном паре трибромидов лантанидов различных ионных ассоциатов. Следует отметить, что подобный факт ранее не принимался во внимание. В данной работе был использован метод высокотемпературной масс-спектрометрии, представляющий сочетание метода Кнудсена и масс-спектрометрического анализа.

Объектами исследований являлись две группы трибромидов лантанидов LnBr_3 различной структуры кристаллической решетки: а) типа PuCl_3 ($\text{Ln} = \text{Nd}$) и б) типа FeCl_3 ($\text{Ln} = \text{Gd, Tb}$). Для кристаллов исследованных трибромидов лантанидов нами была впервые определена работа выхода электрона ϕ_e (таблица 1), основанная на рассмотрении термохимического цикла (рисунок 1), включающего отрицательный ион LnBr_4^- (для него мы экспериментально определили энтальпию сублимации).

Таблица 1. Значения работы выхода электрона для исследованных кристаллов.

LnBr_3	NdBr_3	GdBr_3	TbBr_3
$T_{\text{cr}} \text{ K}$	874	901	1014
$\phi_e \text{ эВ}$	$2,8 \pm 0,2$	$2,6 \pm 0,2$	$2,8 \pm 0,2$

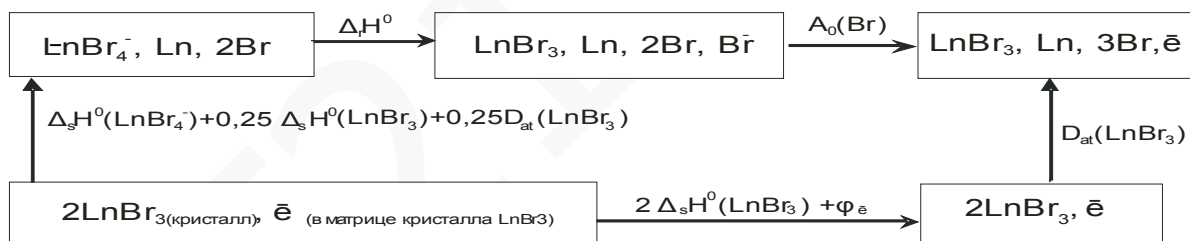


Рисунок 1. Термохимический цикл, используемый при определении значения работы выхода электрона.

1. V.E. Shimazaki, K. Niwa. Dampfdruckmessungen an Halogeniden der Seltenen Erden. Z. Anorg. Allg. Chem., 1962, Bd. 314, S. 21–34.
2. Г.П. Дудчик, Махмадмуродов А., Поляченко О.Г. Давление насыщенного пара трибромидов La, Ce, Pr и Nd. Журн. физической химии, 1975, Т. 49, С. 1856.

РЕАКЦИИ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3- И 1,2,4-ТРИГИДРОКСИБЕНЗОЛОВ С ДИ-ТРЕТ-БУТИЛ-1,2-БЕНЗОКИНОНОМ

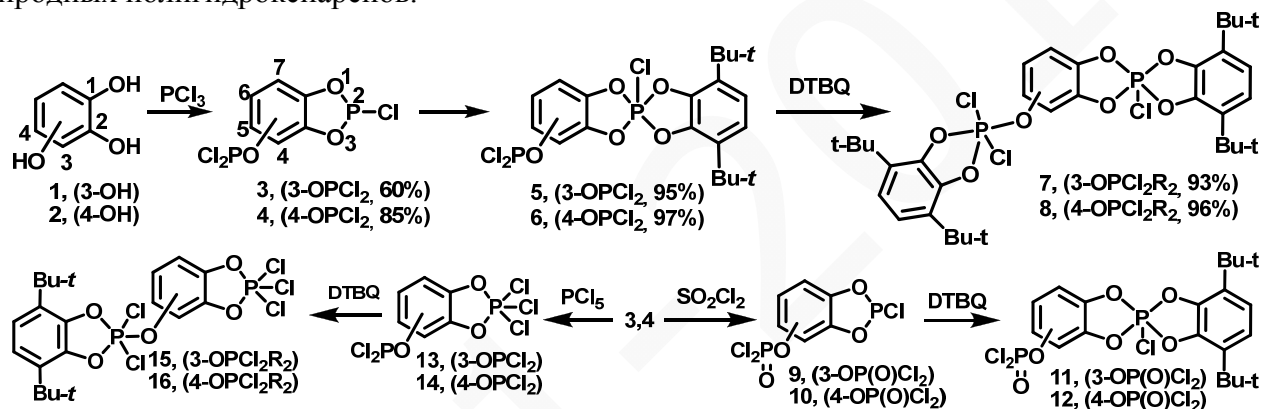
Насибуллин И.О.^a, Немтарев А.В.^{a,b}, Миронов В.Ф.^{a,b}, Черкасов В.К.^c

^a *Институт Органической и Физической Химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН, Казань*

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

^c *Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева, РАН, Нижний Новгород*
l.nasibullin@yandex.ru

Фосфорилированные производные полифенольных соединений привлекают все больший интерес, обусловленный возможностью нахождения фосфора в различных координационных состояниях. Дифосфорсодержащие соединения находят применение, как в органическом синтезе, так и в качестве добавок к полимерным и функциональным материалам [1-3], придавая им антипиреновые свойства [4]. Изучение процессов фосфорилирования 1,2,3- и 1,2,4-тригидроксибензолов может послужить удобной моделью для модификации более сложных, природных полигидроксиаренов.



В настоящей работе продемонстрированы способы фосфорилирования пирагаллола и оксигидрохинона, под действием избытка треххлористого фосфора, а также реакции полученных фосфолов (3,4) с различными реагентами. В ходе которых образуются дифосфорсодержащие соединения, содержащие в своем составе атомы фосфора в различных валентных и координационных состояниях.

1. Vlad-Bubulac T., Hamciuc C., Petreus O. // *Polym. Adv. Technol.* 2006. Vol. 17. N 9. P. 647.
2. Liou G.-S., Hsiao S.-H. // *J. Polymer Sci. Part A: Polym. Chem.* 2001. Vol. 39. N 10. P. 1786.
3. Chang C.W., Lin C.H. // *J. Polymer Sci. Part A: Polym. Chem.* 2009. Vol. 47. N 10. P. 2486.
4. Liou G.-S., Hsiao S.-H. // *J. Polymer Sci. Part A: Polym. Chem.* 2002. Vol. 40. N 4. P. 459.

К ВОПРОСУ О СОВЕРШЕНСТВОВАНИИ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СПЕЦИАЛЬНОЙ ОБУВИ

Насыбулина А.А., Махоткина Л.Ю.

*Факультет дизайна и программной инженерии ФГБОУ «КНИТУ», Казань
adikovna777@yandex.ru*

Обеспечение безопасного труда нефтяников, сохранение их здоровья и работоспособности побуждает искать новые эффективные решения по совершенствованию методов промышленного проектирования специальной одежды и обуви. Специальная обувь предназначена для носки в течение сравнительно длительного периода, поэтому для суждения о том, какими свойствами должна обладать эта обувь, необходимо знать, при сочетаниях каких показателей метеорологических условий будет она эксплуатироваться. В требованиях к материалам для спецобуви приводятся показатели прочности, твердости, относительного удлинения, сопротивления к истиранию, изгибу, температуростойкости и стойкости к действию агрессивных сред [1].

При проектировании специальной обуви для нефтяников следует учитывать тот факт, что поверхностное воздействие сырой нефти приводит к изменениям физико-механических свойств материалов для обуви, нарушению их защитных характеристик, что происходит непосредственно в процессе эксплуатации. Однако пакет материалов должен сохранять свои защитные свойства в течение всего периода эксплуатации.

В качестве объекта исследования служила кожа крупного рогатого скота (КРС) хромого дубления для верха обуви, так как натуральная кожа обладает лучшими гигиеническими свойствами, и, учитывая длительность эксплуатации в обуви, эти свойства являются одним из важных факторов.

Исследования изменения свойств материалов проводились по ГОСТ 12.4.130-83 [2]. При воздействии сырой нефти на кожевенный полуфабрикат ухудшается разрывная нагрузка в 2 раза (контрольный образец – 125 Н; опытный образец – 64,25 Н), при этом возрастает показатель удлинения в 3,5 раза (контрольный образец - 27,1%; опытный образец - 74,9%), что приводит к возникновению деформации кожи.

Таким образом, для повышения защитных свойств обуви, необходимо разработать способы повышения устойчивости к воздействию сырой нефти натуральной обувной кожи .

1. Черунова, И.В. Защитные свойства спецодежды в условиях нефтедобычи / И.В. Черунова, И.В. Куренова, Л.А. Осипенко, Е. А. Щеникова, С.А. Колесник // Швейная промышленность. - 2011. - №3. - с . 14-15.
2. ГОСТ 12.4.130-83. Материалы для верха специальной обуви. Методы определения стойкости к воздействию нефти и нефтепродуктов. – Введ. 1983.09.20 – Москва: Государственный комитет СССР по стандартам, 1983. - 7с.

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ ЛАЗЕР

Нгуен Ван Ву

*Национальный исследовательский томский политехнический университет, Томск
sir.nguyenvu92@gmail.com*

С момента своего изобретения лазеры зарекомендовали себя как «готовые решения ещё неизвестных проблем». В силу уникальных свойств излучения лазеров, они широко применяются во многих отраслях науки и техники, а также в быту (проигрыватели компакт-дисков, лазерные принтеры, считыватели штрих-кодов, лазерные указки и пр.).

Твердотельный лазер является одним из самых известных лазеров, широко применяемый в медицине и обработке материалов. С важными приложениями, твердотельные лазеры стали неотъемлемой частью в человеческой жизни.

Первым реализованным в 1960 г. лазером на кристалле рубина в качестве активной среды был твердотельный лазер, причем лазер этого типа и в настоящее время ещё принадлежит к классу важнейших. Этот лазер пригоден, в частности, для получения высокой и очень высокой импульсных мощностей и находит разнообразные практические применения.

Твердотельный лазер содержит в качестве активной среды кристаллы и стекла, которые активируются ионами металлов или ионами редкоземельных элементов. Эти активные ионы поглощают оптическое излучение в широкой спектральной области. В результате релаксационных процессов или излучательных переходов через различные промежуточные уровни происходит возбуждение относительно долгоживущего (метастабильного) уровня в качестве исходного уровня для испускания вынужденного излучения, т.е. лазерного перехода. Твердотельные лазеры преимущественно излучают в видимой и ИК-спектральной областях.

Возбуждение происходит исключительно с помощью оптической накачки при использовании подходящих источников света в специальном устройстве (для эффективного введения излучения накачки в лазерную среду).

Твердотельные лазеры характеризуются относительно простой компактной конструкцией и высокой импульсной мощностью (при относительно низком качестве излучения).

В настоящей работе проводится детальное описание физических основ твердотельных лазеров, изготовленных из различных материалов.

1. Бруннер В. Справочник по лазерной технике
2. Лазер [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Лазер>

ЖЕЛЕЗОВОСТАНАВЛИВАЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ МИЦЕЛЛЯРНЫХ ЭКСТРАКТОВ СПЕЦИЙ

Нгуен Конг Ф., Зиганшина Э.Р., Зиятдинова Г.К.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
ziyatdinovag@mail.ru*

Специи растительного происхождения имеют сложный состав и содержат большое число компонентов различной природы, в том числе, обладающих антиоксидантными свойствами. Для оценки последних хорошо зарекомендовала себя гальваностатическая кулонометрия с электрогенерированными гексацианоферрат(III) ионами.

Для экстракции антиоксидантов из специй использовали мицеллярные среды ПАВ в сочетании с ультразвуковой обработкой. Оценено влияние природы ПАВ и концентрации на эффективность извлечения. Показано, что максимальное извлечение достигается при однократной экстракции неионогенным 0,1 М Brij® 35 в течение 10 мин с ультразвуковой обработкой. Соотношение сырье/экстрагент устанавливали для каждой специи индивидуально. Эффективность экстракции оценивали кулонометрически и выражали как количество электричества, затраченное на титрование экстракта.

Основными соединениями, вступающими в реакцию с электрогенерированными гексацианоферрат(III) ионами, являются фенольные антиоксиданты, реакционная способность которых изучена в мицеллярной среде Brij® 35. Подход можно использовать для оценки железовосстанавливающей способности специй. Изучено 20 видов специй. Наибольшая железовосстанавливающая способность характерна для корицы и гвоздики (174 ± 3 и 150 ± 3 Кл/г, соответственно), что обусловлено высоким содержанием гироксикоричной кислоты и эвгенола в корице и галловой кислоты и эвгенола в гвоздике. Для остальных специй величины железовосстанавливающей способности статистически достоверно ниже. Установлена корреляция железовосстанавливающей способности специй с их антиоксидантной активностью по реакции с 2,2'-дифенил-1-пикрилгидразилом ($r=0.9474$). Таким образом, кулонометрическое титрование с электрогенерированными гексацианоферрат(III) ионами позволяет адекватно оценить ЖВС специй и рекомендовать метод для быстрого скрининга их антиоксидантных свойств.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 14-03-31173-мол_a).

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ МЕДИ (II) С ТИРОНОМ В ВОДЕ И В РАСТВОРАХ КАТИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ ПО ДАННЫМ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ И СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Низамеева Л.М., Никитина Т.В., Носова Е.А., Журавлева Ю.И., Амиров Р.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
yulialab6@mail.ru*

С технической и экологической точек зрения необходимо освобождать растворы гальванических производств от катионов металлов, для чего наиболее перспективным является метод полимер-усиленной ультрафильтрации.

В результате настоящего исследования методами спектрофотометрии и ЯМР-релаксации установлено состояние ионов меди(II) в водных растворах катионных полимеров, показано практически полное отсутствие взаимодействия ионов меди(II) с хлоридом поли(диаллил-N,N'-диметиламмония) (ПДМАХ), содержащим четвертичные атомы азота, и взаимодействие ионов меди(II) с полиэтиленимином (ПЭИ), содержащем первичные, вторичные и третичные атомы азота. На основании данных электронной спектроскопии предложены два варианта координации ПЭИ: по типу координационного узла $\{CuN_2O_2\}$ - в сильноокислой области (pH 1-3) и по типу $\{CuN_5\}$, при pH выше 4.

Приведены результаты исследования комплексов меди(II) с тироном (H_2L^{2-}) в воде и растворах ПЭИ и ПДМАХ. Показано, что при разных соотношениях металл-лиганд, включая значительный избыток лиганда по отношению к металлу, в системе медь(II)-тирон накапливаются только два вида комплексных частиц: монолигандный и бислигандный комплекс меди(II) с тироном состава CuL^{2-} и CuL_2^{6-} . Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

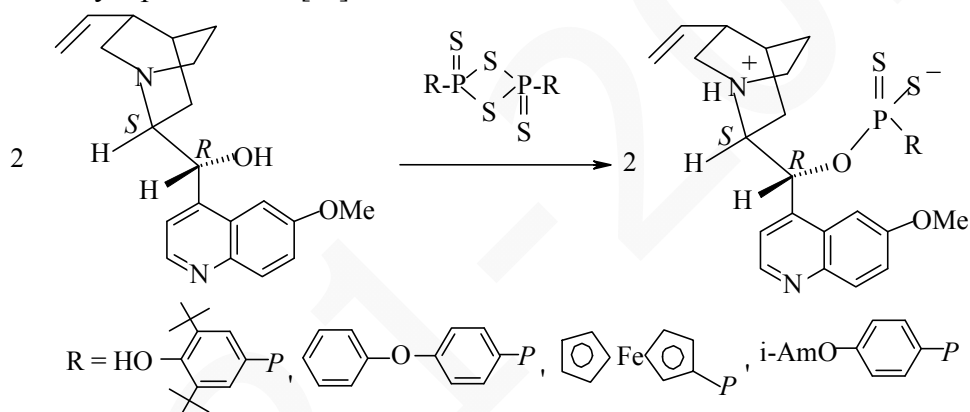
Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

ХИРАЛЬНЫЕ ДИТИОФОСФАТЫ И ДИТИОФОСФОНАТЫ НА ОСНОВЕ ХИНИНА

Никитин Е.Н., Фасхетдинов Р.Ф., Шильникова О.В., Низамов И.С., Черкасов Р.А.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
berkutru@mail.ru

Доступными источниками хиральности являются природные соединения с асимметрическим атомом углерода, среди которых заметное место принадлежит алкалоидам. Среди них наиболее перспективными для создания биологически активных соединений являются гидроксилсодержащие хиральные алкалоиды (хинин, цинхонин), доступность которых позволило использовать их в качестве хиральных лигандов для получения металлокомплексов, катализаторов для асимметрического синтеза, хроматографических селекторов, хиральных агентов для ЯМР спектроскопии. Дитиофосфорилированию хинина ранее в научной литературе уделялось недостаточно внимания. Установлено, что хинин реагирует с тетрафосфордекасульфидом в мольном соотношении 8:1 при 60°C в течение 10 ч в бензоле с образованием ди[(8*S*,9*S*)-цинхонан-9-ил]дитиофосфата в виде внутренней соли (δ_r 105.5 и 106.2 м.д. 1:1). В масс-спектре MALDI TOF (матрица – 4-нитроанилин, бензол) продукта присутствует пик m/z 743.7 молекулярного иона $[M]^+$.

*P* - место присоединения атома фосфора

Дитиофосфонаты в виде внутренних солей (δ_r 109-117 м.д.) получены в реакциях 1,3,2,4-дителиадифосфетан-2,4-дисульфидов с хинином в соотношении 1:2 (бензол, 20°C, 2 ч). Силиловый эфир хинина также вовлечен в реакции с 1,3,2,4-дителиадифосфетан-2,4-дисульфидами.

ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НОВЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФОРМ ASb_2O_6 ($A = Mn, Co, Ni, Cu, Zn$)

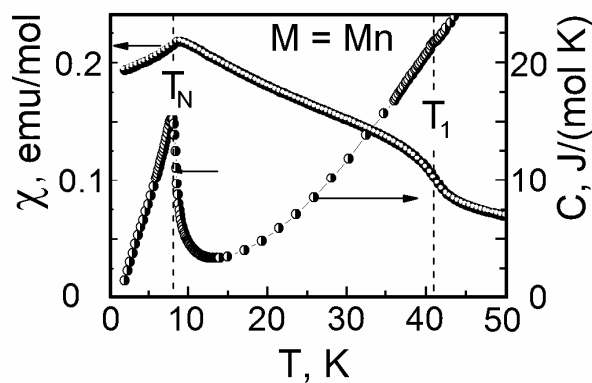
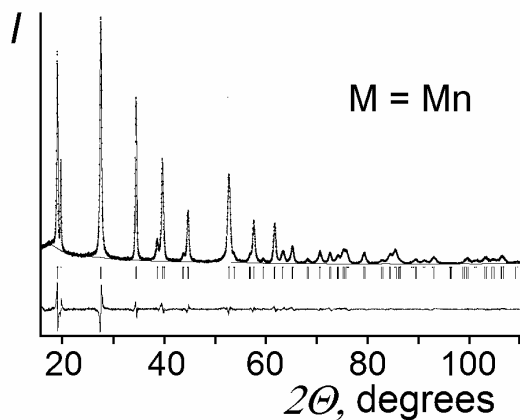
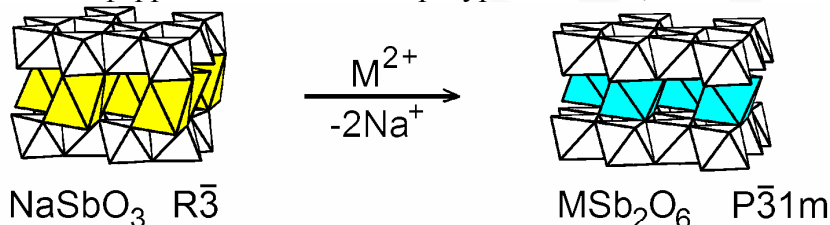
Никулин А.Ю.^a, Налбандян В.Б.^a, Шукаев И.Л.^a, Зверева Е.А.^b

^a Химический факультет ЮФУ, Ростов-на-Дону

^b Физический факультет МГУ, Москва

chemistnik@yandex.ru

Соединения, содержащие парамагнитные ионы d-элементов, могут быть интересны своими электрическими и магнитными свойствами. В частности, известны антиферромагнетики MSb_2O_6 ($M = Co, Ni, Cu$) типа трирутила и $MnSb_2O_6$ с уникальной слоистой структурой. Нами поставлена задача получения новых форм этих соединений со слоистой структурой типа розиаита $PbSb_2O_6$ путём ионного обмена в $NaSbO_3$ типа ильменита. Антимонатные слои в этих структурах практически одинаковые – гиббситового (сотового) типа, но укладка слоёв разная из-за разного числа крупных межслоевых катионов. Поэтому при обмене ожидалась перестройка скольжением слоёв без разрыва прочных связей, что и подтвердилось на опыте. Взаимодействием $NaSbO_3$ с легкоплавкими смесями $MSO_4+KCl+KBr$ при 420-490 °С получены изоструктурные тригональные слоистые MSb_2O_6 ($M = Mn, Co, Ni, Cu, Zn$). Наиболее подробно изучена новая форма $MnSb_2O_6$: это антиферромагнетик с температурой Нееля 8,5 К.



КОМПОЗИТНЫЙ БИОСОРБЕНТ И ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ ОЧИСТКИ ЗАГРЯЗНЕННЫХ ВОД ОТ РАДИОНУКЛИДОВ

Новикова А.Л., Васильева М.М.

*Институт физики высоких технологий ТПУ, Томск
Furia.08@mail.ru, Vamami@sibmail.com.*

Целью работы было исследование сорбционных способностей нанотрубок металлов оксида титана и меди для возможного создания принципиально нового, композитного сорбента.

Для исследования получали композитный биосорбент [1], в состав которого входил мицелий гриба рода *Aspergillus niger* и нанотрубки оксида титана (TiO₂) и оксида меди (CuO).

Процесс композиционной сорбции проверяли на сточных водах с промышленного предприятия по переработке радиоактивного сырья, водах из реки Ромашка (Томская обл.). Отбор и обработка проб сточной воды промышленного предприятия проводились по ГОСТ Р 51592-2000 [2]. Активность гибридного биосорбента оценивали по степени сорбции, которую определяли статическим методом [3].

По результатам атомно-эмиссионного спектрометрического анализа в технологических сточных водах были определены элементы, которые снижают сорбционную активность композитов, результаты атомно-эмиссионного спектрального анализа приведены в таблице 1.

Таблица 1. Атомно-эмиссионная спектрометрия.

№ п/п	Элемент	UNish?, мг/л	±δ %	№ п/п	Элемент	UNish?, мг/л	±δ %	№ п/п	Элемент	UNish?, мг/л	±δ %
1	B	0,437	40	6	Mn	2,093	20	11	Cu	0,0031	20
2	Ba	0,176	30	7	Pb	-	50	12	Fe	0,0068	25
3	Cd	0,0003	30	8	Sn	-	40	13	Zn	0,023	35
4	Co	0,0011	25	9	Sr	1,401	20				
5	Cr	0,0011	25	10	Ti	-	40				

Анализ сорбции композитных сорбентов уранил ионов в сточных водах предприятия показывает, что композитный сорбент на основе нанотрубок оксида меди имеет высокую степень сорбции, которая составляет 87,35%, сорбент на основе диоксида титана 66,31% (таблица 2).

Таблица 2. Зависимость степени сорбции в различных средах (масса сорбента 1 и 0,1 грамм (влажного веса), объем раствора 5 мл).

	Масса сорбента, грамм	Концентрация уранил-иона до, мкг/л	Концентрация уранил-иона после, мкг/л	Степень сорбции, %
Сток завода				
A.niger + TiO ₂	1,01	748,96	252,27	66,31
A.niger + CuO	1,01	748,96	94,69	87,35

При осаждении нанотрубок металлов на поверхность мицелия плесневых грибов, сорбционная способность композитного материала увеличивается, кроме того, появляется возможность более легкого извлечения данного композитного сорбента из раствора.

Основываясь на полученных данных, мы можем сделать вывод что биосорбент с использованием нанотрубок оксида меди является более активным, чем аналогичный биосорбент, компонентом которого является диоксид титана. Применение его для работы, очевидно, является экономически выгодным и экологически безопасным.

1. Муксунова Ю.А. Получение композитного биосорбента для очистки сточных вод от радиоактивных загрязнений.// Ю.А Муксунова. – Томск.: ТПУ, 2014, – С. 37-39
2. ГОСТ Р 51592-2000 «Вода. Общие требования к отбору проб»
3. Боков В.В. Исследование особенностей сорбции радиоактивных ионов различных сред с помощью композитного биосорбента.// В.В. Боков. – Томск.: ТПУ, 2014, – С. 38-40.

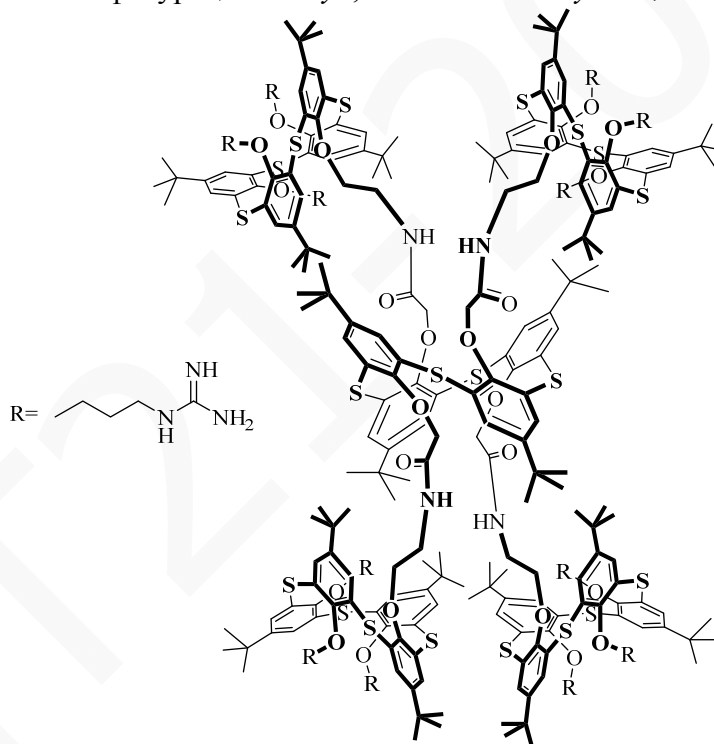
СИНТЕЗ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ НА ОСНОВЕ *n*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Носов Р.В., Мусаева С.И., Докучаева М.Н., Стойков И.И.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
romanosow@mail.ru

Производные тиакаликс[4]арена нашли широкое применение в качестве рецепторов, каталитических и биомиметических систем. Особый интерес представляет синтез наноразмерных водорастворимых полимакроциклических рецепторов, способных к распознаванию биомолекул, таких как белки, ДНК и РНК. Перспективным подходом для синтеза полимакроциклических рецепторов является создание мультикаликсареновых систем, в которых «ядро» и его периферийные фрагменты являются производными тиакаликс[4]арена.

В качестве прекурсоров для синтеза водорастворимых мультикаликсаренов нами было решено синтезировать различно замещенные производные тиакаликсарена, содержащие одновременно гуанидиновые и первичную аминогруппу. Далее было проведено взаимодействие полученного гуанидиниевого производного с тетрахлорангидридами кислот на основе *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена в конфигурациях конус, частичный конус и 1,3-альтернат.



Структура синтезированных макроциклов была установлена с помощью методов одномерной и двумерной ЯМР ^1H , ^{13}C , ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №12-03-00252-а.

ПОЛИМЕРУСИЛЕННАЯ УЛЬТРАФИЛЬТРАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ГАДОЛИНИЯ(III) И ЖЕЛЕЗА(III) С ЛИМОННОЙ КИСЛОТОЙ

Носова Е.А., Тамочкина Е.А., Солодов А.Н., Журавлева Ю.И., Амиров Р.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
yulialab6@mail.ru*

В настоящее время для очистки технологических сточных вод от катионов высокозарядных ионов металлов активно используется метод полимер-усиленной ультрафильтрации. Метод ядерной магнитной релаксации позволяет с высокой точностью диагностировать связывание полимеров с комплексами парамагнитных ионов металлов. Для выяснения роли лиганда и полимера, концентраций компонентов, а также pH среды и оптимизации условий проведения процесса полимер-усиленной ультрафильтрации оценены термодинамические параметры комплексообразования Fe(III) и Gd(III) с лимонной кислотой и определены релаксационные характеристики образующихся форм.

В системе Fe(III) - лимонная кислота - вода даже при пятикратном избытке лиганда зафиксированы комплексы только состава 1:1 различной степени протонирования. При введении ПЭИ наблюдается небольшое смещение кривой спин-спиновой релаксации в кислую область, что свидетельствует о начале комплексообразования в более кислой области pH.

В системе Gd(III) - лимонная кислота в избытке лиганда образуются комплексы состава не выше 1:2, а влияние полимера оказалось гораздо сильнее. При избытке лиганда на кривой спин-спиновой релаксации образуется максимум, который выходит на предел при соотношении металл-лиганд 1:3. Это свидетельствует об образовании в полимерном растворе достаточно прочного *трис*-комплекса ($Gd(HL)_3^{3-}$) уже в кислой области pH.

Таким образом, для успешного проведения ультрафильтрации раствора, содержащего ионы Gd(III) необходимо наличие трехкратного избытка лимонной кислоты, ПЭИ в количестве не менее 10 ммоль/л и поддержание pH среды в диапазоне 3.5-5.0.

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

СИНТЕЗ И РЕАКЦИИ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ 1-АЛКИЛ-1,2-ДИФОСФОЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

Ощепкова Е.С., Загидуллин А.А., Милюков В.А.

*Институт органической и физической химии им А.Е.Арбузова, Казань
oshchepkova@iopc.ru*

Фосфациклопентадиены или фосфолы привлекают пристальное внимание, поскольку являются удобными синтонами для получения полициклических фосфинов, фосфациклопентадиенид анионов, фосфаметаллоценов, фосфабензолов, фосфиниденов и т.д [1]. Это важный класс фосфорных гетероциклов представляет интерес для конструирования новых электрооптических материалов и нового класса фосфорсодержащих лекарств [2]. Реакции циклоприсоединения в ряду фосфолов были использованы для синтеза новых хиральных каркасных фосфинов, применяемых в качестве лигандов для гомогенного, бифазного и ассиметрического катализа. Также фосфонорборнадиены, образующиеся в результате этих реакций использованы для генерирования высокореакционных фосфорных частиц – фосфиниденов, используемых для синтеза трехчленных гетероциклов. В то же время, введение электроноакцепторных заместителей к атому фосфора значительно облегчает протекание реакций циклоприсоединения монофосфолов, что позволяет конструировать полидентатные, гибридные или фосфинитные лиганды.

Целью данной работы является синтез и изучение реакций циклоприсоединения новых 1,2-дифосфолов, содержащих электроноакцепторные группы у атома фосфора и в ареновом фрагменте.

Мы провели прямое алкилирование 1,2-дифосфациклопентадиенида натрия, вводя заместители с электроноакцепторными группами к атому фосфора. Второй подход основан на введении электроноакцепторных групп в ареновый фрагмент. Итак, 3,4,5-три (*para*-фторфенил)1,2-дифосфациклопентадиенид-анион был получен кипячением 1,2,3-три(*para*-фторфенил)циклопропенил бромидом со смесью полифосфидов натрия при температуре 160° в диглиме. Отметим, что 1-алкил-1,2-дифосфолы проявляют большую термическую стабильность – образование продуктов [2+2] циклоприсоединения имеет место лишь при 190 °С. В то же время, при нагревании до 60 °С соединение с *para*- фторфенильным заместителем димеризуется, давая один [4+2] циклоаддукт. Полученное соединение представляет собой *анти-эндо*-изомер, что доказано методом рентгено-структурного анализа. Изомерная смесь циклоаддуктов и единственный [4+2] циклоаддукт подвергается ретро-реакции Дильса-Альдера при нагревании до 120 °С с N-фенилмалеинимидом с образованием только одного стереоизомера дифосфанорборнена.

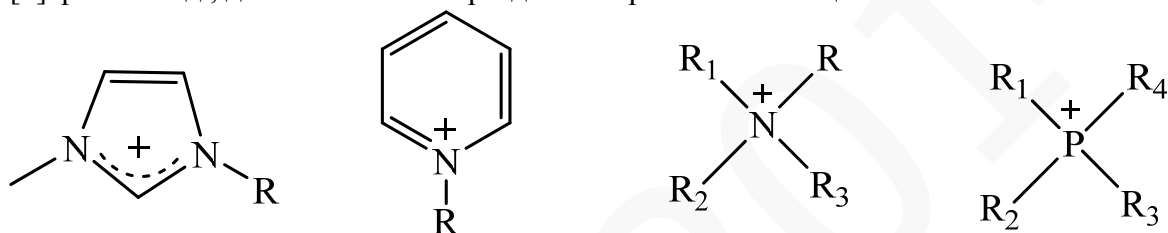
1. F. Mathey, Acc. Chem. Res., 2004, 37, 954-960.
2. Nay, C., Angew. Chem. Int. Ed., 2000, 39, 1812-1815.

ДИЗАЙН ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ТЕТРАЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ *п*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫМИ АММОНИЙНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

Падня П.Л., Стойков И.И.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
padnya.ksu@gmail.com

Актуальным направлением современной органической химии является синтез ионных жидкостей с заданными свойствами. Особый интерес представляет разработка подходов к созданию новых высокоэффективных систем на основе ионных жидкостей и функционализированных макроциклов, таких как циклодекстрины, кукурбит[*n*]урилы, каликс[*n*]арены и т.д., для извлечения и разделения различных веществ из сложных смесей.



[PF₆]⁻, (CF₃SO₂)₂N⁻, CF₃SO₃⁻, CH₃CO₂⁻, CF₃CO₂⁻, NO₃⁻, Br⁻, Cl⁻, I⁻

Впервые были синтезированы производные *п*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащие амидные и четвертичные аммонийные фрагменты по нижнему ободу. Структура полученных макроциклов была подтверждена рядом физико-химических методов – ИК, ЯМР ¹H, ¹³C спектроскопии, ESI масс-спектрометрии, а состав – данными элементного анализа. Были получены новые ионные соединения, имеющие температуру плавления меньше 100 °С, что соответствует определению ионной жидкости по ИЮПАК.

НОВЫЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЁННЫЕ БЛОК-СОПОЛИМЕРЫ ТИПА "ПОЛИСАХАРИД – ВЫСОКОПОЛИСОПРЯЖЁННОЕ ЗВЕНО" ЗАДАВАЕМОЙ МОРФОЛОГИИ И ГИБРИДНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ИХ ОСНОВЕ

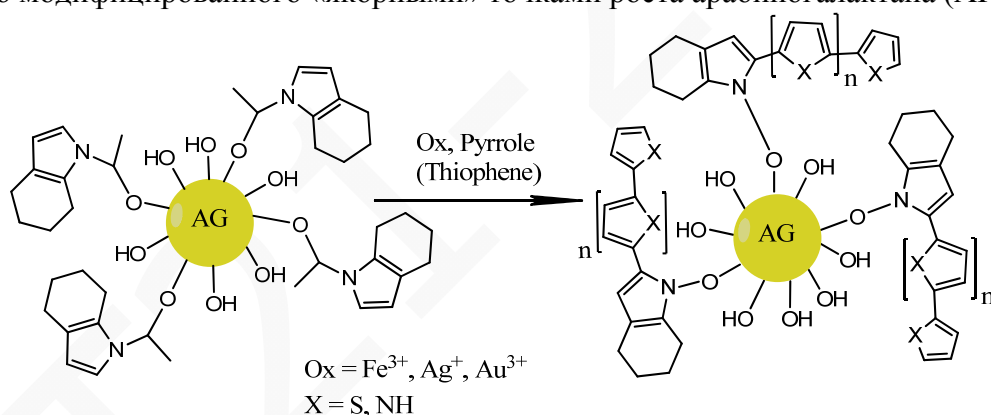
Перетьяко И.Г.^a, Зеленков Л.Е.^b, Сухов Б.Г.^b, Трофимов Б.А.^b

^a ФГБОУ ВПО Иркутский государственный университет, Иркутск

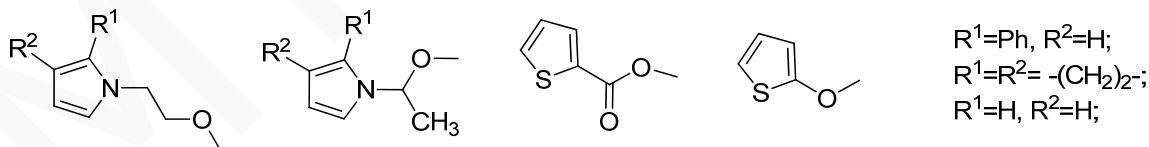
^b Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск
van812@yandex.ru

Органические полисопряженные электропроводящие полимеры рассматриваются в настоящее время как одна из прорывных областей высоких технологий (Нобелевская премия 2000 г., Х. Широкава, А. Макдаймид, и А. Хигер). Однако главными недостатками этих полупроводников до сих пор остаются чувствительность к кислороду воздуха, плохая растворимость, хрупкость, низкие механо-физические свойства, слабая адгезия. Синергетическое сочетание свойств полисахаридов (лишённых этих недостатков) и полисопряженных гетероциклических полимеров может значительно снизить или принципиально устранить перечисленные недостатки и усилить достоинства этих важнейших классов полимеров, придать биodeградируемость, биосовместимость и регулируемую растворимость (в том числе в воде).

Нами разработан подход к созданию подобных гибридных блок-сополимеров типа «полисахарид-высокополисопряженное звено» (и металлсодержащих наноконпозитов на их основе) путём окислительной полимеризации пиррола или тиофена в присутствии предварительно модифицированного «якорными» точками роста арабиногалактана (АГ).



Различные «якорные» точки роста позволяют задавать различную морфологию высокополисопряженных звеньев (например, направление роста цепи).



Варьирование начального соотношения модифицированный АГ - мономер позволяет получать блок-сополимеры с различной растворимостью и электропроводностью.

Образец	Электропроводность, См/см
Матрица АГ-ВТГИ	8,8•10 ⁻¹³
АГ-ВТГИ-полипиррол (растворимый)	5,5•10 ⁻¹²
АГ-ВТГИ-полипиррол (нерастворимый)	1,7•10 ⁻²

ЗАГРЯНЕНИЕ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ ШАХТНЫМИ ВОДАМИ

Петриченко А.И., Трус И.Н., Грабитченко В.Н., Гомеля Н.Д.

*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
Киев, Украина
Petalig33@gmail.com*

Главной проблемой человечества на сегодняшний день является загрязнение окружающей среды. Так или иначе все элементы биосферы - атмосфера, литосфера и, в первую очередь, гидросфера – загрязнены. Одним из основных факторов, повлиявших на экологическую обстановку, является развитие предприятий черной и цветной металлургии, нефтегазовой и угольной промышленности в технологически устаревших условиях. Ежегодно объемы сточных вод в промышленных регионах составляют около 2 млрд. м³, и на угольную промышленность приходится более 50% всех стоков. Шахтные воды отличаются высоким содержанием взвешенных веществ (до 0,1 г/дм³), повышенной минерализацией (содержание солей до 3 г/дм³ приходится на 70%, от 3 до 7 г/дм³ на 26% шахт), повышенным содержанием сульфатов (приблизительно 400-900 мг/дм³), повышенной щелочностью (4-16 мг-екв/дм³), жесткостью (7-16 мг-екв/дм³) – из-за чего в водоёмы и реки ежегодно сбрасывается более 3 млн.т минеральных солей и веществ [1]. Это привело к повышению в ряде случаев минерализации поверхностных и подземных водных источников до 2-2,9 г/дм³, увеличению содержания в водоёмах тяжелых металлов и заиливанию водных объектов. Наиболее распространёнными методами, использующимися при очистке шахтных вод являются: реагентные, баромембранные, ионообменные и электрохимические [2]. Наиболее эффективным среди всех методов является баромембранные, такие как обратный осмос и нанофильтрация. Мембраны характеризуются малой дисперсией пор, высокой селективностью и производительностью.

1. Г.Л. Майдуков. Комплексное использование угольных месторождений Донбасса как основа экологической безопасности и энергосбережения в регионе. Экономичный вестник Донбасса, 2007, № 4 (10), 12-19
2. И.Л. Монтгайт, К.Д. Текиниди, Г.И. Николадзе. Очистка шахтных вод. Москва: Недра, 1978, 173.

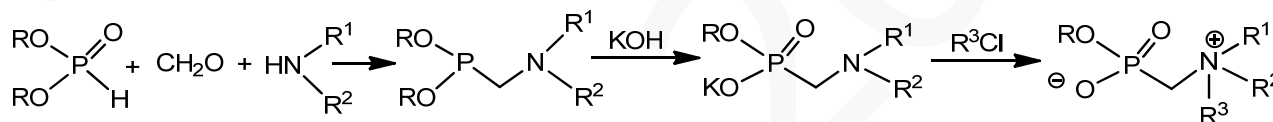
СИНТЕЗ БЕТАИНОВ АЛКИЛАМИНОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ

Петров С.Н., Казанцева К.С., Гарифзянов А.Р., Давлетшина Н.В., Черкасов Р.А.

*Химический институт имени А. М. Бутлерова КФУ, Казань
petrovhimik793@mail.ru*

Исследования, проведенные в последние десятилетия, показали перспективность использования аминоксфорильных соединений – α -аминофосфонатов и -фосфиноксидов как жидкостных экстрагентов, мембранных переносчиков в процессах мембранной экстракции, а также ионофоров в ион-селективных электродах.

Вместе с тем, в литературе практически отсутствуют данные об использовании в этих областях О-алкил α -аминофосфоновых кислот и бетаинов на их основе. Описанные в литературе фосфобетаины, в основном содержат гидрофильные алкильные группы у атомов азота и фосфора, и по этой причине использовать подобные соединения в экстракционных процессах не представляется возможным. Целью нашей работы была разработка метода синтеза бетаинов и их производных, содержащих липофильные длинноцепочечные заместители у потенциальных центров координации - атомов азота и фосфора. Для получения фосфобетаинов мы использовали методику трехстадийного синтеза, которая заключается в предварительном получении О,О-диалкил- α -аминофосфонатов с последующим щелочным гидролизом и далее - реакции кватернизации [1]:



R = *i*-Pr, R¹ = R² = Pr, R³ = CH₃; R = Hex, R¹ = R² = Oct, R³ = CH₃;

R = Hex, R¹ = R² = Oct, R³ = Bz; R = Hex, R¹ = Hex, R² = *c*-Hex, R³ = CH₃;

Синтез О,О-диалкил- α -аминофосфонатов осуществляли при катализе *p*-толуолсульфокислотой, в качестве растворителя использовался ацетонитрил. Реакцию гидролиза проводили в среде 1,4-диоксана с 25% избытком водной щелочи. Структура всех полученных соединений подтверждены методами ЯМР ¹H и ¹³C спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 13-03-00536).

1. А.Р. Гарифзянов, Р.Р. Давлетшин, Н.В. Давлетшина, С.А. Кошкин, М.С. Валеева, Р.А. Черкасов. Ж. Орг. Химии, 2013, 49. С.640-641.

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПИЩЕВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ МЕТОДОМ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИОННОЙ ВРЕМЕННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Пивцаев А.А., Разов В.И.

*Школа естественных наук ДВФУ, Владивосток
aleksey_pivtsaev@mail.ru*

Ранее в наших исследованиях был изучен метод позитронной аннигиляционной временной спектроскопии (ПАВС), как быстрый и эффективный метод выявления канцерогенных свойств веществ, по значению долгоживущей временной компоненты τ_3 позитрония (Ps). Было выявлено, что если значение τ_3 , больше $(1,005 \pm 0,005)$ нс, то вещество не обладает канцерогенными свойствами, а если меньше – является канцерогеном [1]. Методом ПАВС было предложено изучить синтетические красители. В исследовании были изучены аннигиляционные спектры пищевых красителей, проявляющих явные канцерогенные свойства: E-133, E-124, и проявляющих не явные канцерогенные свойства – мутагенные: E-132 и E-151, E-102 и их: 10%, 5%, 2,5% и 1% растворов [2].

С помощью полученных данных была наглядно видна разница между, мутагенными красителями E151, E132, и остальными красителями, явно проявляющих канцерогенные свойства. Значение τ_3 в 1% растворе, практически у всех красителей выходит за границу в 1,0 нс, что переводит их в группу не канцерогены, что и подтверждается экспериментально в опытах на животных. Но постепенное увеличение концентрации E-132 и E-151 приводит к резкому уменьшению времени жизни позитрония (τ_3), т. е. к увеличению канцерогенности; а для остальных красителей – при увеличении концентрации, τ_3 уменьшается медленно, а значит, канцерогенные свойства будут сильно проявляться при наиболее больших концентрациях.

Таким образом, метод ПАВС указывает на негативное воздействие использования в пищевой промышленности данных синтетических красителей.

1. Report on Carcinogens, Twelfth Edition 2011, U.S.Department of Health and Human Services National Toxicology Program.
2. Никитина Е. В., Решетник О.А. Биобезопасность пищевых продуктов: Учебное пособие. КГТУ – Казань, 2006, 92 с.

ОЦЕНКА ПРИГОДНОСТИ МЕСТНОГО ГЛИНИСТОГО СЫРЬЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКОГО ГРАНИТА

Щурко М.Н., Позняк А.И.

*Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»,
Минск, Республика Беларусь
poznyak_a@inbox.ru*

Высокая механическая прочность, износостойкость и, как следствие, долговечность, наряду с экологической безопасностью делают керамический гранит востребованным материалом в современном строительстве. Разработка сырьевых композиций для изготовления керамогранита на основе местного сырья актуальна, поскольку послужит основой для создания импортозамещающих технологий производства этого вида строительного материала. Возможность получения керамического гранита была исследована на основе использования местной тугоплавкой глины месторождения «Туровское» (Республика Беларусь) в составе керамической массы, применяемой в ОАО «Березастройматериалы». При проведении эксперимента комплексно исследовано глинистое сырье, разработаны сырьевые композиции, определены физико-химические характеристики опытных образцов, а также установлено влияние отдельных компонентов шихты на свойства, структуру и фазовый состав полученной керамики.

На основании проведенных исследований установлено, что глина «Туровское» относится к группе каолинито-гидрослюдистых глин и является тугоплавкой, среднепластичной, полукислой, среднедисперсной, среднетемпературного спекания. Это позволило сделать предположение о возможности частичной или полной замены импортируемой из Украины огнеупорной глины в керамических массах, на основании чего разработаны составы композиций с использованием глины «Туровское». Анализ физико-химических свойств полученных при температуре обжига 1200 °С образцов позволил установить целесообразность введения 6–8 мас. % глины «Туровское» взамен импортируемой огнеупорной глины, при этом керамический гранит характеризуется водопоглощением 0,2–0,3 % и величиной открытой пористости 0,6–0,7 %. В полученном керамическом граните диагностируется присутствие α -кварца, муллита, плагиоклаза и значительное количество стекловидной фазы, которая при рациональном сочетании с кристаллическими обуславливает низкие показатели водопоглощения, повышенные значения механической прочности и структуру, близкую к стеклокристаллической.

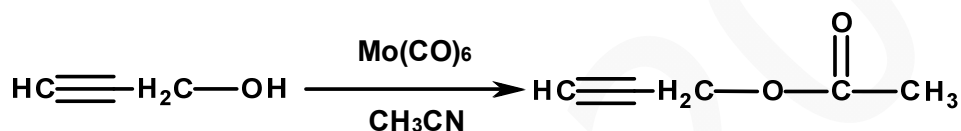
РЕАКЦИИ В СИСТЕМЕ ПРОПАРГИЛОВЫЙ СПИРТ/ГЕКСАКАРБОНИЛМЕТАЛЛ(0)

Плотникова А.В., Черкасов Р.А., Курамшин А.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
anezka_93@mail.ru*

Основываясь на изученных ранее механизмах терминальных алкинов с гексакарбонильными комплексами металлов 6 группы [1] и на том факте, что реакция Соногаширы протекает через стадию окислительного присоединения связи С–Н алкина-1 к нольвалентному металлу [2], мы решили проверить возможность проведения кросс-сочетания галогенаренов и терминальных алкинов в присутствии каталитических количеств гомолигандных карбонильных комплексов металлов группы хрома.

Тем не менее, протекание искомой каталитической реакции кросс-сочетания не наблюдалось. Анализ реакционных смесей с помощью хромато-масс-спектрометрии показал, что галогенарены не принимают участия в реакции функционализации, и единственным продуктом в системе галогенарен/пропаргиловый спирт/ацетонитрил является пропаргилацетат, выход которого по введенному в реакцию пропаргиловому спирту в пилотных экспериментах составлял 70-75%.



Умеренный каталитический выход сложного эфира по взятому в качестве катализатора $\text{Mo}(\text{CO})_6$, составляющий 420%, свидетельствует о возможности стехиометрического участия комплекса в обнаруженной реакции – общее количество способных выступать в качестве источника карбонильных групп молекул монооксида углерода в составе карбонильного комплекса металла не превышает количество пропаргилового спирта.

Изучение обнаруженного процесса в различных системах и средах позволило нам предположить механизм образования сложного эфира, который и обсуждается в настоящем докладе.

1. A.I. Kuramshin, A.A. Nikolaev, R.A. Cherkasov // Mendeleev Commun. – 2005. – Vol. 4. – P. 155-156
2. Angew. Chem., Int. Ed. 2007. – V.46, №6. - P.834-871

СМЕШАННЫЕ ПОЛИГАЛАКТУРОНАТЫ НАТРИЯ-ПАЛЛАДИЯ: СИНТЕЗ И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Попков К.Ю.^b, Немтарев А.В.^{a,b}, Минзанова С.Т.^a, Миронова Л.Г.^a, Миронов В.Ф.^{a,b}

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова КНЦ РАН, Казань

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

a.nemtarev@mail.ru

Катализируемые переходными металлами реакции кросс-сочетания элементарноорганических соединений с органическими электрофилами быстро приобретают значение одного из наиболее универсальных и удобных методов образования новой связи углерод-углерод и углерод-гетероатом.

В настоящее время все большую популярность приобретают методы Pd-катализируемого кросс-сочетания с использованием ацетата палладия в качестве катализатора, что связано с возможностью проведения реакций в водных средах, создавая тем самым благоприятные условия для реализации принципов «зеленой химии».

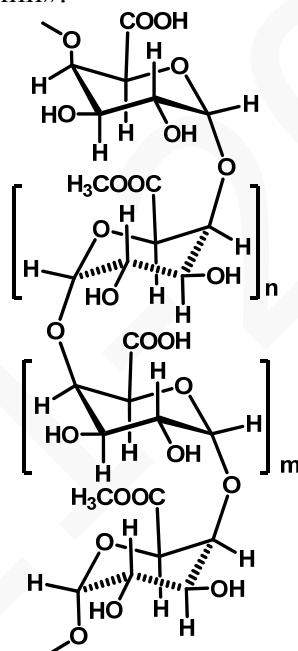


Рисунок 1. Структура гомогалактуронана.

В настоящей работе показано, что в реакциях кросс-сочетания с успехом могут использоваться смешанные Na-Pd соли полиуроновых кислот. Использование последних в реакциях каталитического сочетания позволяет не только осуществлять реакции в водных и водно-органических средах, но и в дальнейшем наиболее полно отделять катализатор методом осаждения.

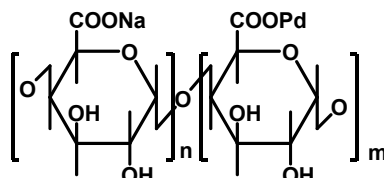


Рисунок 2. Структура полигалактуроната натрия-палладия.

Полигалактуронат Na-Pd (степень замещения натрия 25%) полученный из цитрусового пектина, показал каталитическую активность в реакции Сузуки на примере сочетания 4-йоднитробензола и фенолборной кислоты (условия реакции: вода-ДМФА, 100°C, K₂CO₃, концентрация полигалактуроната Na-Pd 10 мол%). Выход *para*-нитробифенила составил 68%.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ 2D-СЕЛЕКТИВНЫХ АДсорбЕНТОВ НА ОСНОВЕ ГРАФИТОПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ВЭЖХ

Попов А.С., Светлов Д.А., Яшкин С.Н.

ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет», Самара
popoff-freeman@yandex.ru

Графитоподобные адсорбенты нашли широкое практическое применение в качестве высокоселективных сорбентов в газо-адсорбционной хроматографии (ГАХ). Самыми высокими показателями структурной селективности эти адсорбенты характеризуются в отношении пространственных изомеров. Наиболее распространенным графитоподобным адсорбентом для ГАХ является графитированная термическая сажа (ГТС). Аналогом ГТС для высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) является материал *Hypercarb*, представляющий собой продукт пиролиза органических соединений в макропористой силикагельной матрице. В настоящее время этот адсорбент является единственным 2D-селективным адсорбентом в ВЭЖХ, однако его свойства остаются практически не исследованными.

В работе исследованы селективные свойства *Hypercarb* в отношении различных изомеров соединений линейного, циклического и каркасного строения. Показано, что 2D-селективные свойства этого адсорбента в большей степени проявляются при адсорбции из среды сильнополярных элюентов (в частности, водно-метанольных растворов), при этом зависимости параметров удерживания от молекулярных констант сорбатов (поляризуемость, площадь молекулярной посадки и др.) оказываются полностью аналогичными зависимостям, наблюдаемым в условиях ГАХ на ГТС. Для количественной оценки вклада различных факторов в удерживание на поверхности графита в ВЭЖХ был определен большой набор термодинамических параметров адсорбции (константы адсорбционного равновесия, теплоты и энтропии адсорбции). Нами впервые предложено использовать молекулярно-статистические расчеты параметров адсорбции молекул органических соединений из газовой фазы на базисной грани графита для прогнозирования удерживания этих соединений в условиях ВЭЖХ на колонках с *Hypercarb*. Совместное использование результатов расчетов и экспериментальных данных по адсорбции на графите имеет большое практическое значение для идентификации стереоизомеров сложных по составу и строению соединений, поскольку их масс-спектральные характеристики зачастую практически не различаются. Полученные данные были использованы для разделения и идентификации стереоизомерных производных каркасных соединений, в том числе и лекарственных производных адамантана.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНОФИЛЬТРАЦИОННЫХ МЕМБРАН ИЗ ДИАЦЕТАТОВ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ТВЕРДЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ

Потехина Л.Н., Седелкин В.М.

*Энгельский технологический институт (филиал) Саратовского государственного
технического университета имени Гагарина Ю.А., Энгельс
larisa_potehina@mail.ru*

Мембранные технологии находят все большее применение в различных отраслях промышленности, а также при водоподготовке и водоочистке. Основным элементом фильтрационного оборудования являются селективно проницаемые мембраны, которые изготавливаются из различного сырья. Однако наиболее широко используются полимерные мембраны, мировой рынок которых достигает 80%. Особое место среди полимеров, из которых получают фильтрационные мембраны, занимают ацетаты целлюлозы, в частности – диацетаты целлюлозы (ДАЦ), которые использованы в данной работе как полимерное сырье для изготовления мембран. Авторами разработана и защищена патентом на изобретение рецептура полимерных пленочных мембран, получаемых из 5, 7 и 10%-ных растворов диацетатов целлюлозы в ацетоне с новым модифицирующим наполнителем – термообработанными отходами обмолота проса (ТООП), которые представляют собой разрушенную внешнюю оболочку, защищающую зерно [1]. Применение таких наполнителей позволяет не только существенно снизить затраты на их получение и стоимость конечных изделий, но и использовать экологически чистое возобновляемое сырье, что расширит области применения изделий. Авторами изучены структура, эксплуатационные (производительность и задерживающая способность) и прочностные характеристики разработанных мембран. Установлено, что разработанные нанофильтрационные мембраны, модифицированные ТООП, по задерживающей способности являются лучшими, а по производительности не уступают известным мембранам и могут быть рекомендованы к использованию в промышленности, в частности, для извлечения сывороточных белков из вторичного молочного сырья. Внедрение результатов данной разработки позволит расширить утилизацию вторичного сырья в молочной промышленности, а также отходов растениеводства.

1. Пат. 2426305 RU, Смесь для формования ацетатцеллюлозной ультрафильтрационной мембраны/ В.М. Седелкин [и др.]. – Заявл. 24.02.2010; опубл. 20.08.2011, Бюл. № 23.

КАРБОНИЗАЦИЯ ЦЕМЕНТНОЙ МАТРИЦЫ

Приходов Д.А.

*«Сибирский Федеральный Университет», Красноярск
pramid1985@mail.ru*

Портландцемент является важнейшим вяжущим веществом. Основная область его применения приходится на строительство, но и в переработке радиоактивных отходов, полученных от различных радиохимических производств, не обходится без применения портландцемента. Включение в цемент – один из основных методов отверждения как гомогенных, так и гетерогенных радиоактивных отходов. Причина широкого распространения цементирования – негорючесть и отсутствие пластичности у отвержденного продукта, а также простота осуществления процесса смешивания концентрата отходов с цементом. Но к сожалению, цементирование имеет ряд недостатков, одним из которых является значительная вымываемость из цемента включенных в него компонентов. Для уменьшения вымываемости радионуклидов из цементной матрицы необходимо уменьшение пористости цементного камня.

Карбонизация - это процесс, при котором Са-содержащие фазы цемента теряют гидратную воду и преобразуются в карбонатные минералы при реакции с CO₂. Таким образом в результате карбонизации образуются относительно нерастворимые фазы вторичных карбонатов, которые осаждаются в сети цементных пор и соответственно изменяется микроструктура цементного камня.

Глубина карбонизации цементного камня на воздухе при нормальном давлении CO₂ невелика. Искусственная карбонизация поверхностного слоя при повышенной концентрации CO₂ протекает гораздо интенсивнее. [1]

Ранее выполненные исследования обнаружили, что для цемента, на который воздействовал CO₂ из окружающей среды характерно более высокое содержание кальцита, большая прочность и меньшая вымываемость таких элементов как Sr, Cr, Pb, Sb, Zn, Cd, Ba, As и Hg на целых 80%, по сравнению с обычным цементом. [2]

1. «Handbook of advanced radioactive waste conditioning technologies», edited by Michael I. Ojovan, Woodhead Publishing Limited, 2011 – С.67-133.

2. Sean A. Andreou «Intermediate and Low Level Nuclear Waste. Stabilisation. Carbonation of Cement-based Wasteforms», Waterloo, Ontario, Canada, 2003 – 77с.

**ИНДУЦИРОВАННАЯ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ ТОКСИЧНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ
PrF₃ И LaF₃**

Пудовкин М.С.^a, Зеленихин П.В.^b, Кораблева С.Л.^a, Крашенникова А.О.^b, Низамутдиннов А.С.^a, Семашко В.В.^a

^a *Институт физики КФУ, Казань*

^b *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
jaz7778@list.ru*

Благодаря уникальным свойствам, наноматериалы успешно применяются в таких областях, как очистка воды. Так же наноматериалы имеют уникальный биоактивный потенциал и могут быть использованы в медицине [1]. Исследование посвящено токсичности наноматериалов под действием лазерного излучения для биологических объектов. Целями данного исследования является проверка гипотезы токсичности наночастиц PrF₃ и LaF₃ под действием лазерного излучения для биологических объектов, таких как *Salmonella typhimurium* TA 98, а так же проверка гипотезы апоптозирующего действия наночастиц PrF₃ под действием лазерного излучения для раковых клеток человеческих легких *lung carcinoma A549*. Использовались непрерывные лазеры с длинами волн 532 нм и 473 нм. Концентрация клеток сальмонеллы в физрастворе 10⁶ клеток/мл, концентрация наночастиц 0,1 мг/л. В эксперименте определялись оптимальное значение плотности мощности лазерного излучения и оптимальное время экспозиции клеток. При значении плотности мощности лазерного излучения (532 нм) 0,4 В/см² и временах экспозиции: 5, 10 и 15 минут выживаемость клеток (по сравнению с контрольными образцами) составила 39%, 34%, 20% соответственно. Так же было выявлено апоптозирующее действие наночастиц PrF₃ под действием лазерного излучения для раковых клеток человеческих легких *lung carcinoma A549*. Доля клеток, находящихся в состоянии апоптоза для времени облучения 5 мин, 15 мин и 30 мин составляла 23%, 33% и 45%, соответственно для 532 нм.

1. V. Apalanga, V. Rangari, B. Tiimob, S. Jeelani. Applied Surface Science, 2014, 295, 108– 114.

СИНТЕЗ БИС(3-АМИНОПРОПИЛ)АМИНО ПРОИЗВОДНЫХ *p*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ АГЕНТОВ ТРАНСФЕКЦИИ

Пуплампу Дж.Б., Якимова Л.С., Стойков И.И.

Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, Казань
jbruplampu@gmail.com

Соединения, способные селективно связываться с биомакромолекулами, являются перспективными в качестве терапевтических и диагностических средств, а также для создания систем доставки генов. Вещества, способные упаковать ДНК в наноразмерные частицы, могут служить переносчиками генетического материала в клетки. Известно, что макроциклические соединения, полифункционализированные аминогруппами, эффективно взаимодействуют с биологическими субстратами. Тиакаликс[4]ареновая платформа имеет относительно большой размер полости и ряд конфигураций с различной пространственной ориентацией функциональных групп. Поэтому функционализация тиакаликс[4]арена аналогами природных олигоаминов может привести к созданию эффективных трансфекционных агентов.

В данной работе были синтезированы тиакаликс[4]арены, функционализированные бис(3-аминопропил)амином, в конфигурациях *конус* и *1,3-альтернат*. Взаимодействие полученных *p*-трет-бутилтиакаликс[4]аренов с ДНК из тимуса телят было исследовано с помощью УФ-спектроскопии и методом динамического светорассеяния. Структура и состав синтезированных *p*-трет-бутилтиакаликс[4]аренов были охарактеризованы комплексом физических методов: ЯМР ^1H и ^{13}C , ИК-спектроскопией, масс-спектрометрией и элементным анализом.

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

СМЕШАННЫЕ КРИСТАЛЛЫ $\text{CaF}_2\text{-LuF}_3$ АКТИВИРОВАННЫЕ ИОНАМИ Ce^{3+} И Yb^{3+} КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ АКТИВНЫЕ И ПАССИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Рахимов Н.Ф., Низамутдинов А.С., Семашко В.В., Марисов М.А., Шнайдман С.А.

*ФГАОУВПО КФУ, Казань
e-mail: niyaz_06@mail.ru*

Кристаллы $\text{CaF}_2:\text{Ce}^{3+}$ обладают перспективными с точки зрения получения перестраиваемой лазерной генерации УФ диапазона оптическими характеристиками, однако при этом требуется увеличить их фотохимическую стабильность [1, 2].

Целью настоящей работы является исследование влияния соактивации ионами Yb и Lu на оптические и физические характеристики кристаллов $\text{CaF}_2:\text{Ce}^{3+}$. Для этого были зарегистрированы спектральные характеристики серии образцов флюоритов, активированных ионами Ce^{3+} , Yb^{3+} и Lu^{3+} , в том числе спектры поглощения центров окраски, наведенных излучением, резонансным переходом ионов Ce^{3+} . Также нами были определены температурный коэффициент показателя преломления и коэффициент линейного теплового расширения.

Показано, что в результате соактивации ионами Lu^{3+} появляются новые полосы в спектрах люминесценции ионов Ce^{3+} , что обусловлено увеличением доли примесных центров ионов Ce^{3+} различной конфигурации [3]. Также с увеличением концентрации ионов Lu^{3+} снижается теплопроводность.

Однако при этом увеличение концентрации ионов Lu^{3+} в этих кристаллах приводит к подавлению процесса образования примесных центров ионов Yb^{2+} , что уменьшает оптические потери в области люминесценции ионов Ce^{3+} . Таким образом, показано, что кристаллохимический метод подавления паразитных фотодинамических процессов повышает перспективность кристаллов $\text{CaF}_2:\text{Ce}^{3+}$, как активных сред лазеров УФ диапазона.

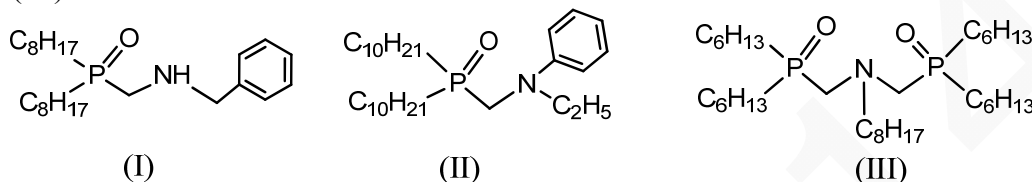
1. G. J. Pogatshnik, D. S. Hamilton Excited state absorption of Ce^{3+} ions in $\text{Ce}^{3+}:\text{CaF}_2$ // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. № 16. P. 8251–8257.
2. R. Yu. Abdulsabirov, S. L. Korableva, A. S. Nizamutdinov, M. A. Marisov, A. K. Naumov, V. V. Semashko, Proc. SPIE, 6054, (2006) 172.
3. M. Yamaga, S. Yabashi, J. – P. R. Wells, G. D. Jones Optical, IR, EPR spectroscopy of $\text{CaF}_2:\text{Ce}$ crystals doped with Li or Na// Journal of Luminescence. 2004. V.108. P.307-311.

МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИМИ РЕАГЕНТАМИ

Рахмаева А.И., Давлетшина Н.В., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
rahmaeva88@yandex.ru*

Изучены мембранно-транспортные свойства липофильных аминоксфорильных соединений (I – III), синтезированных по методике работы [1] по отношению к ионам Nd(III), Sm(III) и Sc(III):



В качестве импрегнированных жидких мембран использовали пленку Р.Т.Ф.Е. из спеченного фторопласта, мембраны «ВЛАДиСАРТ» ФМПТФЭ-0.2 и мембранные фильтры "Владипор" МФФК – 4. Среди всех изученных мембран наиболее низкую эффективность по отношению к выбранным ионам проявляет мембрана «ВЛАДиПОР» МФФК-4. Мембраны «ВЛАДиСАРТ» и Р.Т.Ф.Е. проявляют примерно одинаковую эффективность. В качестве мембранного растворителя использовали 1,2 – дихлорбензол и керосин. Установлено, что 0.2 М растворы реагентов (I) - (III) в 1,2-дихлорбензоле имеют значения проницаемости мембраны P_{Nd} 5.7, 6.6, 17.4, м/с соответственно [1]. При замене мембранного растворителя на керосин, наблюдается незначительное снижение значений проницаемости. Наибольшее значение проницаемости мембраны наблюдается для Nd(III), Sm(III), а наиболее эффективными оказываются переносчики (I) и (II), при этом максимальное значение проницаемости мембраны для иона Nd(III) достигается при использовании перхлоратных и нитратных сред. При использовании бромидных, хлоридных и сульфатных растворов скорость мембранной экстракции значительно ниже и близки между собой.

Изучение влияния кислотности отдающей фазы на примере иона Nd(III) показало, что возрастание концентрации протонов ведет к сильному понижению проницаемости мембран, что вероятно, связано с конкурирующим переносом азотной кислоты.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 13-03-00536)

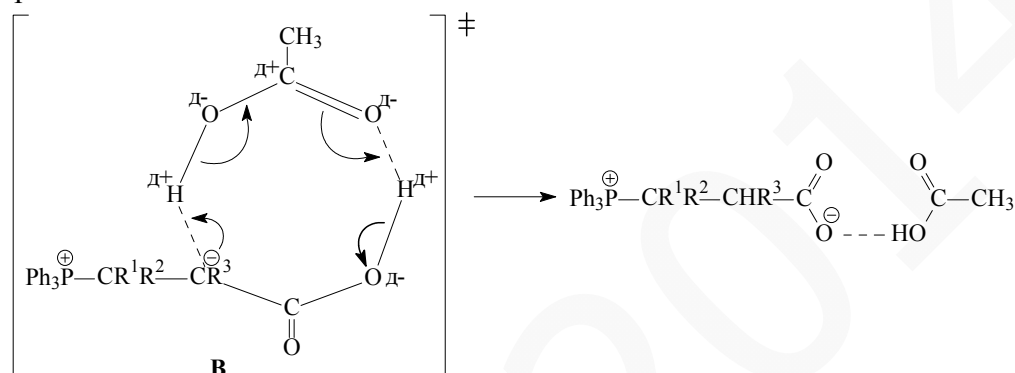
1. А.Р. Гарифзянов, Н.В. Давлетшина, Е.Ю. Мятиш, Р.А. Черкасов. Ж. общ. химии, 2013, 83, 213-219.

РЕАКЦИИ ТРИФЕНИЛФОСФИНА С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ В СРЕДЕ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

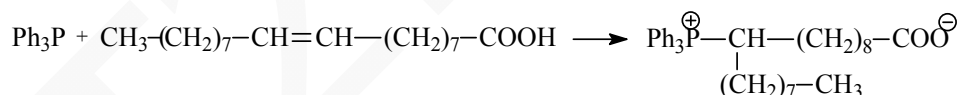
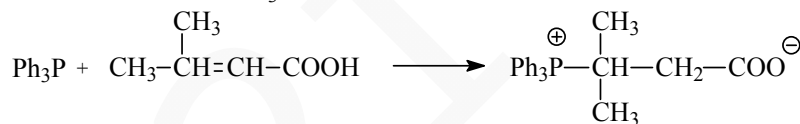
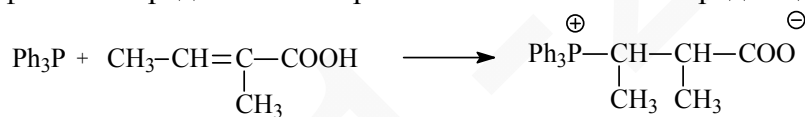
Рахманова А.Р., Гиниятова А.Р., Миннуллин Р.Р.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
alsu-rahmanova@mail.ru

При изучении кинетики и механизма взаимодействия третичных фосфинов с непредельными карбоновыми кислотами в различных средах было установлено, что процесс кватернизации зависит от природы растворителя, и всегда требует участия третьей молекулы – протонодонора.



Опираясь на данное исследование, мы попробовали провести некоторые реакции трифенилфосфина с непредельными карбоновыми кислотами в среде ледяной уксусной кислоты.



Действительно, скорость образования продуктов реакций (фосфабетайнов) и побочных продуктов (трифенилфосфиноксида) в уксусной кислоте по сравнению с другими растворителями заметно увеличилась. Протекание реакций мы отслеживали методом ЯМР ^{31}P . Примерно в течение одной-двух недель сигнал исходного трифенилфосфина существенно уменьшался или исчезал практически полностью.

Однако, мы столкнулись с другой проблемой, выделить продукты в чистом виде оказалось затруднительно из-за сложностей удаления уксусной кислоты в синтетических экспериментах.

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ СТРУКТУР

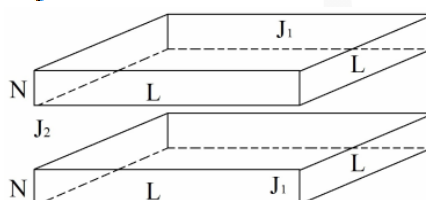
Романовский Д.Е.

ФГБОУ ВПО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», Омск
romfizz898@gmail.com

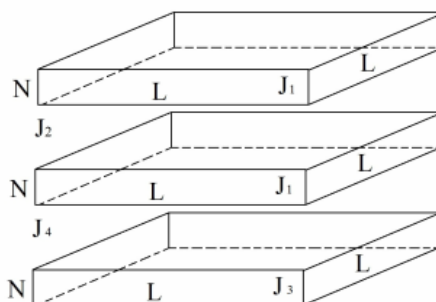
В последнее десятилетие наблюдается значительный рост интереса к проблеме описания свойств тонких магнитных пленок [1, 2]. В мультислойных структурах, представляющих собой слои 3d ферромагнитного металла, разделенных немагнитным проводником, реализуется эффект гигантского магнитосопротивления. Путем взаимодействия с внешним магнитным полем сопротивление такой структуры изменяется на очень большую величину [3]. Датчики на основе данных эффектов нашли широкое применение в технике [4].

Исследование подобных структур проводилось на основе модели Изинга по алгоритму Метрополиса. Гамильтониан системы записывается в виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (1)$$



Значение обменного интеграла для взаимодействия соседних спинов внутри слоя $J_1 > 0$, для взаимодействия между слоями $J_2 < 0$.



Так же нами были рассмотрены т.н. спиновых вентили, для чего был добавлен еще один слой с константой обменного взаимодействия $J_3 < 0$, фиксирующий ориентацию намагниченности спаренного с ним слоя путем обменного взаимодействия с константой $J_4 > 0$

Из полученных нами результатов можно сделать вывод, что петли гистерезиса для подобных систем сужаются с уменьшением по модулю значения обменного интеграла антиферромагнитного взаимодействия между пленками, а для структур типа спин-вентильных сэндвичей- смещаются относительно $h=0$.

1. Chappert C, Fert A, F Nguyen van Dau 2007 Nature Mater 6 813
2. Vaz C A F, Bland J A C, Lauhoff G 2008 Rep. Prog. Phys. 71 056501
3. Baibich M.N., Broto J.M., Fert A. et al. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 2472–2476.
4. Shu-Jen Yan, Liang Xu, Heng Yu, et al. CMOS Integrated DNA Microarray Based on GMR Sensors

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЯМР ИГМП РАСТВОРОВ ФРАГМЕНТА ОБМ S72-R103

Рощина А.И., Рудакова М.А., Гнездилов О.И.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань
al-roshchina@mail.ru*

В данной работе исследовалась степень влияния различных растворителей на состояние фрагмента основного белка миелина (ОБМ) при помощи изучения трансляционной подвижности методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля (ЯМР ИГМП), для определения растворителя, подходящего для приготовления модельных липидных ориентированных образцов с участием ОБМ. В качестве объекта исследования был выбран центральный фрагмент ОБМ изоформы 18,5 кДа, включающий в себя амфипатическую альфа-спираль и отвечающий за «слипание» цитоплазматических поверхностей мембраны [1]. Данный фрагмент ОБМ в концентрации 1,2мМ был исследован в 5 растворителях, представлявших собой водные растворы с различной концентрацией трифторэтанола (ТФЭ).

Исследование образцов проведено на спектрометре «AVANCE 400 III TM» при температуре 300К и временах диффузии от 30 до 60 мс. Из эксперимента были получены диффузионные затухания (ДЗ) для каждого образца. Типичный вид ДЗ можно описать суммой как минимум двух экспонент с различными коэффициентами. На основе полученных данных оценено [2] значение гидродинамического радиуса пептида во всех 5 растворителях, как параметра, дающего оценку степени влияния растворителя на состояние фрагмента ОБМ [2]. И на основании анализа данных сделано заключение, что в качестве растворителя при приготовлении модельных ориентированных мембран можно использовать буферный раствор, как минимально влияющий на состояние фрагмента ОБМ. При этом необходимо внести изменения в процедуру приготовления таких мембран, связанные с использованием данного растворителя.

1. A. M. Ahmed, M. D. Avila, *Biochemistry*, 2012, 51, 7475-7578.
2. А. В. Халиуллина, А. В. Филиппов, *Институт физики К(П)ФУ*, 2013, 10-42

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ Sr-Y-Me-O (Me=Fe,Co)

Рудик В.В., Урусова А.С., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург
Vika_19_93@mail.ru

Данная работа посвящена изучению кристаллической структуры и кислородной нестехиометрии сложных оксидов состава $Y_{1-x}Sr_xMeO_{3-\delta}$ (Me=Fe,Co).

По глицерин-нитратной технологии синтезированы сложные оксиды $Y_{1-x}Sr_xMeO_{3-\delta}$ (Me=Fe,Co). Для определения области гомогенности оксидов $Y_{1-x}Sr_xMeO_{3-\delta}$ (Me=Fe,Co) растворным методом были приготовлены образцы в интервале составов $0.0 \leq x \leq 1.0$ с шагом 0.1.

Подобно незамещенному кобальтиту $YCoO_{3-\delta}$, дифрактограммы твердых растворов $Y_{1-x}Sr_xCoO_{3-\delta}$ с $0.0 \leq x \leq 0.1$, медленно охлажденных на воздухе с 1173 К до комнатной температуры, были проиндексированы в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. $Pbnm$). Дальнейшее увеличение содержания стронция в образцах и температуры отжига до 1373 К приводит к появлению твердых растворов $Y_{1-x}Sr_xCoO_{3-\delta}$ с тетрагональной ячейкой (пр. гр. $I4/mmm$) в интервале составов $0.7 \leq x < 0.9$ и в кубической ячейке (пр. гр. $Pm3m$) $x=0.1$. Методом термогравиметрического анализ для $Y_{1-x}Sr_xCoO_{3-\delta}$ ($x=0; 0.8; 1.0$) получены зависимости кислородной нестехиометрии (δ) от температуры в интервале 298–1173 К на воздухе.

По результатам РФА всех исследованных образцов диаграмма состояния квазитройной системы Y-Sr-Co-O при 1373 К на воздухе была разбита на 10 фазовых полей.

Дифрактограммы твердых растворов $Y_{1-x}Sr_xFeO_{3-\delta}$ с $0.0 \leq x \leq 0.6$, закаленных на комнатную температуру с 1373 К, были проиндексированы в рамках кубической ячейки (пр. гр. $Fm3m$).

На данный момент исследования диаграмма состояния квазитройной системы Y-Sr-Fe-O при 1373 К была разбита на 4 фазовых поля.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ФОРМ ПРИСУТСТВИЯ КИСЛОРОДА В НАНОПОРОШКАХ КАРБИДА ТИТАНА МЕТОДОМ ФРАКЦИОННОГО ГАЗОВОГО АНАЛИЗА

Румянцев Б.А., Алпатов А.В.

ИМЕТ РАН, Москва
rumin_@mail.ru

Карбид титана получил широкое распространение в виде износостойких покрытий при получении твердых сплавов, в качестве наполнителя для армирования матрицы композиционных материалов, в спеченном пористом виде для фильтрации расплавов металлов, агрессивных жидкостей и газов, и т.д.

В основном карбид титана получают и применяют в дальнейшем в виде порошков различной крупности. При этом основной примесью, значительно влияющей на свойства порошка карбида титана, является кислород, который в несколько раз может превышать суммарное содержание всех остальных примесей. Источниками кислорода для порошков TiC являются технологическая и окружающая атмосферы при получении, а также окисление поверхности при пассивации, размола и хранении. Таким образом, актуальным становится анализ содержания кислорода и определение форм его присутствия в порошках карбида титана.

Проведено исследование содержания и форм присутствия кислорода в нанопорошках карбида титана TiC, полученных методом гидридно-кальциевого восстановления из оксидов. Кислород, содержащийся в порошке, качественно и количественно разделён на: кислород в виде адсорбированной воды; кислород в форме органических соединений на поверхности; кислород в составе окисленной поверхности нанопорошка карбида; кислорода, растворенный в решетки TiC в виде сложных оксикарбидов. Выполнен фракционный газовый анализ углерода в нанопорошках карбида титана.

ОЦЕНКА СТОЙКОСТИ АКРИЛОНИТРИЛБУТАДИЕНСТИРОЛЬНОГО СОПОЛИМЕРА К ВОЗДЕЙСТВИЮ ЦИКЛОПЕНТАНА

Садриева А.Г., Трифонова О.М., Ахметов И.Г.

*Научно-технологический центр ПАО «Нижнекамскнефтехим», Нижнекамск
mulyukova-albina@yandex.ru*

Широкий спектр применения акрилонитрилбутадиенстирольных пластиков (АБС-пластиков) обусловлен их превосходными механическими свойствами. Благодаря наличию в своем составе акрилонитрила они обладают повышенной стойкостью к атмосферному и химическому воздействию, что позволяет использовать их в холодильной промышленности. Вспенивание теплоизоляционного материала, используемого между внутренним полимерным и наружным металлическим шкафами холодильника, производится циклопентаном непосредственно при сборке. При недостаточном уровне химической стойкости полимера может происходить растрескивание внутреннего шкафа, что недопустимо в условиях промышленного производства.

Для оценки стойкости пластмасс к химическим реагентам существуют несколько стандартизированных методов с общими правилами проведения испытаний. Однако единого метода оценки стойкости именно АБС-пластиков к циклопентану нет. В связи с чем, подбор метода оценки и определение уровня химической стойкости АБС-пластиков представляет научный и практический интерес.

В лабораторных условиях испытаны экструзионные и литьевые марки АБС-пластиков: по методике экспресс-анализа на стойкость к фреону полистирольных пластиков, основанной на определении изменения показателя текучести расплава полимера до и после выдержки в циклопентане; по ГОСТ 12020-72; по изменению внешнего вида и массы гранул образцов, выдержанных в среде циклопентана.

Полученные результаты исследований подтверждают высокую химическую стойкость АБС-пластиков. Таким образом, изучены разные методы оценки стойкости АБС-пластиков к воздействию циклопентана, разработана методика измерений, учитывающая напряженное состояние изделия, подобраны экструзионные и литьевые марки АБС-пластиков, обладающие комплексом физико-механических характеристик, соответствующих требованиям производителей холодильников.

АГРЕГАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ, СОЛЮБИЛИЗАЦИОННОЕ ДЕЙСТВИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИКАТИОННЫХ ПАВ 14-s-14

Садыкова А.И.^a, Миргородская А.Б.^b, Яцкевич Е.И.^b, Захарова Л.Я.^{a,b}

^a КНИТУ, Казань

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
kerpe007@mail.ru

Катионные поверхностно-активные вещества (ПАВ) обладают выраженными поверхностными и агрегационными свойствами, что привлекает широкий интерес к комплексному исследованию этого класса соединений и приводит к их успешному применению в различных отраслях промышленности, медицины и сельского хозяйства. Практически важным свойством систем на основе ПАВ является их способность солюбилизировать неполярные органические соединения, тем самым увеличивая их растворимость в воде.

Целью настоящей работы явилось выявление взаимосвязи между, агрегационным поведением, солюбилизационным действием и каталитической активностью в процессах нуклеофильного замещения дикатионных ПАВ типа 14-s-14 и сопоставление полученных данных со свойствами бетаинового ПАВ (Sb 3-14). В структуре этих соединений присутствует тетрадецильный радикал, а также полиметиленовый фрагмент, соединяющий две одноименно или противоположно заряженные головные группы соответственно.

В работе использовался ряд физико-химических методов исследования: тензиометрия, динамическое рассеяние света, флуориметрия, спектрофотометрия и химическая кинетика.

Установлено, что дикатионные и бетаиновые ПАВ обладают достаточно низкими значениями критической концентрации мицеллообразования, однако солюбилизационная емкость в отношении ряда гидрофобных полиароматических соединений (тимолфталеин, пирен, продан, Оранж ОТ) у дикатионных ПАВ оказывается вдвое выше, чем у Sb 3-14. Выявлено, что по мере увеличения длины спейсерного фрагмента у ПАВ типа 14-s-14 возрастает поверхностный потенциал мицеллы. Это находит отражение в каталитическом действии исследуемых ПАВ – максимальным эффектом в процессах щелочного гидролиза сложных эфиров обладает дикатионное ПАВ 14-6-14: ускорение щелочного гидролиза п-нитрофенилдеcanoата, достигаемое введением этого ПАВ в концентрации 0.7 мМ превышает два порядка.

НОВЫЕ АСПЕКТЫ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АКРОЛЕИНА ПО ОТНОШЕНИЮ К АЗИДАМ И ОБНАРУЖЕНИЕ АКРОЛЕИНА *IN VIVO*

Сайгитбаталова Е.Ш.^{a,b}, Прадипта А.Р.^b, Таичи М.^b, Курбангалиева А.Р.^a, Танака К.^{a,b}

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

^b Институт физико-химических исследований RIKEN, Вако, Япония
lena824773@yandex.ru

Акролеин – это высокотоксичный ненасыщенный альдегид, который образуется при горении жиров, масел, угля, древесины и пластика. Кроме того, акролеин может выделяться клетками в условиях окислительного стресса, в ходе ферментативного окисления треонина или полиаминов, а также при окислении полиненасыщенных липидов активными формами кислорода. Акролеин обладает высокой реакционной способностью и может вступать в реакции с тиольной, гидроксильной или амино-группами молекул ДНК, белков и фосфатидилэтаноламинов, ускоряя при этом процессы окислительного стресса, сопровождающие развитие и прогрессирование многих заболеваний. Поэтому разработка эффективных методов обнаружения акролеина, особенно внутри клеток, является крайне важной и актуальной задачей.

Хорошо известно, что органические азиды участвуют в реакциях циклоприсоединения с ацетиленами, а также реагируют с различными ненасыщенными карбонильными соединениями. Несмотря на то, что реакционная способность азидов по отношению к ненасыщенным кетонам и эфирам изучена достаточно хорошо, примеры реакций с акролеином единичны. Нами показано, что органические азиды легко реагируют при комнатной температуре с акролеином как в органических, так и водных средах, образуя продукты, отличные от продуктов взаимодействия азидов с кетонами или эфирами. Интересно, что полученные продукты далее способны реагировать с аминогруппами биомолекул с образованием ковалентных связей с белками и пептидами.

Используя данные аспекты реакционной способности, нами синтезированы флуоресцентные вещества и проведено детектирование акролеина как внутри, так и на поверхности клеток. Акролеин, выделенный из табачного дыма, был успешно обнаружен в клетках. Полученные данные свидетельствуют о перспективности использования данной *in vivo* реакции с участием акролеина и азидов в области диагностики различных заболеваний.

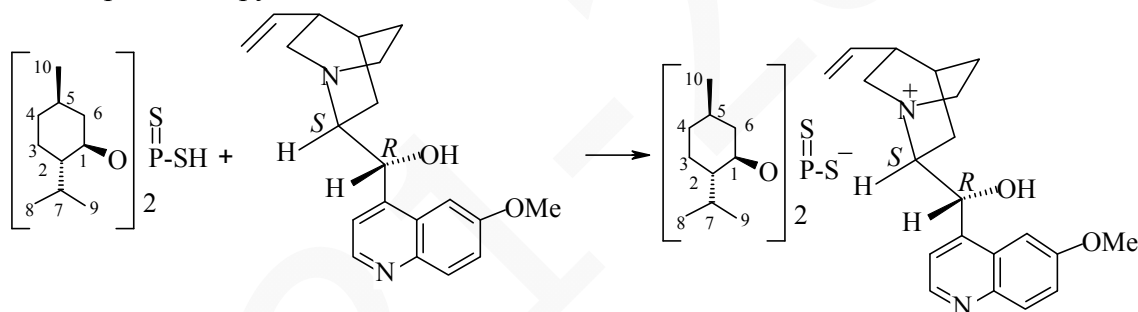
Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

ХИНИН В СИНТЕЗЕ ХИРАЛЬНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФOSФОРНЫХ КИСЛОТ

Салихов Р.З., Гафуров З.Н., Никитин Е.Н., Низамов И.С., Черкасов Р.А.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
BigDaddyHusk@gmail.com

Дитиофосфаты аммония в отличие от соответствующих дитиокислот фосфора с неприятным запахом представляют собой твердые вещества, практически не имеют запаха, удобны в экспериментальной работе. При введении асимметрических центров в дитиофосфатные анионы и в органические заместители в аммониевом катионе в дитиофосфатах аммония могут быть созданы новые антимикробные препараты. Для получения хиральных дитиофосфорных кислот использованы реакции тетрафосфордекасульфида с оптически активными циклическими монотерпеновыми спиртами. В качестве источника хиральности в аминах использован хинин как представитель цинхоновых алкалоидов, молекулы которых включают хинолиновую структуру и бициклическую винилзамещенную хинуклидиновую систему с третичным амином. Так, найдено, что *O,O*-бис[(-)-(1*R*,2*S*,5*R*)-2-изо-пропил-5-метилциклогекс-1-ил]дитиофосфорная кислота, полученная в реакции тетрафосфордекасульфида с (*S*)-(-)-ментолом, реагирует с хинином при 60°C в течение 4 ч в бензоле, приводя к образованию (8*S*,9*S*)-цинхонан-9-иламмониевой соли дитиофосфорной кислоты (δ_p 105.7 м.д.). В спектре ЯМР ^1H в CDCl_3 синглет при δ 3.70 м.д. принадлежит протонам группы CH_3O .



Изомерная [O,O-ди-(+)-1*S*,2*R*,5*S*-2-изо-пропил-5-метилциклогекс-1-ил]дитиофосфорная кислота, синтезированная из (*R*)-(+)-ментола, в аналогичных условиях образует с хинином соответствующую хиральную аммониевую соль.

РАЗРАБОТКА ГЕНОМНОГО МЕТОДА ДЛЯ ПОДТВЕРЖДЕНИЯ АУТЕНТИЧНОСТИ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

Мликов Е.М.^a, Барышева Д.А.^b, Семёнов Н.О.^a

^a Химико-биологический факультет ОГУ, Оренбург

^b Финансово-экономический факультет ОГУ, Оренбург
ndee7@me.com

В результате проведенной работы был разработан геномный метод для подтверждения аутентичности пищевых продуктов на основании специфических биологических макромолекул, в частности геномной ДНК. Были проведены исследования по изучению влияния экзогенных химических факторов, таких как удобрения и талые воды, и технологического процесса на геномную ДНК растений на примере томатов *Solanum lycopersicum*, и изготавливаемых из них продуктов питания (кетчупы и томатная паста). Обнаружение повреждений ДНК позволяет выявить вещества, присутствие которых в продуктах питания допускается существующими государственными стандартами и, следовательно, не оказывающих негативного воздействия по отдельности, но способных проявлять его при условии синергического действия. Геномная ДНК, содержащаяся в исследуемых продуктах питания, выполняет роль вещества-индикатора, которое изначально присутствует в продукте, а значит, нет необходимости добавлять его в процессе исследования. Это позволяет снизить стоимость анализа и вероятность ошибки, повышает надёжность полученных результатов. Исследуемые структуры (ДНК) являются биологическими природными объектами, так же как и человеческий организм, что даёт основания говорить о большей надёжности геномного метода для подтверждения аутентичности пищевых продуктов и идентификации используемого сырья.

Результаты планируется дополнить протеомическими данными. После этого возможно создание методики скрининговой оценки возможного канцерогенного и тератогенного качества продуктов питания. Сокращение перечня используемых расходных материалов и выполняемых операций позволит снизить вероятность получения ошибочных результатов, а принципиально новый подход позволит выявить ранее упущенные из виду побочные эффекты.

Работа выполнена при поддержке областного гранта № госрегистрации 114070970002 Тема: № 8 от 30.06.2014.

СИНТЕЗ ОЛИГОПЕПТИДОВ ГЛИЦИНА В ПРОТОЧНОЙ СИСТЕМЕ

Серов Н.Ю., Штырлин В.Г.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Serov.Nikita@gmail.com*

Одной из крупных и нерешенных проблем современной науки является пребиотический синтез пептидов. Несмотря на многочисленные попытки исследователей, до сих пор не установлены оптимальные условия, кинетические параметры и механизмы пептидного синтеза на первых ступенях биохимической эволюции.

В плане разработки проблемы пребиотического синтеза в настоящей работе исследована кинетика образования олигопептидов в системе глицин – триметафосфат натрия – имидазол в водной среде при различных температурах и значениях pH. Для синтеза была использована проточная система ASIA-330 (Syrris). Процесс осуществлялся в циклическом режиме: после прохождения через трубчатый реактор реакционная смесь возвращалась в резервуар, в котором pH поддерживался постоянным введением раствора гидроксида натрия с помощью автоматического титратора Basic Titrino 794 (Metrohm). Мониторинг за протеканием синтеза осуществлялся с помощью ВЭЖХ системы Knauer Smartline методом ион-парной обращено-фазовой хроматографии.

Установлено образование значительных количеств глицилглицина и диглицилглицина. Кинетические зависимости концентраций олигопептидов выходят на предел через 10-30 часов. Выход глицилглицина через 20 часов составлял 10-50% (в зависимости от условий), диглицилглицина – до 2%. С повышением температуры от 45 до 75 °С выходы олигопептидов увеличиваются. Конечные выходы дипептида при значениях pH 9.5 и 10.5 почти одинаковы и в два раза больше, чем при pH 11.5. В то же время выход трипептида при pH 9.5 более чем в два раза превосходит соответствующий выход при pH 10.5, а при pH 11.5 трипептид образуется в минорных количествах. Наблюдается некоторая зависимость выходов олигопептидов от времени пребывания в проточном реакторе.

Из полученных кинетических зависимостей путем математического моделирования найдены кинетические параметры изученных процессов. На этой основе предложен механизм реакций образования олигопептидов в исследованных системах.

СИНТЕЗ НОВЫХ ОПТИЧЕСКИ ЧИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ 2(5*H*)-ФУРАНОНА

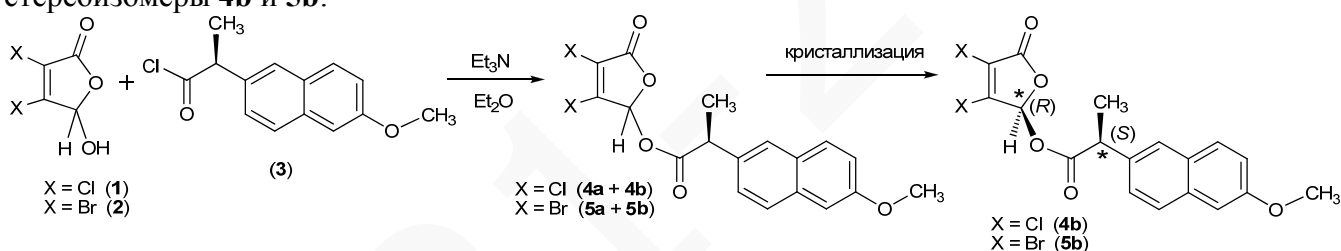
Сибгатуллина Р.Р.^a, Латыпова Л.З.^a, Лодочникова О.А.^b, Чмутова Г.А.^a, Курбангалиева А.Р.^a

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

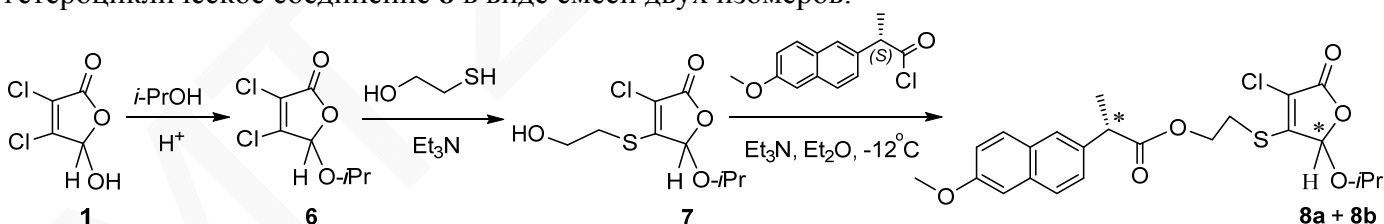
^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань
Regina.Sibgatullina@mail.ru

Молекулы, имеющие в своем составе ненасыщенный γ -лактонный цикл, встречаются во многих природных объектах и проявляют различные виды биологической активности, такие как противогрибковую, антибактериальную и противоопухолевую. Для получения оптически чистых соединений на основе фуранона можно вводить в молекулу различные хиральные фрагменты и разделять образующиеся диастереомеры. В качестве подобного хирального реагента нами выбран *S*-напроксен, который является одним из представителей класса нестероидных противовоспалительных препаратов.

Данная работа посвящена разработке методов синтеза оптически чистых гетероциклических соединений, сочетающих в себе фрагменты 2(5*H*)-фуранона и *S*-напроксена. Так, при обработке мукохлорной **1** и мукобромной **2** кислот хлорангидридом напроксена **3** в присутствии Et₃N получены новые гетероциклы **4** и **5** в виде смеси диастереомеров **4a** + **4b** и **5a** + **5b**, соответственно. Методом колоночной хроматографии с последующей перекристаллизацией из тетрахлорметана нами в обоих случаях были выделены и спектрально охарактеризованы *R*-стереоизомеры **4b** и **5b**:



С помощью хлорангидрида напроксена проведена реакция *O*-ацилирования по свободной гидроксильной группе тиоэфира **7**, полученного в две стадии из фуранона **1**. Получено новое гетероциклическое соединение **8** в виде смеси двух изомеров:



МЕТОДИКА КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ЭОС НА ОСНОВЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ФОРМЫ ОЖЕ-СПЕКТРОВ

Сметюхова Т.Н., Подгорный Д.А.

*НИТУ «МИСиС», Москва
smetyukhova.t.n@yandex.ru*

В настоящее время особый интерес вызывает получение и исследование новых материалов, обладающих уникальными свойствами, в том числе и наноматериалов. Метод электронной оже-спектроскопии (ЭОС), обладающий высокой локальностью, позволяет получать информацию об элементном и химическом составе исследуемых наноразмерных областей (сверхтонкие плёнки, адсорбированные, скрытые и переходные слои, границы раздела фаз, сегрегации примесей и т.д.) и проводить полуколичественный анализ с высокой точностью.

При проведении количественного анализа методом ЭОС наиболее распространена стандартная методика, включающая дифференцирование оже-спектров. Данная методика имеет ряд недостатков, связанных с дифференцированием. Поэтому на сегодняшний день наиболее актуальна обработка спектров с использованием интегральной (первоначальной) формы. В настоящее время единого подхода к количественному анализу на основе интегральной формы оже-спектров нет. Поэтому в данной работе была разработана методика количественного анализа методом ЭОС по интегральной форме оже-спектров с использованием последовательного вычитания фона. Для этого было установлено, что фон на оже-спектре имеет три составляющие: фон неупругорассеянных первичных электронов; фон, образованный каскадом вторичных электронов; фон неупругорассеянных вторичных электронов, включая неупругорассеянные оже-электронов [1,2]. Были определены математические функции, описывающие каждый фон, и подобраны их коэффициенты. Для разработки методики и её апробации были использованы оже-спектры меди, алюминия, железа, кремния и их оксидов. Определены коэффициенты относительной элементной чувствительности (КОЭЧ) элементов для интегральной формы оже-спектров относительно оже-пика Cu LVV (918 эВ) чистой меди при энергии первичного пучка электронов 10 кэВ.

Разработанная методика позволит производить количественный анализ с меньшими искажениями в форме и интенсивности оже-линий, что также важно для анализа химического состояния, и с большей точностью по сравнению со стандартной методикой.

1. M. P. Seah, Surface and Interface Analysis, 1996, V. 24, P. 830-838.
2. J.-P. Langeron, Surface and Interface Analysis, 1989, V. 14, P.381-387.

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ СУЛЬФОНИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА

Смирнов И.С.^a, Латыпова Л.З.^a, Тризна Е.Ю.^b, Каюмов А.Р.^b, Лодочникова О.А.^c,
Бердников Е.А.^a, Чмутова Г.А.^a, Курбангалиева А.Р.^a

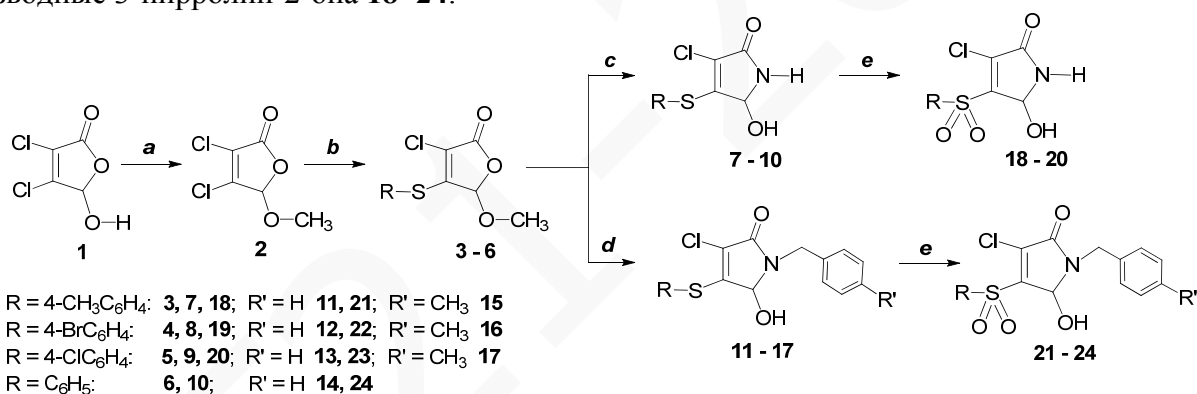
^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

^b Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань

^c Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань

smirnov453@gmail.com

Данная работа посвящена разработке препаративных методов синтеза сульфонильных производных 3-пирролин-2-она и изучению их способности ингибировать рост различных бактерий и процесс образования биопленок. Синтетический подход включает реакцию окисления тиоэфиров пирролинонового ряда, получаемых в три стадии из доступного 5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5H)-фуранона (**1**). На первой стадии по известной методике был синтезирован 5-метокси-2(5H)-фуранон **2**, в молекулу которого далее в условиях основного катализа вводились арилтиоэзаместители в 4 положение γ -лактонного цикла. На следующей стадии осуществляли аммонолиз и аминирование соединений **3–6** водным раствором аммиака или эфирным раствором бензиламина. Полученные тиоэфиры пирролинона **7–17** окисляли 33% раствором пероксида водорода в уксусной кислоте и с выходами 74–82% выделяли новые сульфонильные производные 3-пирролин-2-она **18–24**:



(a) CH_3OH (изб.), бензол, H_2SO_4 конц. (0.1 моль), **(b)** RSH (1 моль), Et_3N (1 моль), Et_2O , $t_{\text{комн.}}$, **(c)** NH_3 (водн.) (изб.), Et_2O , $t = -13^\circ\text{C} \rightarrow t_{\text{комн.}}$, **(d)** $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{R}'$ (1.5 моль), Et_2O , $t = -13^\circ\text{C} \rightarrow t_{\text{комн.}}$, **(e)** H_2O_2 (изб.), CH_3COOH , $t_{\text{комн.}}$

Проведен скрининг новых синтезированных производных 3-пирролин-2-она **7–24**, который позволил выявить соединения, эффективно подавляющие образование биопленок клетками *Staphylococcus aureus* и *Staphylococcus epidermidis*. Для отобранных образцов определены минимальные концентрации, ингибирующие рост образование биопленок этими бактериями, оценены цитотоксичность и мутагенность соединений.

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

АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НЕЗАМЕЩЕННОГО ПИЛЛАР[5]АРЕНА

Смолко В.А., Порфирьева А.В., Шурпик Д.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
vas1993@yandex.ru*

Макроциклические рецепторы находят растущее применение в составе электрохимических сенсоров благодаря их возможностям молекулярного распознавания и модификации структуры путем введения заместителей различной природы. Ранее [1] нами были изучены медиаторные свойства незамещенного пиллар[5]арена в растворе и на поверхности рабочего электрода, модифицированного полианилином. В данной работе разработаны вольтамперометрические сенсоры, включающие пиллар[5]арен в слое углеродной черни на стеклоуглероде. Показано, что пиллар[5]арен участвует в обратимом переносе электрона с образованием пары несимметричных пиков в области, близкой к окислению гидрохинона, причем токи пика зависят от концентрации и природы аниона фонового электролита (измерения в ГЕПЕС-буферном растворе, pH 7.0). Введение в раствор калиевых и натриевых солей нитрат-, гидрофосфат- и хлорид-ионов закономерно уменьшало ток пика восстановления и увеличивало ток окисления пиллар[5]арена в интервале концентраций анионов 1.0 мкМ – 10 мМ. Установлены рабочие условия нанесения модификатора и достижения минимального времени насыщения слоя. Изменение природы щелочного металла – катиона соли – на сигнал сенсора практически не влияло. Предположительно изменение регистрируемых токов обусловлено влиянием аниона на равновесие протонирования-депротонирования гидроксидных групп пиллар[5]арена и как следствие – легкость окисления гидрохиноновых фрагментов макроцикла. Найденные закономерности могут найти применение в разработке амперометрических сенсоров на неорганические анионы.

Исследования проводили при поддержке Российского научного фонда (грант 14-13-00058).

1. V.A. Smolko, D.N. Shurpik, R.V. Shamagsumova et. al. *Electrochim. Acta*, 2014, 147, 726-734.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ УЛЬТРАТОНКИХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ АНИЗОТРОПИИ

Солдусова А.П., Прудников П.В.

*Кафедра теоретической физики, ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, Омск
anka_omsk@mail.ru*

Магнитные пленки демонстрируют широкий спектр фазовых состояний и связанных с ними переходов, таких как, спин-ориентационный переход [1], связанный с изменением направления упорядочения спинов, переходы, связанные с изменением доменной структуры [2] и др. Природа данных переходов может получить объяснение на основе моделирования магнитных анизотропных систем с дальнедействующим взаимодействием.

В представленной работе проводилось моделирование двухслойной магнитной пленки на основе анизотропной модели Гейзенберга, задаваемой гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - A \sum_i S_{i,z}^2 - h \sum_i \vec{S}_i + D \sum_{i \neq j} \left(\frac{\vec{S}_i \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right)$$

где J – константа обменного взаимодействия, A – константа анизотропии, h – внешнее магнитное поле, D – константа диполь-дипольного взаимодействия.

В работе было показано существование фазового перехода в системе при учете одноосной анизотропии и диполь-дипольного взаимодействия. В случае больших констант диполь-дипольного взаимодействия ($D \geq 10J$) в системе возникает полосовая доменная структура с упорядочением спинов вдоль одной из осей в плоскости с противоположной ориентацией в соседних полосах. Также в работе проводилось моделирование системы при наличии диполь-дипольного взаимодействия только между соседними слоями. В этом случае данное взаимодействие носит эффективный антиферромагнитный характер.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-12-00562). Численные исследования были проведены с привлечением ресурсов СКИФ МГУ «Чебышев» и Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. S.A. Pighin, O.V. Billoni and S.A. Cannas. Phys. Rev. E, 2012, 86, 051119.
2. J.P. Chen, Z.Q. Wang, J.J. Gong, V.H., et al. Journal of Applied Physics, 2013, 113, 054312.

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОЙ ГРАНИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АКТИВИРОВАННОЙ АДсорбЦИИ МОНОСЛОЙНЫХ ПЛЕНОК ЖЕЛЕЗА

Стогова М.О.

*Физический факультет ОмГУ, Омск
masha.stogova@gmail.com*

Исследование ультратонких магнитных систем является актуальной проблемой как с точки зрения фундаментальных основ магнетизма, так и с прикладной точки зрения применения в микроэлектронике. При активированной адсорбции металлов наблюдается перемешивание атомов пленки и подложки, при этом пики намагниченности могут смещаться и размываться, что отрицательно сказывается на магнитных свойствах системы. Для практического применения необходим пик намагниченности в области пленки, поэтому важно предсказать в какой системе возникнет пик намагниченности именно в этой области.

В данной работе, в рамках модели описания адсорбции [1] вариационным методом функционала спиновой плотности, исследовано поведение энергии адсорбции и пространственного распределения намагниченности для монослойной плёнки железа на подложках из Ag и Au с учетом ориентации поверхностной грани и температуры.

Проведенные расчеты показали, что пленка железа в ферромагнитной фазе обладает большей энергией адсорбции E_{ads} , чем в парамагнитной фазе. Максимальная разность $\Delta E_{ads}=60\%$ для плотноупакованной грани (111), для грани (110) $\Delta E_{ads}=10\%$. График зависимости E_{ads} от Φ для плотноупакованной грани имеет минимум, зависящий от материала подложки. А для грани (110) наблюдается монотонное уменьшение E_{ads} .

Для подложки из серебра пик намагниченности в области пленки наблюдается для обеих граней только при $\Phi \approx 1$. Система Fe/Au (111) имеет пик намагниченности в пленке при всех значениях Φ и $T < T_c$, а для грани (110) при больших значениях Φ . Можно сделать вывод о преимуществе Fe/Au (111) в качестве магнитного элемента.

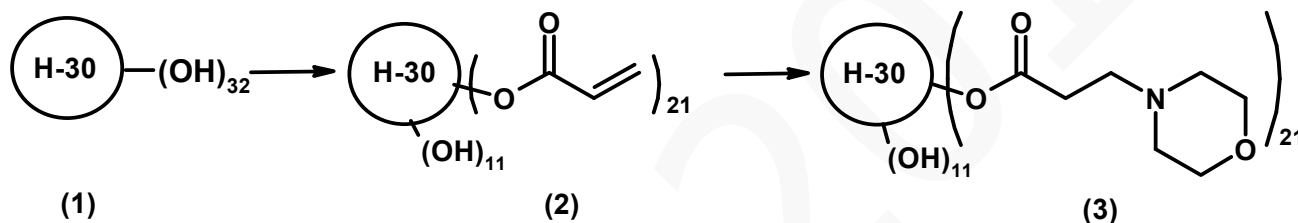
1. М. В. Мамонова, В. В. Прудников, И. А. Прудникова. Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. - М.: Физматлит, 2011, 400 с.

СИНТЕЗ И КОМПЛЕКООБРАЗОВАНИЕ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛА ТРЕТЬЕЙ ГЕНЕРАЦИИ ФУНКЦИОНИЗИРОВАННОГО МОРФОЛИНОМ В ТЕРМИНАЛЬНОМ ПОЛОЖЕНИИ

Сурнова А.В., Гатаулина А.Р., Кутырева М.П., Улахович Н.А., Ханнанов А.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет, Казань
albin_6767@yahoo.com*

Гиперразветвленные полиэфирополиамины являются перспективными реагентами для целей биомедицинской химии и могут быть использованы в качестве переносчиков лекарственных препаратов или лигандов для синтеза биологически активных металлополимерных комплексов. На основе гиперразветвленного полиэфирополиола третьей генерации Н-30 (1) (ядро – этоксилированный пентаэритрит, АВ₂ мономер – 2,2-ди(гидроксиметил)пропионовая кислота, 32 гидроксильных групп) синтезирован гиперразветвленный полиэфирополиамин (3), содержащий фрагменты морфолина в терминальном положении:



По данным ЯМР ¹H- ¹³C и ИК- спектроскопии установлено, что последовательная функционализация гиперразветвленного полиэфирополиола (1) акрилатным и морфолиновым фрагментами происходит через терминальные ОН-группы. Степень функционализации синтезированных соединений (2) и (3) определена по данным метода ЯМР ¹H- спектроскопии и рН-метрического титрования с последующей математической обработкой данных и составляет 62%. Разработаны методики синтеза металлокомплексов соединения (3) с ионами Cu(II), Co(II). По данным ИК-спектроскопии и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) установлено, что координационный узел в металлополимерных комплексах имеет симметрию искаженного октаэдра, координация центрального атома происходит с участием атомов азота и кислорода морфолинового фрагмента и атома кислорода растворителя (вода, ДМСО). Состав и условные константы устойчивости (lg β') доли накопления α наиболее устойчивых форм металлокомплексов в ДМСО определены спектрофотометрически и приведены в таблице:

L	M	Состав M:L	lg β'	α, %
(3)	Cu(II)	13:1	43.08±0.16	94.5
	Co(II)	10:1	29.48±0.38	99.8
		11:1	33.77±0.22	82.1

МЕТОД РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ СВЕХПРОВОДЯЩЕГО ТОКА

Еремин М.В., Сюняев Д.А.

*Институт физики, КФУ, Казань
dasforum@rambler.ru*

Плотность сверхпроводящего тока \mathbf{j} связана с векторным потенциалом \mathbf{A} уравнением $\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2} \mathbf{A}$. Величину λ обычно называют лондоновской глубиной проникновения магнитного поля в сверхпроводник. Расчеты ее довольно сложны. Нами используется следующая формула:

$$\frac{1}{4\pi\lambda^2} = \left(\frac{e}{c\hbar}\right)^2 \left[\sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial(k_x)^2} \langle a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma} \rangle - 2\pi \left(\frac{\hbar}{e}\right)^2 \langle\langle j_\alpha(-q) | j_\alpha(q) \rangle\rangle_{\omega \rightarrow 0, q \rightarrow 0} \right] \quad (1)$$

Здесь ε_k – закон дисперсии квазичастиц в нормальной фазе, $a_{k,\sigma}^+$, $a_{k,\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения квазичастиц $j_\alpha(q)$ – компонента $\alpha = x, y, z$ Фурье-образа оператора плотности тока, записанная в представлении вторичного квантования. При вычислении корреляционной функции $\langle a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma} \rangle$ и функции Грина $\langle\langle j_\alpha(-q) | j_\alpha(q) \rangle\rangle$ используется переход к операторам боголюбовских квазичастиц. В отличие от ранее использованного формализма [1] формула (1) позволяет рассчитывать температурную зависимость плотности сверхпроводящего тока в режимах сосуществования сверхпроводимости и волн зарядовых и спиновых плотностей. Сопоставляя расчетные графики с экспериментальными мы можем делать определенные выводы об электронном строении высокотемпературных сверхпроводников. В качестве последних нами рассматриваются слоистые купраты, механизм сверхпроводимости в которых пока не известен.

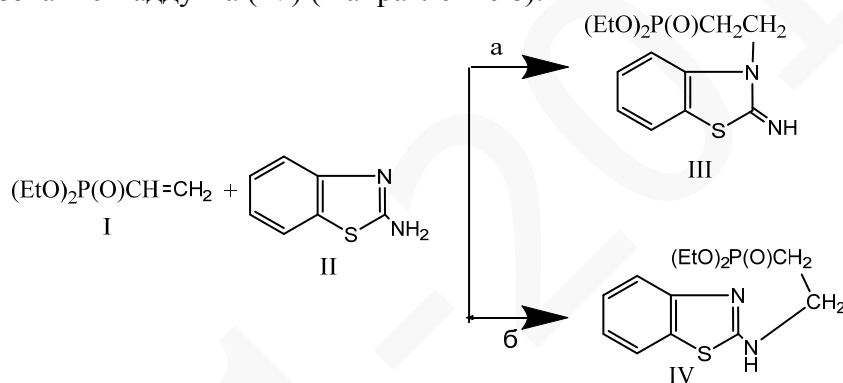
1. M.V. Eremin, D.A. Sunyaev, Journal of Modern Physics, 2010, 1, 357-359.

РЕАКЦИИ НЕНАСЫЩЕННЫХ ФОСФОНАТОВ С АМИНОБЕНЗОТИАЗОЛОМ

Тазетдинова Д.Н., Погодина Е.П., Хусаинова Н.Г.

*Химический институт им. А.М.Бутлерова КФУ, Казань, Россия
e-mail: narkis.khusainova@ksu.ru*

Синтез новых аминифосфорильных соединений является одним из важнейших направлений современной элементоорганической химии, что связано с широкими возможностями их практического использования. С целью получения соединений, обладающих потенциальной биологической активностью, нами исследована реакция диэтилового эфира винилфосфоновой кислоты (I) с 2-аминобензотиазолом (II). В спектре ЯМР ^{31}P аддукта содержался один сигнал δ_{P} 28 м.д., что свидетельствовало об образовании единственного продукта присоединения. Взаимодействие фосфоната (I) с тиазолом (II) может происходить по одному из двух направлений: с атакой по β -углеродному атому непредельного субстрата кольцевого атома азота тиазола с образованием аддукта (III) (направление а) или с атакой атома азота экзоциклической аминогруппы с образованием аддукта (IV) (направление б).



В соответствии с данными спектров ЯМР ^1H и ^{31}P продукта присоединения и литературными данными [1] мы полагаем, что взаимодействие фосфоната (I) с 2-аминобензотиазолом приводит к образованию продукта присоединения (III) - 1-диэтоксифосфорил-2-(бензотиазо-1-ил)этана (схема, направление а).

Аналогично с атакой внутрициклического атома азота 2-амино-бензотиазола происходит его взаимодействие и с диэтиловым эфиром пропинилфосфоновой кислоты.

1. Н.Г. Хусаинова Мостовая О.А., Литвинов И.А., Криволапов Д.Б., Бердников Е.А., Черкасов Р.А. Изв. АН. Сер.хим. 2005, 2607.

СИНТЕЗ АЛЮМИНИЕВЫХ КОАГУЛЯНТОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ СУЛЬФАТОВ

Трус И.Н., Макаренко И.Н., Воробьева В.И.

*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
Киев, Украина
inna.trus.m@gmail.com*

Значительное количество водоемов в промышленных регионах имеет повышенный уровень минерализации. Огромное количество шахтных вод, которые сбрасываются в водоёмы, значительно ухудшает данную ситуацию. При этом увеличивается не только общее солесодержание, но и жесткость, щелочность и концентрация сульфатов. Поэтому очистка сточных вод от сульфатов с одновременным умягчением позволяет решить проблему деминерализации воды, которая является весьма актуальной. Среди методов, которые широко применяются для очистки воды от сульфатов можно назвать реагентные [1]. Основным их преимуществом перед ионообменными, баромембранными и электрохимическими является то, что сульфаты удаляются с воды в виде малорастворимых осадков, а не концентратов солей, которые необходимо утилизировать. Широкое применение имеет метод известкования, но основным его недостатком является то, что невозможно снизить концентрацию сульфатов ниже 1500 мг/дм^3 . В связи с этим целесообразно использовать методы при обработке воды известью и алюминийсодержащими коагулянтами – гидроксоалюминатом натрия, гидроксосульфатом и гидроксохлоридами алюминия. Высокая стоимость данных коагулянтов способствует поиску реагентов с целью снижения их себестоимости. Поэтому для синтеза алюминиевого коагулянта для очистки воды был использован технический гидроксид алюминия с известью. При использовании данной суспензии алюмината кальция было установлено, что степень умягчения был свыше 90 %, степень очистки от сульфатов был ~ 85-90 %. Таким образом, удалось достичь достаточно высокой эффективности очистки от сульфатов и умягчения раствора при значительном снижении стоимости реагентов.

1. Е. Е. Кравцов, А. П. Лебедева, Е. Г. Глинина. Исследования получения и применения гидроксохлоридов алюминия при очистке сточных вод. Вестн. АГТУ, 2009, 1, 100-102.

ТВЕРДЫЕ ДИСПЕРСИИ ДИПИРИДАМОЛА С ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯМИ

Усманова Л.С., Герасимов А.В.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
lian-usman@mail.ru, Alexander.Gerasimov@kpfu.ru*

Одним из определяющих факторов при использовании твердых форм лекарственных препаратов является их поглощение в желудочно-кишечном тракте, которое в значительной степени определяется растворимостью препарата в воде. Плохорастворимые лекарственные препараты медленно всасываются по сравнению с веществами с высокой растворимостью, что определяет меньшую эффективность их действия. Солюбилизация и формирование твердых дисперсий является одним из способов гидрофилизации лекарственных препаратов.

В настоящей работе с помощью метода дифференциальной сканирующей калориметрии была показана возможность формирования твердых дисперсий дипиридамола с изученными полиэтиленгликолями. Оптимальные соотношения полимер:дипиридамола составляют 1:1 и 3:1 для PEG-1000 и PEG-1400, соответственно.

Методом УФ-спектрофотометрии было показано, что использование в качестве солюбилизирующего агента PEG-1000 позволяет увеличить содержание дипиридамола в воде в 175 раз. Такое повышение растворимости может обеспечиваться как солюбилизирующим эффектом полиэтиленгликоля, так и уменьшением степени кристалличности лекарственного препарата за счет образования твердых дисперсий.

ЛАЗЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АКТИВНОЙ СРЕДЫ $\text{LiLu}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{F}_4:\text{Ce}^{3+}$ В РЕЖИМЕ ГЕНЕРАЦИИ ИМПУЛЬСОВ УЛЬТРАКОРОТКОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

Фарухшин И.И., Низамутдинов А.С., Семашко В.В., Кораблева С.Л.

*Институт физики КФУ, Казань
burusha16@gmail.com*

Сегодня развитие технологий требует применения оптических квантовых генераторов со стабильными спектральными параметрами, которые работают в УФ диапазоне спектра с импульсами короткой и ультракороткой длительности [1]. Новым подходом к получению требуемых спектральных характеристик является прямое получение лазерной генерации УФ диапазона спектра на фторидных кристаллах, активированных Ce^{3+} , в частности в кристалле $\text{LiLu}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{F}_4:\text{Ce}^{3+}$ [2].

Основными процессами, препятствующими получению лазерной генерации, в таких активных средах являются поглощение из возбужденного состояния активатора и образование центров окраски (ЦО). В кристалле $\text{LLYF}:\text{Ce}$ ЦО обладают полосой поглощения, перекрывающейся с полосой люминесценции. Проводя аналогию с методом пассивной модуляции добротности в насыщающихся поглотителях, мы получаем хорошую предпосылку для получения коротких импульсов в УФ диапазоне.

Нами была реализована экспериментальная установка для получения УК импульсов в УФ диапазоне. Лазерная генерация была получена в импульсном режиме с длиной волны $\lambda = 311$ нм и длительностью импульса $t_{\text{имп}} = 400$ пс, время жизни фотонов составило $\tau_c = 281$ пс.

Длительность импульса превышает время жизни фотона в резонаторе, что свидетельствует о многомодовом характере лазерной генерации. Но мы наблюдаем одиночный импульс, который не повторяет импульс накачки. Данный факт свидетельствует о возможной модуляции добротности внутри резонатора.

1. B. Wellmann, D. J. Spence and D.W. Coultts Opt. Lett. 2014. Vol. 39. No. 5.
2. S. Nobuhiko, L. Zhenlin, S. Yusaburo, V.V. Semashko, A.K. Naumov, S.L. Korableva, R.Yu. Abdulsabirov, M.A. Dubinskii Opt. Lett. 1995. Vol. 20. No. 6.

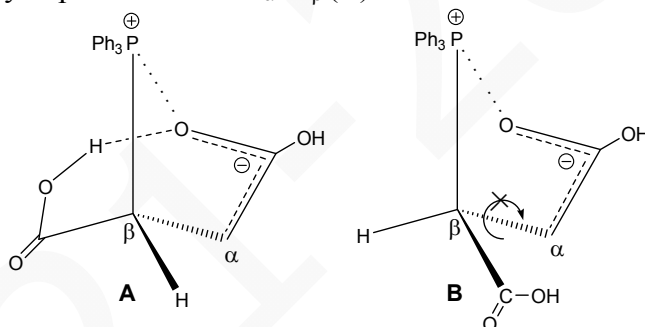
СТЕРЕОКИНЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В РЕАКЦИИ ТРЕТИЧНЫХ ФОСФИНОВ С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ

Фатхутдинов А.Р., Салин А.В., Ильин А.В.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
albert_lol@mail.ru

Интерес к реакции непредельных карбоновых кислот с третичными фосфинами обусловлен широким спектром полезных свойств образующихся продуктов. Вопрос о механизме данной реакции, структуре и реакционной способности возникающих интермедиатов является предметом исследований последних лет [1,2].

В ходе исследования кинетики данной реакции обнаружен эффект анхимерного содействия – ускорения взаимодействия за счет участия соседних групп реагента – для реакций с малеиновой и *цис*-аконитовой кислотами, не наблюдаемый для соответствующих *транс*-изомерных кислот. На примере использования эфиров малеиновой и фумаровой кислот показано, что причиной аномального поведения *цис*-изомерных кислот является дополнительная стабилизация возникающего цвиттер-ионного интермедиата внутримолекулярной водородной связью (А). Различие в реакционной способности *цис/транс*-изомерных непредельных субстратов свидетельствует о «жесткой» пространственной структуре возникающих интермедиатов, создаваемой электростатическим P⁺…O взаимодействием, которое препятствует свободному вращению вокруг простой связи C_α–C_β (В).



Эффект анхимерного содействия для малеиновой кислоты выражен намного сильнее, чем для *цис*-аконитовой кислоты, что связано с необходимостью реорганизации внутримолекулярной водородной связи в молекуле *цис*-аконитовой кислоты для одновременной стабилизации интермедиата посредством P⁺…O взаимодействия и водородного связывания.

1. A.V. Salin, R.M. Aminova, V.I. Galkin, Int. J. Quantum Chem., 2013, 113, 1086–1094.
2. A.V. Salin, A.R. Fatkhutdinov, A.V. Il'in, E.I. Sotov, A.A. Sobanov, V.I. Galkin, B.R. James, J. Phys. Org. Chem. 2013, 26, 675–678.

ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ E_g -СОСТОЯНИЯ Fe^{2+} В ТЕТРАЭДРИЧЕСКОМ КОМПЛЕКСЕ КРИСТАЛЛА $FeCr_2O_4$

Фатыхова Р.А., Еремин М.В.

Институт физики КФУ, Казань
rimma.fthv@yandex.ru

В последнее время особый научный интерес вызывают кристаллы типа шпинелей. Ученые со всего мира проводят теоретические и экспериментальные шпинелей различными методами [1,2]. В 2013 году в Казани в Институте Физики казанского приволжского федерального университета прошел «Феофиловский симпозиум», на котором Joachim Deisenhofer с сотрудниками из «Center for Electronic Correlations and Magnetism University of Augsburg» представили свою работу «Low-lying excitations in the orbitally active A-site spinels $FeSc_2S_4$, $FeCr_2O_4$ and $FeCr_2S_4$ ». В результате своих исследований они получили очень интересные результаты, которые, однако, не имеют пока физического объяснения. Предварительный анализ позволяет заключить, что особенность новых физических свойств диэлектрической проницаемости, вероятно, связана с энергетическим спектром орбитально вырожденных ионов в тетраэдрических окружениях. В расчетном плане такая задача решалась рядом авторов (С. А. Bates [3], М. G. Brik [4], J. Degen [5]), при использовании модели точечных зарядов и модели углового перекрытия. Однако, как выяснилось, полученные в этих работах выражения для параметра ян-теллеровской связи отличаются. Причем авторы не ссылаются друг на друга и не обсуждают эти отличия.

В данной работе проводятся расчеты в рамках модели суперпозиции, которая как частный случай позволяет воспроизвести как результаты расчетов в рамках модели точечных зарядов (С. А. Bates), так и по модели углового перекрытия (М. Васси [6]). Кроме того мы оценили энергетический масштаб расщеплений за счет взаимодействия орбитально вырожденных ионов и сравнили его со значением частот аномального поведения диэлектрической восприимчивости для кристалла хромита $FeCr_2O_4$. Полученное нами выражение для параметра линейной ян-теллеровской связи 3d- электрона в тетраэдрическом окружении соответствует полученному ранее в работах группы ученых из Германии (К. Wissing и J. Degen) из Румынии и Эстонии (Avram, N.M. и Brik, M.G.), но отличается от приведенного в обзоре Bates С. А.. Это позволяет заключить, что результат, полученный нами правильный, а в расчетах Bates С. А. есть ошибка. Используя константу ян-теллеровской связи для дальнейших расчетов мы оценили, что взаимодействие орбитально вырожденных ионов Fe^{2+} может привести к формированию энергетического спектра с интервалами энергий порядка 10-100 см⁻¹. Это значение соответствует энергетическим интервалам, обуславливающим появление пиков в частотной зависимости диэлектрической проницаемости.

1. V. Kocsis et al. Phys. Rev., 2013, 87, 064416(9).
2. J. Euna et al. J. Phys. Rev., 2013, 88, 094417(5).
3. С. А. Bates, Phys. Rep., 1978, 35, 3, 187-304.
4. N. M. Avram, M. G. Brik, C. N. Avram, I. Sildos, A. M. Reisz. Solid State Communications, 2009, 149, 2070-2073.
5. K. Wissing, J. Degen. Molecular Physics, 1998, 95,1, 51-59.
6. M. Bacci. J. Phys. Chem. Solids, 1980, 41, 1267-1270.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОЦЕНКИ БЕЗОПАСНОСТИ НАНОМАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕМАТОД

Фахруллина Г.И., Ахатова Ф.С.

*Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
namaz1000@gmail.com*

В последнее десятилетие появилось большое количество работ, которые посвящены использованию широкого спектра наноматериалов в различных сферах промышленности и медицины. Утечка наноматериалов в процессе производства или эксплуатации продукции может представлять значительную опасность загрязнения окружающей среды. Особенно опасным может быть проникновение наночастиц в живые организмы. На сегодняшний день мало исследований по разработке методов оценки токсичности этих наноматериалов, а результаты их весьма противоречивые.

Целью работы явилось разработать простой и достоверный метод оценки безопасности наноматериалов с использованием свободноживущих почвенных нематод *Caenorhabditis elegans*.

Впервые для анализа влияния наночастиц на физиологическое состояние червей мы используем наномодифицированные микроорганизмы – пища нематод. Наночастицы, в определенной концентрации, наносим непосредственно на поверхность одноклеточных организмов (бактерии, водоросли, дрожжи). Покрытые наночастицами микроорганизмы добавляем, как корм, в питательную среду нематод. Спустя трое суток оцениваем токсическое влияние исследуемых наноматериалов на продолжительность жизни, термостабильность, рост и репродуктивность *C. elegans*. Распределение наночастиц в теле нематод наблюдаем с помощью микроскопии высокого разрешения. Использованный способ доставки наночастиц внутрь нематод оказался удобным для изучения влияния различных наноматериалов в системе *in vivo* [1, 2].

1. G.I. Dāwlātšina, R.T. Minullina, R.F. Fakhrullin. Nanoscale, 2013, 5, 11761-11769.

2. G.I. Fakhrullina, F.S. Akhatova, Y.M. Lvov, R.F. Fakhrullin. Environ. Sci.: Nano, DOI: 10.1039/C4EN00135D.

ОЦЕНКА ИНГИБИРУЮЩЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ ДЛЯ СИНТЕЗА ЛЕТУЧИХ ИНГИБИТОРОВ

Фетисова И.С., Воробьева В.И., Чигиринец Е.Э., Яцюк Л.А.

*Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, Украина
irina-fetisova@ukr.net*

Летучие ингибиторы атмосферной коррозии (ЛИАК) находят широкое применение в практике защиты металлов преимущественно при транспортировке и хранении металлоизделий и полуфабрикатов. Несмотря на большой ассортимент наработанных в прошлом ЛИАК проблема их разработки остается актуальной в связи с возрастающими требованиями к защитной способности реагентов, с повышением экологических и экономических требования [1]. Поэтому растительное сырье может быть успешно применено при синтезе летучих ингибиторов коррозии стали. Для дальнейшего целенаправленного получения новых летучих ингибиторов на основе растительного сырья, авторами исследован компонентный состав и противокоррозионная эффективность основных компонентов изопропанольных экстрактов шрота рапса, кистей и жмыха кожуры винограда, травы полыни. Хромато-масс-спектральным методом анализа установлено, что основными компонентами растительных экстрактов являются монотерпеновые фенолы (тимол, карвакрол, ментол) и альдегиды (сиреневый альдегид, ванилин). Результаты ускоренных коррозионных и электрохимических испытаний при использовании в качестве ЛИАК модельных веществ (2 г/л изопропанола), свидетельствуют, что ингибирующая эффективность основных компонентов увеличивается в направлении ванилин > ментол > тимол и обеспечивают достаточно высокую защиту стали в условиях периодической конденсации влаги. На основе сопоставления оценки ингибирующей эффективности и результатам квантово-химических расчетов модельных летучих веществах подтверждена коррелятивная зависимость, которая устанавливает соответствие между защитным действием составляющих компонентов растительных экстрактов и значению энергии $V_{ЗМО}$ ($E_{V_{ЗМО}}$): с увеличением энергии $V_{ЗМО}$ молекул исследуемых соединений их противокоррозионная эффективность возрастает.

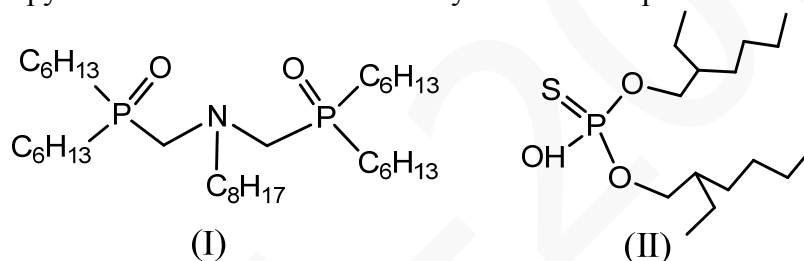
1. О.Е. Chyhyrynets', V.I. Vorob'iova. Materials Science, 49, 2013, 318-325.

МЕМБРАННО-ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА N,N-БИСДИГЕКСИЛФОСФОРИЛМЕТИЛОКТИЛАМИНА ПРИ ЭКСТРАКЦИИ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Филимонова М.А., Давлетшина Н.В., Гарифзянов А.Р., Черкасов Р.А.

*Химический институт имени А. М. Бутлерова КФУ, Казань
marinapechenka@mail.ru*

В настоящее время в качестве перспективного метода извлечения, концентрирования и сепарации разнообразных по природе субстратов из самых разных источников сырья, от руд до сточных вод, рассматривается жидкостная мембранная экстракция. Методом противоположно-направленного транспорта мы изучили мембранно-транспортные свойства различающихся по природе экстрагентов - N,N-бисдигексилфосфорилметилоктиламина(I) и ди(2-этилгексил)монотиофосфорной кислоты (II), а также их смесей (I)/(II) по отношению к ионам лития, натрия и калия. Мы установили, что при pH=7.5 значения потоков ионов лития, натрия и калия оказались равными и составляли $1.60 \cdot 10^{-3}$, $1.78 \cdot 10^{-3}$ и $2.06 \cdot 10^{-3}$ Моль/м²·мин и $9.37 \cdot 10^{-3}$, $10.4 \cdot 10^{-3}$ и $8.44 \cdot 10^{-3}$ Моль/м²·мин для переносчиков (I) и (II), соответственно. Таким образом, переносчики не обнаружили селективности к какому-либо из выбранных катионов.



Однако, мы нашли, что импрегнированные жидкие мембраны, представляющие собой пористую тетрафторэтиленовую пленку, пропитанную смесью (I)/(II) в керосине, обладают синергетическим эффектом к переносу ионов лития в присутствии ионов калия и натрия. Значения коэффициентов селективности для смеси экстрагентов (I)/(II) по отношению к иону лития, оказались в 3.5 и в 5 раз выше для катионов натрия и калия соответственно, чем при использовании реагентов в отдельности [1].

Найдено, что наибольшие значения потоков и наилучшая селективность к иону лития проявляется при соотношении концентраций переносчиков (I) и (II) - 4:1.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 13-03-00536)

1. А.Р. Гарифзянов, Н.В. Давлетшина, А.Р. Гарипова, Р.А. Черкасов. Ж. Общ. Химии, 2014, 49, Вып.2. С.293-297.

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИОЛОВ, ЭПОКСИДИРОВАНИЕ СОЕВОГО МАСЛА

Филиппова Д.Р., Милославский Д.Г., Ахмедьянова Р.А.

*ФБГОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»,
Казань
dilyara020692@mail.ru*

Полиолы имеют очень широкую сферу применения, в основном полиолы используются как базовая составляющая сырья для производства пенополиуретана.

В наши дни хорошо развивается «зеленая» химия, основанная на использовании экологически чистых продуктов. Расширение ассортимента полиолов, используемых для синтеза полиуретанов, возможно путем использования в качестве сырья растительных масел – относительно дешевого и возобновляемого продукта. В данной работе в качестве растительного сырья используется соевое масло.

Полиолы можно получить двумя способами: 1. Эпоксидированием/гидроксилированием растительных масел; 2. Гидролизом эпоксидированного растительного масла.

В ходе работы подобраны оптимальные условия гидролиза эпоксидированного соевого масла (ЭСМ) при повышенном давлении при мольном соотношении $[ЭСМ]:[H_2O]:[H_3PO_4]=1:1:0,04$, мас., обеспечивающие конверсию эпоксидных групп (ЭГ) 54,8%.

Установлено, что наиболее эффективным катализатором гидролиза соевого масла при нормальном давлении является катионнообменная смола (КС). При оптимальных условиях $[ЭСМ]:[H_2O]:[КС]=1,00:1,00:0,08$, мас., достигается конверсия ЭГ 69,4%.

Таким образом, получены полиолы растительных масел со степенью гидроксилирования 21,2% и конверсией двойных связей 94,1%, из которых в последствии можно получить экологически чистый ППУ.

МЕТОД МОДУЛИРУЮЩЕЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ БИТУМОВ

Фролов И.Н., Фирсин А.А.

*«Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань
alekseifirsin@gmail.com*

Изучение фазовых превращений и температурно-временных условий формирования структур в битумах необходимо для анализа качества битума и разработки эффективных решений по обеспечению необходимых параметров и свойств композиционных битумных материалов.

Полимолекулярность и сложность химического состава битумов, изменяющиеся в широком диапазоне в зависимости от качества битумного сырья и технологии его переработки, является причиной множественных превращений структуры битумов, что обуславливает их интенсивное изучение методами теоретического анализа и, в частности, дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Результаты исследования нефтяных окисленных битумов (на примере товарной марки БНК 40/180) показали существенное расширение возможностей анализа структурно-термических свойств при использовании модифицированного варианта ДСК – модулирующей ДСК (МДСК). Метод основан на разделении перекрывающихся обратимых и необратимых структурно-термических процессов при температурной модуляции теплового потока, что позволяет наблюдать, анализировать и оценивать количественно эндотермические и экзотермические эффекты, невидимые на кривых стандартной ДСК.

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 2(5H)-ФУРАНОНА, ИНГИБИРУЮЩИХ РОСТ БАКТЕРИЙ И ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ БИОПЛЕНОК

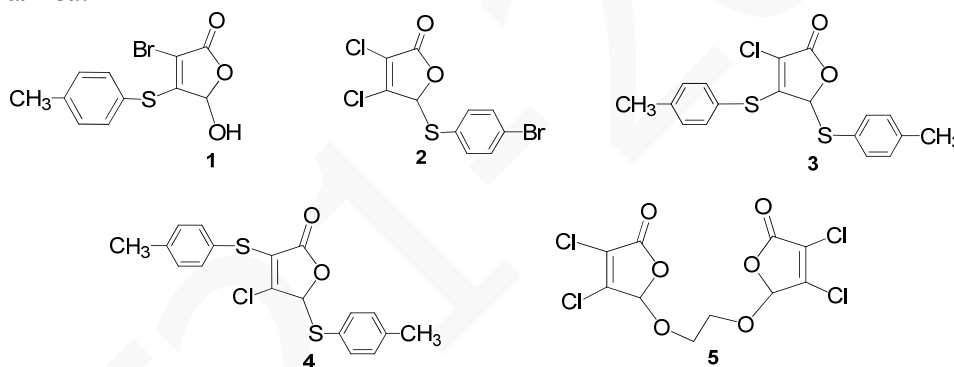
Хабибрахманова А.М.^a, Латыпова Л.З.^a, Тризна Е.Ю.^b, Каюмов А.Р.^b, Чмута Г.А.^a,
Курбангалиева А.Р.^a

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

^b Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань
Alsou-0493@mail.ru

Многие производные ненасыщенных γ -лактонов распространены в природе, демонстрируют огромные синтетические возможности и проявляют различные виды биологической активности. В том числе природные галогенсодержащие 2(5H)-фураноны ингибируют «чувство кворума» у грамотрицательных бактерий, тем самым подавляя процесс образования биопленок.

Объектами исследования являются производные 2(5H)-фуранона с *O*- и *S*-содержащими заместителями в разных положениях лактонного цикла. Проведенный первичный скрининг исследуемых соединений на способность подавлять рост грамположительных бактерий и ингибировать процесс образования ими биопленок позволил выявить молекулы-лидеры в ряду производных 2(5H)-фуранона. Фураноны **1–5** получены в реакциях мукохлорной и мукобромной кислот с 4-бромтиофенолом, *n*-тиокрезолом и этиленгликолем в условиях кислотного и основного катализа:



Для синтезированных соединений **1–5** определены минимальные концентрации, подавляющие как рост бактерий *Staphylococcus aureus* и *Staphylococcus epidermidis*, так и образование биопленок этими бактериями. Показано, что данные фураноны не обладают мутагенной и цитотоксической активностью при концентрациях, ингибирующих рост бактерий и образование биопленок.

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.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ДИФРАКЦИИ НА СПИРАЛЬНЫХ НАНОТРУБКАХ ПРОИЗВОЛЬНОГО ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НА ПРИМЕРЕ НАНОТРУБОК WS₂.Халитов З.Я., Хадиев А.Р., Пашин Д.М.

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева - КАИ,
Казань
azat.khadiev@mail.ru

Исследование структуры и свойств тубулярных наноструктур представляет огромный интерес вследствие значительного потенциала их применения. Экспериментальные исследования методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) позволили определить два способа формирования кристаллического пространства нанотрубок: последовательный рост коаксиальных цилиндрических слоев и сворачивание слоя в спиральный рулон. Кристаллография и теория дифракции на коаксиальных трубках развивается вполне успешно. Между тем, вплоть до недавнего времени [1,2], кристаллографическое описание спиральной структуры и теория дифракции на ней отсутствовали. Данные задачи представляют интерес вследствие зависимости свойств трубок от их структуры с одной стороны, и из-за большого распространения спиральных трубок с другой.

Задача измерения параметров спиральных нанотрубок сводится к определению параметров решетки a , b , d , начального радиуса трубки (ρ_0) и угла хиральности (ε_c). Данные структурные параметры, как показала разработанная теория дифракции, легко определяются из картины дифракции электронов [1,3]. Параметры a , b , d определяются по рефлексам общего положения. В случае картины микродифракции электронов высокого разрешения параметр ρ_0 может быть определен из осцилляций профилей рефлексов, а угол хиральности ε_c – по расщеплениям диффузных ($hk0$) рефлексов. Идентификация конусных спиральных нанотрубок, а также измерение угла конусности ε_b проводится по расщеплению «базальных» рефлексов типа $00l$ [3].

Для иллюстрации предлагаемых критериев проводится исследование дифракционных картин и ПЭМ изображений трубок WS₂, предоставленных группой проф. Тенне (Институт Вайцмана, г. Реховот, Израиль), полученных на HRTEM FEI Technai F-30 (300 kV) в рамках сотрудничества [3].

1. I.K. Nasyrov, D.M. Pashin, Z.Y. Khalitov, D.N. Valeeva, Structure of chiral and spiral nanotubes of arbitrary composition, *Sci. Isr. - Technol. Advantages*. 12 (2010) 63–73.
2. O. Figovsky, D. Pashin, Z. Khalitov, A. Khadiev, The Quantitative Theory of Diffraction by Spiral Nanotubes, *Chem. Chem. Technol.* 8 (2014) 41–50.
3. Z. Khalitov, A. Khadiev, D. Pashin, Electron Diffraction Patterns from Scroll Nanotubes: Interpretation Peculiarities, *Appl. Crystallogr.* - in press

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ BaMgF₄:CeNa

Хадиев А.Р., Павлов В.В., Семашко В.В.

*Институт физики КФУ, Казань
ibn.rusht@gmail.com*

BaMgF₄, обладающий широкой запрещенной зоной и сегнетоэлектрическими свойствами, является перспективным материалом, находящим применение в приборах квантовой электроники и радиоэлектроники [1]. Широкозонный диэлектрик, активированный редкоземельными ионами Ce³⁺ дает возможность получения лазерной генерации в УФ диапазоне [2]. Однако, практической реализации лазеров на основе BaMgF₄:Ce³⁺ препятствует интенсивное образование центров окраски [3]. Индуцированные излучением накачки свободные носители заряда мигрируют в зонах матрицы-основы и могут связываться на дефектах кристаллической решетки. В основе такого рода процессов, ухудшающих спектрально-энергетические характеристики активной среды, лежит одно- или многофотонная фотоионизация примесных ионов. Таким образом, фотоионизация является ключевым фактором, определяющим оптические свойства материалов в случае воздействия на них интенсивного излучения [4].

В данной работе исследованы спектрально-кинетические характеристики кристалла BaMgF₄ активированного ионами Ce³⁺. Зарегистрированы спектры поглощения индуцированных центров окраски, исследовано поглощение из возбужденного состояния.

1. Characteristics of Ferroelectric Transistors with BaMgF₄ Dielectric / Jong-Son Lyu [et al.] // ETRI Journal. – 1998. – V. 20. – N. 2. – P. 241-249.
2. M. Yamaga, T. Imai, N. Kodama. Optical properties of two Ce³⁺-site centers in BaMgF₄:Ce³⁺ crystals // Journal of Luminescence. – 2000. – V. 87-89. – P. 992-994.
3. Vacuum ultraviolet and ultraviolet spectroscopy of BaMgF₄ codoped with Ce³⁺ and Na⁺ / Eiji Hayashi [et al.] // Journal of Luminescence. – 2006. – V. 119-120. – P. 69-74.
4. Семашко В. В. Проблемы поиска новых твердотельных активных сред ультрафиолетового и вакуумно-ультрафиолетового диапазонов спектра: роль фотодинамических процессов, ФТТ 2005 – т.47 – N5 – С.1450-1454.

СИНТЕЗ БЕТА-ЗАМЕЩЕННЫХ СПИРТОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА

Хайруллина Р.Р.^{a,b}, Павельев Р.С.^b

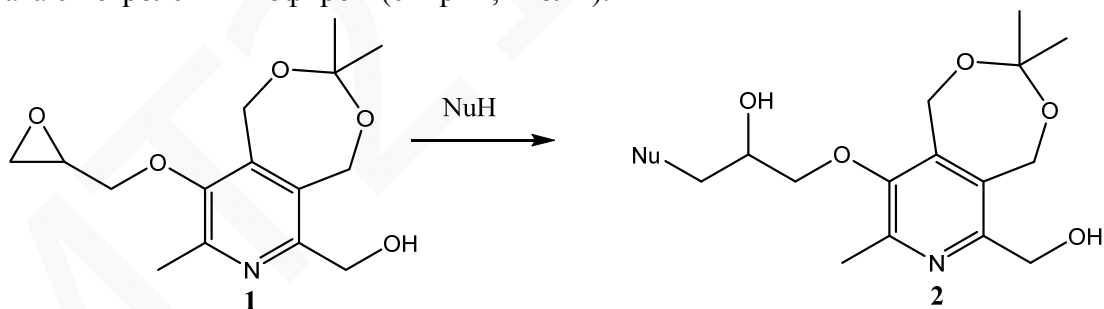
^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

^b Научно-образовательный центр фармацевтики КФУ, Казань
reginakhay@bk.ru

Функционализация природных соединений является одним из важнейших подходов при создании новых лекарственных средств. К числу этих соединений относится витамин В₆ (пиридоксин), который входит в состав более 100 ферментов и производные которого обладают ноотропной, кардиопротекторной, антихолинэстеразной, радиопротекторной и другими видами биологической активности.

Целью нашей работы являлись: разработка подхода к синтезу и синтез ряда бета-замещенных спиртов на основе производных пиридоксина с использованием нуклеофилов различной природы.

Синтезированный ранее эпоксид на основе 6-(гидроксиметил)пиридоксина **1** был подвергнут реакциям раскрытия оксиранового цикла нуклеофилами. Для выявления зависимости свойств синтезированных соединений от их структуры природу нуклеофилов варьировали с точки зрения их стерических и электронных эффектов. Так, были использованы алифатические и ароматические азот-, кислород- и серосодержащие нуклеофилы различной стерической загруженности. Реакции с азотсодержащими нуклеофилами из-за их низкой нуклеофильности идут медленно с низкими выходами, поэтому реакцию проводили под действием микроволнового излучения, что значительно сократило время протекания реакции и увеличило выходы. Реакции с кислород- и серосодержащими нуклеофилами проводили с использованием гидрида натрия (активация нуклеофила) и диметилформамида в качестве растворителя при 80°C. Ход реакций контролировали методом ТСХ. Целевые продукты **2** выделяли методом колоночной хроматографии на силикагеле с использованием в качестве элюента ацетона (амины) и смеси этилацетата с петролейным эфиром (спирты, тиолы).



Структура соединений была подтверждена методами ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА. Проведенные биологические эксперименты показали, что полученные бета-замещенные спирты представляют интерес с точки зрения синтеза новых антиадренергических лекарственных средств.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ НА ПРОЦЕСС СТЕКЛОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ СИНДИОТАКТИЧЕСКОГО 1,2-ПОЛИБУТАДИЕНА

Хаматова Н.Р., Глазырин А.Б.

*Башкирский государственный университет, инженерный факультет, Уфа
nely-9@mail.ru*

Модификация макромолекул введением различных заместителей оказывает существенное влияние на свойства полимеров, в том числе на температуру стеклования (T_c), характеризующую переход полимера из высокоэластического в стеклообразное состояние.

Целью настоящей работы являлось изучение методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) процесса стеклования 1,2-СПБ и его производных, содержащих в составе макромолекул функциональные группы различной химической природы, а также влияния степени функционализации на параметры стеклования модифицированных полимеров.

Введение в состав макромолекул 1,2-СПБ заместителей – атомов хлора, брома, циклопропановых или дихлор- и метоксикарбонилзамещенных циклопропановых групп, независимо от их химической природы, приводит к увеличению T_c полимера. Установлено, что T_c линейно зависит от степени функционализации α для изученных полимеров. Тангенс угла наклона прямых в координатах $T_c - \alpha$ представляет собой параметр γ , характеризующий изменение T_c от степени модификации полимера. Из зависимости « T_c - α » были определены T_c модифицированных полимеров, соответствующие максимально возможной (100%-ной) степени функционализации полимера.

Изучение влияния скорости нагрева (ν) образца на T_c 1,2-ПБ и его производных показало, что T_c полимера с ростом ν (5-50 К/мин) увеличивается тем больше, чем выше степень модификации полидиена. Из зависимости « $\lg \nu - 1/T_c$ » для данных полимеров определено значение кажущейся энергии активации процесса стеклования (E_a). Зависимость E_a от α 1,2-ПБ определяется природой заместителя: для производных 1,2-ПБ с высоким значением γ , наблюдается заметное снижение E_a уже при относительно невысокой α .

Таким образом, модификация 1,2-СПБ введением функциональных групп различной химической природы в состав макромолекул сопровождается увеличением T_c и E_a процесса стеклования полимера.

МОДИФИКАЦИЯ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ ТЕРМОСТОЙКИМИ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫМИ ПОЛИМЕРАМИ

Хамидуллин О.Л.^{a,b}, Залялова Г.М.^a, Амирова Л.М.^{a,b}

^a КНИТУ им.А.Н.Туполева, Казань

^b Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
KhamidullinOskarL@mail.ru

Эпоксидные связующие являются наиболее универсальными для получения композиционных материалов, однако они обладают существенным недостатком - хрупкостью. Для повышения ударопрочности эпоксидных полимеров применяют модификацию термопластичными полимерами путем их растворения в эпоксидном олигомере. Полиэфирэфиркетоны (РЕЕК), полисульфоны (ПСФ) и полиимиды (ПИ) являются в этом плане перспективными, однако наименее изученными.

При получении ПКМ на основе эпоксидных полимеров часто наблюдается процесс смещения волокон сухой ткани относительно первоначального положения. Для уменьшения этого эффекта используются напыление небольшого количества термопластичного либо терморезактивного связующего на сухую ткань.

Одним из основных требований предъявляемыми к связующему являются его нейтральное или положительное влияние на окончательные свойства изделия. Основным преимуществом использования РЕЕК, ПСФ и ПИ является их повышенная растворимость в эпоксидных олигомерах, а так же положительное влияние на термостойкость и ударопрочность изделия.

Целью данной работы являлось исследование растворимости и реологических свойств систем эпоксидные олигомеры – термопластичные полимеры. В качестве объектов исследования выбраны эпоксидный олигомер ЭД-20, полиэфирэфиркетоны Victrex 90P, Victrex 150UF10, Victrex 150PF, полиэфирсульфоны – Ultason E 3010, Ultason P 3010, Ultason E 2020 и полисульфон Ultason S с M_n 26000 (BASF), полиэфиримид Ultem 1000 (Sabic). Растворимость и диаграммы фазового состояния систем изучали методом ЯМР релаксации на приборе Minispec MQ20 (Bruker), реологические свойства исследовали на реометре HAAKE RheoStress RS6000.

По полученным данным о растворимости термопластов в эпоксидном олигомере при различных температурах построены фазовые диаграммы. В области растворимости исследованы реологические свойства растворов при различных температурах и скоростях сдвига. Определены области концентраций с неньютоновским характером течения. Предложены составы для получения эпоксидных связующих с высокой ударной прочностью.

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.

РОСТ КРИСТАЛЛОВ ИТТРАТА СТРОНЦИЯ ДОПИРОВАННЫХ РЕЗДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ МЕТОДОМ БЕЗТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКИ С ОПТИЧЕСКИМ НАГРЕВОМ

Хасанов Р.Н., Гильмутдинов И.Ф., Киямов А.Г.

*Институт физики КФУ, Казань
scumtman@gmail.com*

Монокристаллы допированные редкоземельными элементами (РЗЭ) широко применяются в качестве оптически активных и нелинейных сред в оптоэлектронике. Иттрат стронция SrY_2O_4 является перспективной матрицей для допирования РЗЭ. В данной работе представлен синтез монокристаллов иттрата стронция допированных ионами Yb^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+} , Pr^{3+} .

Иттрат стронция $\text{SrY}_2\text{O}_4: \text{R}$ (R – ион редкоземельного элемента) в поликристаллическом виде был приготовлен методом твердофазного синтеза. В качестве исходных реагентов использовались: SrCO_3 (Alfa Aesar, 99,99%), Y_2O_3 (Alfa Aesar, 99,99%), R_2O_3 (Alfa Aesar, 99,9%). Стехиометрическая смесь выдерживалась при температуре 1100 °С 24 часа, с промежуточными перетираньями каждые 8 часов. Заготовка для роста отжигалась при температуре 1500 °С в течение 2 часов. Для роста кристалла использовался метод зонной плавки с оптическим нагревом. Рост кристалла проходил в атмосфере воздуха; поток воздуха составлял 0,5 Л/мин; верхний и нижний вал вращались в противоположных направлениях со скоростями 15 об/мин; скорость роста варьировалась от 2 до 4 мм/ч. На рисунке 1 приведена фотография выращенного кристалла $\text{SrY}_2\text{O}_4: \text{Yb}$. Кристалл оптически однороден. Согласно результатам рентген-структурного анализа структура кристалла совпадает со структурой SrY_2O_4 и не содержит посторонних фаз.

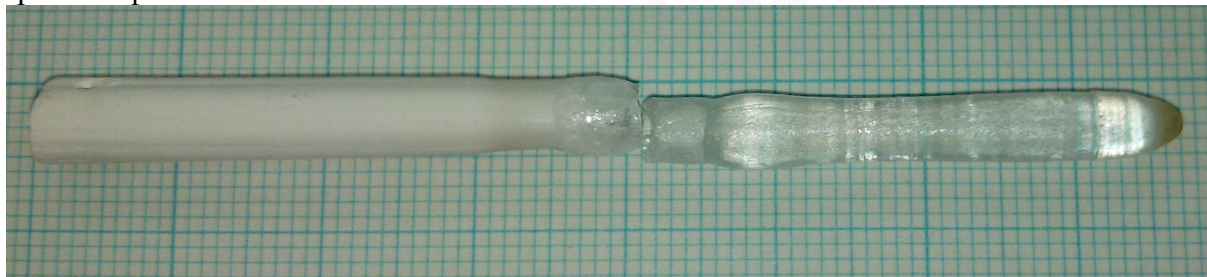


Рисунок 1. Фотография выращенного кристалла иттрата стронция $\text{SrY}_2\text{O}_4: \text{Yb}$.

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

РАЗРАБОТКА ВЛАГОСТОЙКИХ КЛЕЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ДРЕВЕСНОГО СЫРЬЯ

Хасаншина Р.Т., Хазиева Д.Р., Хасаншин Р.Р.

*Факультет энергомашиностроения и технологического оборудования КНИТУ, Казань
olambis@rambler.ru*

Увеличение объемов строительства малоэтажных домов определило востребованность плитных, в том числе клееных материалов из древесного сырья, в частности фанеры, способных эксплуатироваться в условиях переменной влажности и температуры. Основные требования, предъявляемые к строительным конструкциям – это долговечность, минимальная формоизменяемость и нетоксичность. Как и массивная древесина, фанера гигроскопична. При эксплуатации это приводит к формоизменяемости и биопоражениям конструкции из фанеры. Без специальных средств и способов защиты древесные материалы имеют ограниченный срок службы.

За последние годы для защиты древесины от влажностных воздействий широкое применение нашли технологии термомодифицирования. Термообработка древесины существенно уменьшает разбухание, усушку, повышает биостойкость материала.

Таким образом, на кафедре архитектуры и дизайна изделий из древесины КНИТУ была предложена технология термомодифицирования шпона с последующим изготовлением из него влагостойкой фанеры.

Суть разработки влагостойкой фанеры заключается в том, что предварительно листы шпона термомодифицируют в разреженной среде. Далее прошедшие термомодифицирование листы шпона сортируют по фактуре и цвету, проводят обрезку на определенные форматы для дальнейшего прессования, происходит этап подготовки листов клееных материалов. Созданная таким образом фанера состоит из склеенных между собой термомодифицированных листов лущенного шпона с взаимно перпендикулярным расположением волокон древесины в смежных слоях.

Предложенная технология предварительного термомодифицирования шпона помимо повышения эксплуатационных характеристик продукции так же является актуальной в создании художественных изделий из древесины, в частности сувенирной продукции из фанеры.

КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ ПЛЕНОЧНЫХ СВЯЗУЮЩИХ НА ОСНОВЕ ВЫСОКОВЯЗКИХ ЭПОКСИДНЫХ СМОЛ

Хафизов В., Магсумова А.Ф.

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н.Туполева – КАИ,
Казань
vitl-xaf@mail.ru, ajzamags@mail.ru*

Анализ мировой практики изготовления полимерных композиционных материалов показывает достаточно широкое применение безрастворных пленочных связующих на основе высоковязких смол. Одним из множества присущих им преимуществ является возможность пропитки наполнителя не в продольном, а в поперечном направлении, что значительно сокращает путь, который необходимо преодолеть связующему, и время пропитки. Однако это же преимущество приводит к ужесточению требований к реологическим свойствам пленочных связующих. В связи с тем, что в трансверсальном направлении армирующий наполнитель имеет проницаемость во много раз меньшую, чем в продольном, связующее в процессе пропитки при повышенных температурах должно обладать достаточно низкой вязкостью. При этом вязкость связующего при $T=20-25^{\circ}\text{C}$ должна иметь высокое значение, обеспечивающее возможность существования связующего в виде пленки при $T=20-25^{\circ}\text{C}$. В связи с такими требованиями по реологии, исследования технологических свойств (вязкость, жизнеспособность, смачивающая и пропитывающая способности) пленочных связующих при различных температурах весьма актуальны.

На основе смесей высокомолекулярных эпоксидных олигомеров ЭД-8 и ЭХД в различных пропорциях были приготовлены изучаемые композиции. Их реологические свойства при разных температурах изучали на ротационном динамическом реометре «Reostress» 6000 фирмы «Haake» при различных скоростях сдвига.

Поведение высоковязких связующих в процессе температурного воздействия было исследовано с помощью дифференциального сканирующего калориметра DSC-F4 Phoenix фирмы «NETZSCH» в динамическом режиме со скоростью нагрева 2 град/мин. Установлены температуры плавления и кристаллизации смесевых композиций.

Смачивающую способность композиций оценивали на приборе DSA20E (EasyDrop) фирмы «Kruss» при повышенных температурах.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ЛИТЬЕВЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ И АЛЛОТРОПНЫХ ФОРМ НАНОУГЛЕРОДА

Хорева А.Х.^a, Возняковский А.А.^b

^a *Федеральное государственное унитарное предприятие «НИИ синтетического каучука им. акад. С.В.Лебедева», Санкт-Петербург*

^b *ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН Санкт-Петербург*
Lina1828@mail.ru

К настоящему времени практически сформировалась промышленность синтеза нанокремнезема различных аллотропных форм. Соответственно, актуальным становится поиск областей их объемного потребления, иначе говоря, поиск рынков сбыта. С этой точки зрения, полимерное материаловедение, в рамках работ по созданию нанокмозитов, предоставляет наибольший интерес. Следует отметить, что разнообразие химической структуры полимерных макроцепей делает не эффективным эмпирический подбор пары нанокремнезем – полимерная матрица. Необходимо формулирование моделей усиления каждой конкретной формы нанокремнезема при ее введении в объем полимера какого-либо специфического класса. Например, полиуретанов или карбоцепных полимеров.

В работе проведены сопоставительные исследования влияния модифицирующих добавок аллотропных форм нанокремнезема (детонационных нанокремнеземов, фуллеренов, нанотрубок) на комплекс прочностных и теплофизических свойств полиуретанов. В качестве полимерной матрицы использовали полиуретан марки СКУ-ПФЛ-100.

Проведенные эксперименты показали, что введение сверхмалых модифицирующих добавок нанокремнезема приводит к увеличению прочностных параметров во всей области деформаций. С другой стороны, ввод модифицирующих добавок нанокремнезема привел к изменению и некоторых параметров, связанных с надмолекулярной организацией полимера. Полученные результаты связаны с формированием надмолекулярной организации цепей макроцепей полимера как результата координирующего воздействия частиц нанокремнезема.

НОВЫЙ «ЗЕЛЁНЫЙ» МЕТОД КРОСС-СОЧЕТАНИЯ ФТОРАЛКИЛ- И ОРГАНИЛГАЛОГЕНИДОВ В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗА КОМПЛЕКСАМИ Ni, Co, Cu и Pd

Хризанфоров М.Н.^a, Хризанфорова В.В.^a, Гриненко В.В.^b, Грязнова Т.В.^a, Мамедов В.А.^a, Будникова Ю.Г.^a

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

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

khrikanforov@gmail.com

Перфторалкильная группа может кардинально влиять на свойства органических молекул, увеличивая тем самым возможности использования таких соединений в качестве лекарственных препаратов, агрохимикатов или строительных блоков для создания новых органических материалов. Несмотря на важность этих заместителей, не существует общего метода их введения в сложные молекулы и ароматические субстраты, содержащие функциональные группы. Современные подходы либо требуют использования жестких условий реакции, либо реализуются только с ограниченным набором соединений.

Именно поэтому целью работы является создание эффективной, более экономически и экологически выгодной, простой методики получения новых органических соединений со связями С-С в условиях электрокаталитической реакции кросс-сочетания органилгалогенидов ненасыщенными комплексами металлов в реакциях активации связей С-Hal и С-H путем целенаправленного изменения степеней окисления металлогибридов (Редокс переключаемые системы в реакции кросс-сочетания).

В результате серии экспериментов показана возможность каталитического протекания реакции кросс-сочетания арил- и фторалкилгалогенидов. Были получены такие соединения, как перфтор-*n*-гексилбензол, 2-перфтор-*n*-гексилфуран, 2-перфтор-*n*-гексилпиридин, 3-перфтор-*n*-гексилпиридин, 4-перфтор-*n*-гексилбензонитрил, 4-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,10-гептадекафтор-*n*-децил)бензонитрил, 1-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,10-гептадекафтор-*n*-децил)-2-метилбензол и др.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 14-03-31423_мол_а

ПРЯМАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ С-Н СВЯЗЕЙ АРОМАТИЧЕСКИХ СУБСТРАТОВ В РЕАКЦИИ ФОСФОРИЛИРОВАНИЯ С УЧАСТИЕМ РЕДОКС-АКТИВИРОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ Pd, Co, Mn, Ag, Ni И ИХ КОМПЛЕКСОВ

Хризанфоров М.Н., Стрекалова С.О., Грязнова Т.В., Хризанфорова В.В., Будникова Ю.Г.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук,
Казань
khrizanforov@gmail.com*

Актуальность создания методов фосфорилирования С-Н связей ароматических соединений с участием металлов и их комплексов является важным научным направлением, которое на сегодняшний день малоизучено. Обзоры, опубликованные в последние годы, посвящены достижениям в области образования связей С-Р в различных каталитических реакциях, практически не рассматривая примеры ароматического фосфорилирования С-Н связей [1-3]. Поэтому разработка таких каталитических методов, особенно в связи с требованиями «зеленой химии», на сегодняшний день принципиально важна.

Целью данной работы является поиск новых реакций, способных каталитически активировать инертные С-Н связи в органических молекулах в связи углерод-фосфор с полезными функциональными группами с участием редокс-активированных металлов Pd, Co, Mn, Ag, Ni и их комплексов.

В рамках работы показано, что электрохимическая активация металлокомплексов в каталитически активные формы М(III), кроме Ag позволяет успешно присоединить диалкилфосфит к ароматическим субстратам (бензол, пиридин, кумарин). При участии нитрата серебра в электрохимических условиях образуется моноалкилфосфонат.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 14-23-00016.

1. C. S. Demmer, N. Krogsgaard-Larsen, L. Bunch. *Chem. Rev.* 2011, **111**, 7981
2. D. S. Glueck, Top. *Organomet Chem.* 2010, **31**, 65
3. G. Evano, A.-C. Gaumont, C. Alayrac, I. E. Wrona, J. R. Giguere, O. Delacroix, A. Bayle, K. Jouvin, C. Theunissen, J. Gatignol, A. C. Silvanus. *Tetrahedron*, 2014, **70**, 1529

ИССЛЕДОВАНИЕ И АНАЛИЗ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОПОКРЫТИЙ

Христолюбова В.И., Хубатхузин А.А.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет, Казань
vallerrriya@mail.ru*

В настоящий момент в машиностроении основным вопросом при производстве деталей и узлов машин является повышение прочности. В частности таких параметров как твердость, износостойкость и модуль упругости. Изучение физико-механических свойств материалов требует глубокого понимания свойств материала на микро- и наномасштабах.

Изучение износа и процессов, связанных с ним, имеет широкий спектр применения: производство магнитных устройств хранения информации, изготовление сенсоров, датчиков и т.д.

Существует множество факторов, влияющих на измерение твердости, модуля упругости, износостойкости и коэффициента трения: физико-химическое состояние поверхности, температура, шероховатость материала, чистота поверхности. Определенной задачей в последнее время является измерение твердости, модуля упругости, коэффициента трения, процессов износа материала за один измерительный цикл.

В качестве образца использовался твердый сплав ВК8 подвергнутый обработке помощью высокочастотного индукционного разряда пониженного давления при взаимодействии плазмы. С целью установления влияния воздействия ВЧ плазмы на свойства поверхности был проведен сравнительный анализ образцов до и после обработки.

Освоены методы исследования физико-механических и трибологических свойств сверхтонких покрытий с помощью сканирующего нанотвердомера. Реализован комплексный подход к изучению покрытий с применением методов измерения рельефа, шероховатости, твердости, износостойкости и толщины в рамках одного измерительного прибора, что существенно расширяет информативность проводимых исследований.

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ ИЗ БИОНЕФТИ

Хромова С.А.^{a,b}, Смирнов А.А.^a, Рехтина М.А.^{a,b}, Быкова М.В.^{a,b}

^a *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск*

^b *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

khromova@catalysis.ru

Производство альтернативных видов топлива базируется в основном на возобновляемых ресурсах, включающих отходы лесоперерабатывающей промышленности, сельского хозяйства и некоторые другие. Одним из наиболее перспективных способов переработки древесины в биотопливо является пиролиз. Методом быстрого пиролиза из древесины могут быть получены жидкие продукты с выходом до 70% вес. (бионефть) [1]. Вследствие большого количества кислородсодержащих соединений в бионефти, она имеет ряд нежелательных характеристик: высокую вязкость, термическую и химическую нестабильность, склонность к полимеризации при транспортировке и хранении. Высокое содержание кислорода в таком биотопливе снижает его эксплуатационные характеристики. Для интеграции бионефти в существующую инфраструктуру НПЗ необходимо предварительное ее гидрооблагораживание. Традиционно в этом процессе используются промышленные сульфидированные Ni—Mo- и Co—Mo-катализаторы гидрообработки, нанесенные на Al₂O₃. Реже используются катализаторы с благородными металлами в качестве активного компонента. Наиболее перспективным типом является недорогие катализаторы несulfидной природы. Ранее было показано, что биметаллические катализаторы на основе Ni проявляют активность в гидрооблагораживании бионефти и ее модельных соединений [2]. В настоящей работе была исследована активность и стабильность ряда никельсодержащих катализаторов (Ni, Ni-Cu, Ni-Mo, Ni-P-Mo) в реакциях с модельными соединениями бионефти. Изучено влияние модифицирующих добавок на каталитическую активность, селективность образования продуктов гидрирования и гидродеоксигенации, а также дезактивацию в результате коксообразования и выщелачивания активного компонента.

1 Гелетуха Г.Г., Железная Т.А. Экологические и энергосбережение, 2000, 2, 3.

2. Ardiyanti A.R., Khromova S.A., Venderbosch R.H., Yakovlev V.A., Melián-Cabrera I.V., Heeres H.J., Appl. Catal. A. 2012, 449, 121

НОВЫЕ БИЯДЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НИКЕЛЯ С МОСТИКОВЫМИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ $\{\mu\text{-O}_2\text{PR}^1\text{R}^2\}$ ЛИГАНДАМИ

Хуснуриялова А.Ф.^a, Бабаев В.М.^b, Метлушка К.Е.^b, Ризванов И.Х.^b,
Синяшин О.Г.^b, Яхваров Д.Г.^b

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

^b Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова КазНЦ РАН, Казань
aliya15071993@mail.ru

Металлоорганические соединения, содержащие два или несколько связанных между собой металлических координационных центра, обладают рядом практически полезных свойств и представляют огромный интерес для различных областей химии материалов.

Ранее нами были получены первые представители биядерных комплексов никеля типа $[\text{Ni}_2(\mu\text{-O}_2\text{P}(\text{aryl})\text{H})_2(\text{bpy})_4]\text{X}_2$, где $\text{X} = \text{Br}^-$, BF_4^- , образованных мостиковыми $\{\mu\text{-O}_2\text{P}(\text{aryl})\text{H}\}^-$ лигандами [1]. Данные соединения являются удобными объектами для исследования процессов электронного взаимодействия между двумя металлическими центрами одной молекулы и могут послужить моделями для создания новых типов электрохимически переключаемых молекулярных магнетиков и электронных устройств на их основе.

Целью настоящего исследования является разработка способов получения новых типов биядерных комплексов никеля(II), образованных гетероциклическими $\{\mu\text{-O}_2\text{PR}^1\text{R}^2\}^-$ мостиковыми лигандами, установление их структуры свойств при использовании методов масс-спектрометрии и электрохимии (рисунок 1).

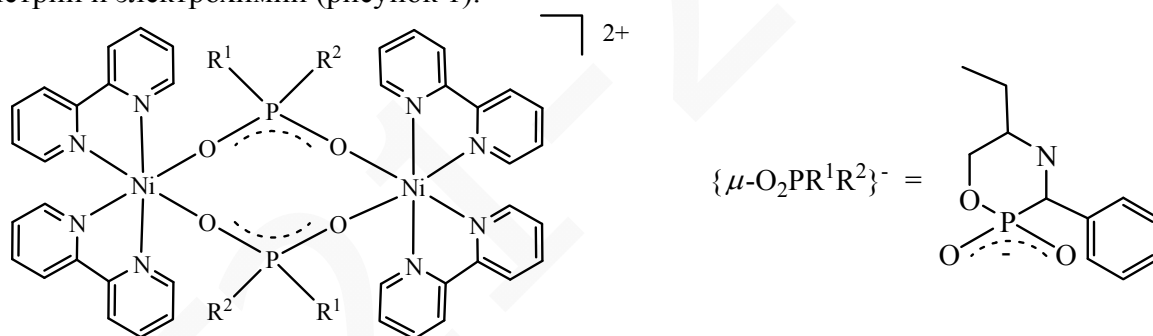


Рисунок 1.

1. D.Yakhvarov, E.Trofimova, O.Sinyashin, O.Kataeva, P.Lönnecke, E.Hey-Hawkins, A.Petr, Yu.Krupskaya, V.Kataev, R.Klingeler, B.Büchner. Inorg. Chem., 2011, 50 (10), 4553-4558.

КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА АТОМОВ ЖИДКОГО ГАЛЛИЯ ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ

Хуснутдинов Р.М.^{a,b}, Мокшин А.В.^{a,b}, Тахавиев И.Д.^a

^a *Институт физики КФУ, Казань*

^b *Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черногловка*
khrm@mail.ru

Методом атомарной динамики на основе модели потенциала "погруженного" атома исследуются структурные особенности и микроскопическая динамика жидкого галлия вблизи температуры плавления. На основе сравнительного анализа рассчитанных статических структурных факторов и коэффициента самодиффузии с экспериментальными данными показано, что данная модель потенциала верно воспроизводит структурные особенности и микроскопическую динамику расплава галлия в широком температурном диапазоне. Выполнен детальный анализ локальной "структуры" расплава галлия в области первой координационной оболочки. Установлено, что ближайшее окружение атомов характеризуется тремя "характеристическими" областями (длинами), которые полностью определяют структурные особенности всей системы. Рассчитанные спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потока обнаруживают наличие распространяющихся коллективных возбуждений, проявляющиеся в плотности вибрационных состояний в виде бимодального распределения.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант № 14-02-00335-а).

ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ ЩАВЕЛЕВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДАХ, ПОКРЫТЫХ ПЛЕНКАМИ НАФИОНА, ПОИАНИЛИНА ИЛИ ПОЛИВИНИЛПИРИДИНА С ВКЛЮЧЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ ПАЛЛАДИЯ

Челнокова И.А., Гедмина А.В., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
Irina.Chelnokova@mail.ru*

Химически модифицированные электроды (ХМЭ) с электрокаталитическими свойствами широко используются в электроаналитической химии. Эффективными катализаторами являются платиновые металлы, каталитическая активность которых зависит от размера частиц, электроосажденных на поверхности электрода.

Изучено влияние состояния поверхности и размера частиц кристаллитов палладия, электроосажденных на поверхности различных носителей, на каталитические свойства металла при электроокислении щавелевой кислоты.

Щавелевая кислота на углеродных электродах окисляется необратимо с большим перенапряжением (при $E > 1.0$ В). Частицы палладия, осажденные на стеклоуглеродном электроде, проявляют каталитическую активность при окислении щавелевой кислоты. Каталитический эффект проявляется в уменьшении потенциала окисления субстрата и многократном увеличении тока окисления модификатора. При этом на анодной ветви вольтамперограммы регистрируются два пика, высота которых зависит от концентрации кислоты, и контролируются адсорбцией или кинетикой химической реакции. Установлено, что больший каталитический эффект регистрируется при формировании равномерной мелкодисперсной структуры наноразмерных частиц палладия на поверхности электрода. Включение палладия в полимерные пленки из нафiona, полианилина и поливинилпиридина (ПВП) приводит к росту каталитической активности металла, что связано с формированием мелкодисперсного осадка с наноразмерными частицами металла на поверхности пленочного электрода. Больший каталитический эффект регистрируется на ХМЭ на основе пленки ПВП с включенными наночастицами палладия.

Предложен способ вольтамперометрического определения щавелевой кислоты на ХМЭ на основе пленки ПВП с наночастицами палладия. Линейная зависимость величины электрокаталитического отклика композитного электрода от концентрации щавелевой кислоты наблюдается до 1×10^{-6} моль/л.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-03-01101).

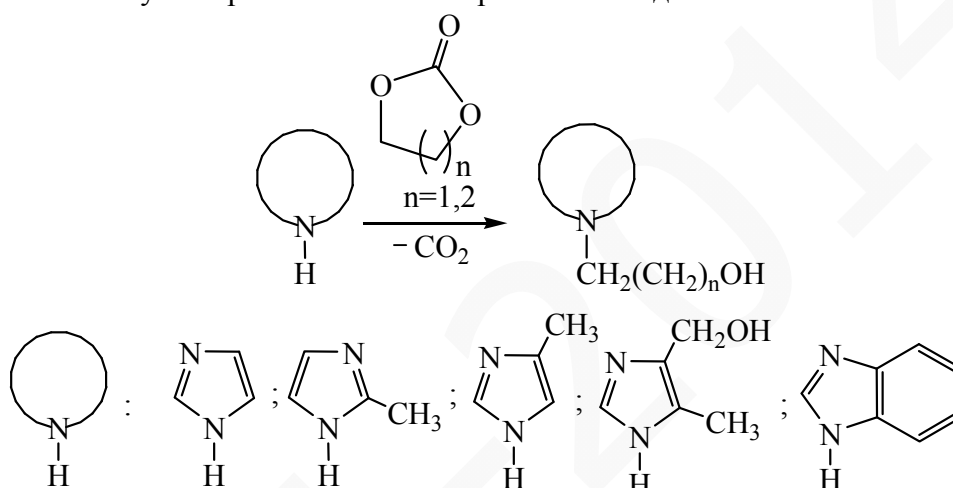
ПРИМЕНЕНИЕ ЦИКЛИЧЕСКИХ КАРБОНАТОВ КАК ЭФФЕКТИВНЫХ ГИДРОКСИАЛКИЛИРУЮЩИХ РЕАГЕНТОВ ИМИДАЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Чемезов А.И.^a, Кузнецов В.А.^b, Пестов А.В.^b

^a ВГАОУ ВПО Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург

^b Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского
Уральского отделения РАН, Екатеринбург
chemezov198@mail.ru

Гидроксиалкилирование имидазолов осуществляли путем взаимодействия гетероциклов с алкиленкарбонатами в толуоле при кипячении с обратным холодильником.



Состав и строение полученных соединений подтверждено данными ИК-, ЯМР ¹H спектроскопии и элементного анализа. Выход продуктов составляет 60-70%. Как следует из полученных данных, при использовании этиленкарбоната наблюдается 90% конверсия в целевой продукт, а в случае триметиленкарбоната – 70%, что загрязняет продукт триметиленгликолем, в результате чего возникают трудности с очисткой целевого соединения. Полученные аминоспирты использованы в качестве катализаторов раскрытия оксиранов и комплексообразователей с ионами переходных металлов.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕЦЕПТОРОВ НА ОСНОВЕ АЗОПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА В СТЕРЕОИЗОМЕРНОЙ ФОРМЕ 1,3-АЛЬТЕРНАТ

Чернова Е.Ф.^{a,b}, Овсянников А.С.^b

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

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
osaalex2007@rambler.ru

В настоящее время особый интерес привлекает создание новых материалов с запрограммированными свойствами (пористость, магнитные, электропроводные, а также оптические свойства). Каликс[4]арены, в частности, тиакаликс[4]арены являются подходящей молекулярной платформой для получения подобного рода материалов, благодаря их способности образовывать различные супрамолекулярные ансамбли, как в растворе, так и в твёрдой фазе [1]. В данной работе представлены синтез, строение и комплексообразующие свойства по отношению к «мягким» катионам металлов новых азопроизводных тиакаликс[4]арена (рис.1) в стереоизомерной форме *1,3-альтернат* – перспективных рецепторов для получения новых фото-переключаемых устройств.

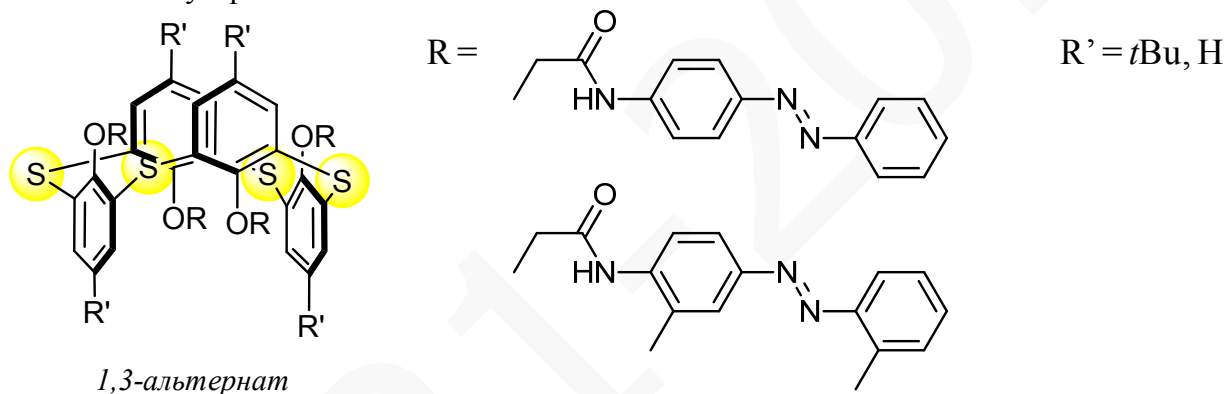


Рисунок 1.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-03-91061

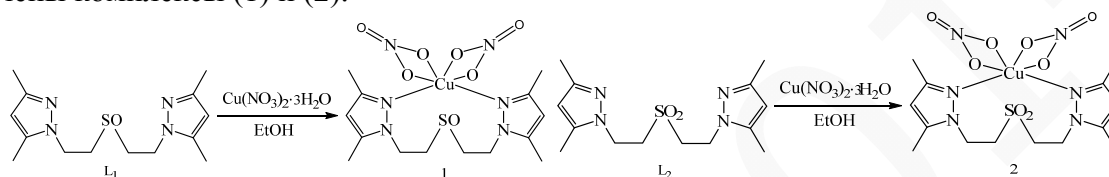
1. (a) H. Akdas et al., Chem. Commun., 2000, 2219–2220;; (c) M. N. Kozlova et al., Dalton Trans., 2007, 5126–5131; (b) A.S. Ovsyannikov et al., Dalton Trans., 2013, 42, 116–126; (c) Y. Li, W. Yang, Y. Chen and S. Gong, CrystEngComm, 2011, 13, 259-268; (d) A.S. Ovsyannikov et al., CrystEngComm, 2014, 16, 3765-3772.

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) С СЕРОСОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ

Чернова Н.П.^a, Аносова Г.А.^a, Потапов А.С.^b, Хлебников А.И.^a^a Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул
^b Томский политехнический университет, Томск
vihenka355@mail.ru

Комплексные соединения с серосодержащими лигандами на основе пиразола нашли широкое применение в самых различных областях практической деятельности. Например, комплексы 2,2'-бис(3,5-диметилпиразол-1-ил)диэтилсульфида с ионами никеля(II) и хрома(III) предложены в качестве катализаторов олигомеризации этилена [1, 2], а также проявляют биологическую активность [3].

Взаимодействием нитрата меди(II) с сульфоксидом (L1) и сульфоном (L2) нами были получены комплексы (1) и (2).



В ИК-спектре полученного комплекса (1) имеются полосы валентных $\nu(\text{SO})$ (1021 см^{-1}) и $\nu(\text{NO})$ ($1482, 1284 \text{ см}^{-1}$) колебаний. Разница волновых чисел $\Delta=1482-1284=198 \text{ см}^{-1}$ говорит о том, что нитрат ион бидентатно координирован с ионом металла [4]. Также и в ИК-спектре комплекса (2) наблюдаются полосы валентных колебаний $\nu(\text{SO}_2)$ ($1128, 1270 \text{ см}^{-1}$) и $\nu(\text{NO})$ ($1485, 1286 \text{ см}^{-1}$).

Мы предполагаем, что полученные нами комплексы являются соединениями с потенциальной антиоксидантной активностью, т.к. ранее в нашей лаборатории были получены аналоги данных соединений, где была обнаружена высокая антиоксидантная активность в клеточной системе на нейтрофилах человека.

1. Ajellal N. et al. // *Organometallics*. 2006. Vol. 25. pp. 1213-1216.
2. Junges F. et al. // *Organometallics*. 2007. Vol. 26. pp. 4010-4014.
3. Pettinari C., Pettinari R. // *Coord.Chem.Rev.* – 2005. – Vol. 249. – pp. 663-691.
4. Накомото, К. ИК- спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений / К. Накомото; -М.: Мир, 1991.-536 с.

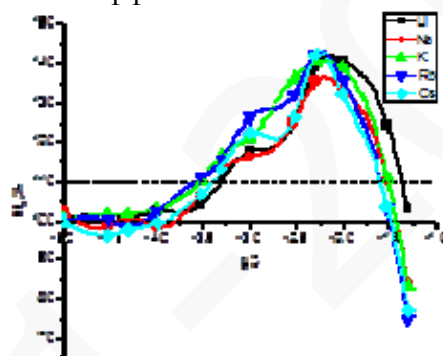
МАТРИЧНЫЕ ЭФФЕКТЫ СОЛЕЙ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В МЕТОДЕ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ С МИКРОВОЛНОВО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПЛАЗМОЙ

Чиби́рев Е.О., Ипеева Ю. В., Гари́фзянов А.Р., Черкасов Р.А.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
chibirevegor@mail.ru*

Метод атомно-эмиссионной спектроскопии (АЭС) с индуктивно-связанной плазмой занимает важнейшее место в современной аналитической химии как один из наиболее чувствительных и селективных методов элементного анализа. Однако ему присущ недостаток - большой расход плазмообразующего газа.

В этом отношении представляет интерес генерация азотной плазмы с использованием сверхвысокочастотного электромагнитного излучения. Однако температура азотной микроволново-индуцированной плазмы (МИП) значительно ниже аргоновой индукционно-связанной плазмы ($T=6000\text{K}$ и $T=10000\text{K}$ соответственно). Вследствие этого можно ожидать, что в МИП возможно проявление матричных эффектов.



При изучении влияния добавок щелочных металлов на интенсивность спектральных линий ряда $-d$ и $-f$ элементов, наблюдается увеличение интенсивности аналитического сигнала данных элементов. На рисунке показаны результаты изучения влияния ряда солей щелочных металлов на сигнал от атомов Sm. Из графика видно, что при добавлении в пробу солей щелочных металлов сигнал исследуемого элемента значительно увеличивается. Это может быть связано с тем, что соли щелочных металлов являются легкоионизирующимися и при попадании в плазму высвобождают большое количество электронов, тем самым повышая температуру плазмы. Следовательно, при исследовании образцов с высокой концентрацией щелочных металлов методом АЭС-МИП необходимо учитывать, что концентрация определяемого металла будет отличаться от истинного значения.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности (№ 4.413.2014/к).

ДИФРАКЦИЯ НА СМЕШАННОСЛОЙНЫХ НАНОТРУБКАХ С ГОФРИРОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ

Халитов З.Я., Чканов А.Е., Пашин Д.М.

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева,
Казань
andrey.chkanov@gmail.com*

После открытия в 1991 году углеродных нанотрубок интерес к исследованиям в этой области резко увеличился. Необычные электрические свойства нанотрубок делают их одним из основных материалов наноэлектроники. В последнее время синтезированы первые представители смешанослойных нанотрубок, в которых чередуются слои SnS_2 и SnS [1]. Среди них были впервые найдены «гофрированные» нанотрубки имеющие сверхпериод в продольном направлении. Данные нанотрубки представляют большой интерес для ученых, так как волнистая форма слоев, вероятно, должна привести к специфическим электрическим и колебательным свойствам.

В результате совместного исследования методами ПЭМ был обнаружен ряд дифракционных эффектов присущих данным структурам. Наряду с дифракционными эффектами присущими коаксиальным и спиральным нанотрубкам, по которым возможно определение практически полного набора структурных параметров (параметров решетки, угла хиральности и др.) было отмечено образование на дифракционной картине дополнительных слоевых линий. Было обнаружено, что расстояние между данными слоевыми линиями является обратной величиной от длины сверхпериода трубки.

В результате исследования SnS/SnS_2 нанотрубок были найдены определенные закономерности образования гофрированных решеток. Совместная работа привела к разработке модели структуры «гофрированной» нанотрубки, а также к исследованию влияния различных структурных параметров трубки на дифракционную картину [2]. Разработанная структурная модель применима для произвольных по химическому составу нанотрубок, имеющих «гофрированную» структуру.

1. G. Radovsky, R. Popovitz-Biro, M. Staiger, K. Gartsman, C. Thomsen, T. Lorenz, G. Seifert and R. Tenne, *Angew. Chem, Intl. Ed.*, 2011, 50 (51), 12316-12320.
2. O. Figovsky, D. Pashin, Z. Khalitov, D. Valeeva, A. Chkanov. *Chemistry & Chemical Technology*, 2013, 7, 251-256.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ДИКАРБОКСИЛАТНЫХ ФОСФАБЕТАИНОВ

Чубукаева Д.Р., Бахтиярова Ю.В., Галкина И.В., Галкин В.И.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
dchubukaeva@mail.ru

Для стабилизации дикарбоксилатных фосфабетаинов на основе трифенилфосфина и малеиновой и итаконовой кислот они были вовлечены в процесс комплексообразования с хлоридом цинка (II) и хлоридом меди (II) соответственно.

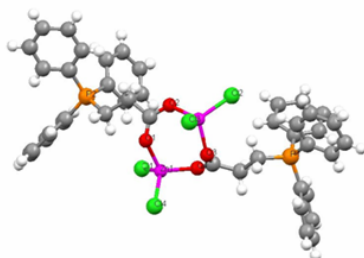
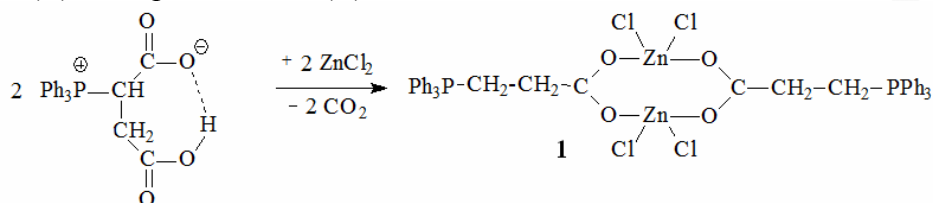


Рисунок 1. Молекулярная структура комплекса **1** ($T_{пл} = 280 \text{ }^\circ\text{C}$).

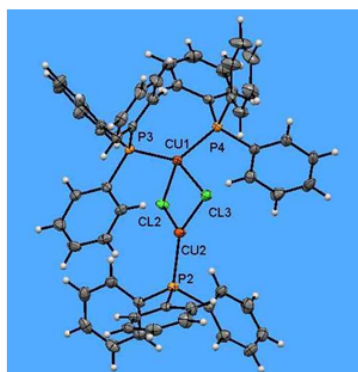
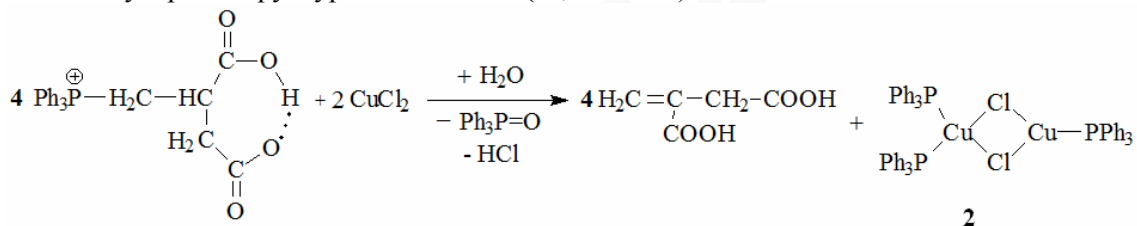


Рисунок 2. Молекулярная структура комплекса **2** ($T_{пл} = 254 \text{ }^\circ\text{C}$).

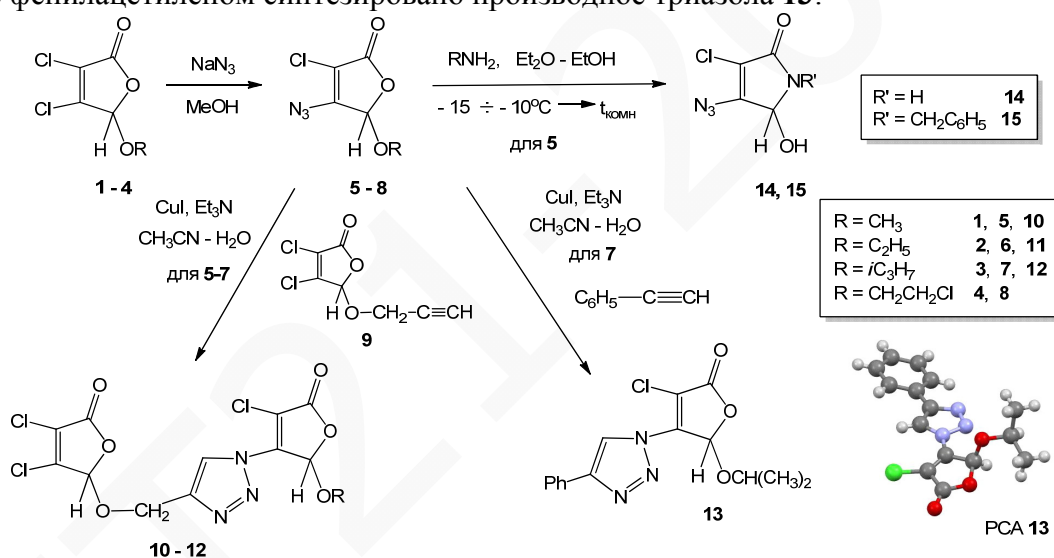
Таким образом, комплексообразование не приводит к стабилизации дикарбоксилатных фосфабетаинов в среде воды и ацетонитрила. В ходе реакции фосфабетаин на основе малеиновой кислоты дикарбоксилируются с образованием монокарбоксилатного фосфабетаина β -трифенилфосфонийэтилкарбоксилата, а фосфабетаин на основе итаконовой кислоты распадается на исходные трифенилфосфин и кислоту.

СИНТЕЗ И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЗИДОВ 2(5H)-ФУРАНОНА

Чулакова Д.Р.^a, Сайгитбаталова Е.Ш.^a, Танака К.^{a,b}, Курбангалиева А.Р.^a^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань^b Институт физико-химических исследований RIKEN, Вако, Япония
diliara.22@yandex.ru

Проблема синтеза новых и поиска рациональных методов получения потенциальных биологически активных соединений является актуальной. Данная работа является одним из путей решения этой проблемы в области синтеза азидопроизводных 2(5H)-фуранонового ряда и выявления их химического потенциала с целью получения новых кислород- и азотсодержащих гетероциклических систем.

4-Азидопроизводные 2(5H)-фуранона **5–8** были получены из соответствующих 5-алкокси-2(5H)-фуранонов **1–4** и азида натрия. Изучены реакции [3+2]-циклоприсоединения с участием азидов **5–7** и терминальных алкинов. При взаимодействии азидов **5–7** с 5-пропаргилокси-2(5H)-фураноном **9** в условиях катализа иодидом меди (I) в присутствии эквимольного количества триэтиламина получены новые гетероциклические соединения **10–12**, содержащие два различных фрагмента 2(5H)-фуранона и 1,2,3-триазольный цикл. В аналогичных условиях в реакции с фенилацетиленом синтезировано производное триазола **13**:



При действии аммиака и бензиламина на 4-азидо-5-метокси-2(5H)-фуранон **5** образуются соответствующие 4-азидопроизводные ряда 3-пирролин-2-она **14, 15**. Строение всех новых соединений охарактеризовано данными методов спектроскопии ИК, ЯМР ¹H, ¹³C.

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.

ДИЗАЙН СИНТЕТИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОЛИ(1-АМИНО)ФОСФОНАТОВ

Шабалин К.В., Адельшина М.В. Стойков И.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
veritas777999@mail.ru*

Адресная доставка веществ является одним из перспективных и бурно исследуемых направлений современной медицины и биологии. Молекулярное распознавание протеиногенных аминокислот, олигопептидов и белков является одним из перспективных и бурно исследуемых направлений современной супрамолекулярной химии.

Дизайн новых синтетических рецепторов на биологически важные субстраты востребован при разработке систем «челноков» для транспорта различных субстратов. Синтетическая доступность и нетоксичность 1-аминофосфонатов вызывает к ним повышенный интерес исследователей. Аминофосфонаты, представители фосфорорганических соединений, являются аналогами аминокислот. В связи с этим нами было предложено использовать полиаминополифосфонаты в качестве молекул-переносчиков («таксистов») протеиногенных аминокислот.

В работе проведено моделирование комплексов трис(1-амино)трифосфонатов на основе трис(2-аминоэтил)амин с протеиногенными аминокислотами. Определены участки связывания, отвечающие за молекулярное распознавание трис(1-амино)трифосфонатом изученных субстратов. Установлены закономерности влияния природы заместителя у α -атома углерода в полиаминополифосфонатных фрагментах на селективность связывания α -аминокислот, прочность и геометрию образующихся комплексов. Разработаны практические рекомендации для синтеза молекул-переносчиков протеиногенных аминокислот.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СО СТРУКТУРОЙ КОЛЬКВИРИИТА $\text{LiCa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{AlF}_6$, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ Ce^{3+}

Шавельев А.А., Низамутдинов А.С., Семашко В.В., Марисов М.А.

*Институт физики КФУ, Казань
alexey.shavelev@gmail.com*

Фторидные кристаллы со структурой кольквириита, активированные соответствующими ионами, являются эффективными активными средами твердотельных лазеров [1]. Преимущества этих соединений перед оксидными кристаллами – значительно меньшая температура плавления и значительно более широкая запрещенная зона. Значительное неоднородное колебательное уширение рабочих лазерных переходов этих ионов обуславливает широкую полосу перестройки лазерной генерации, а также возможность генерации импульсов ультракороткой длительности [2].

Целью настоящей работы являются эксперименты по выращиванию новых материалов квантовой электроники на основе фторидных кристаллов со структурой кольквириита состава LiMeAlF_6 ($\text{Me} = \text{Ca}, \text{Sr}$) и их твердых растворов, а также исследование их оптических свойств при температурах 300К и 77К.

В результате были установлены параметры процесса выращивания кристаллов твердых растворов состава $\text{LiCa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{AlF}_6$. В результате исследований рентгеновской дифракции показано, что синтезированные кристаллы ряда $\text{LiCa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{AlF}_6$ являются однофазными монокристаллами со структурой кольквириита.

Исследования методами оптической спектроскопии выявили три оптически неэквивалентных примесных центра ионов Ce^{3+} в кристаллах $\text{LiCa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{AlF}_6$. В сравнении с кристаллом $\text{LiCa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{AlF}_6$: Ce^{3+} для кристалла $\text{LiCa}_{0,2}\text{Sr}_{0,8}\text{AlF}_6$: Ce^{3+} центры, люминесцирующие в более коротковолновой области, имеют более широкую полосу люминесценции - 275 - 320 нм. Также важным результатом является большее значение коэффициента поглощения ионов Ce^{3+} в кристалле $\text{LiCa}_{0,2}\text{Sr}_{0,8}\text{AlF}_6$ (20 см^{-1} в области 270 нм) по сравнению с кристаллом LiCaAlF_6 (6 см^{-1} в области 270 нм) при одном и том же количестве компонента шихты CeF_3 в расплаве (1 ат. %).

1. Dubinskii M.A., Semashko V.V., Naumov A.K. et al. J. Modern Opt., 1993, 40, 1-5.
2. Sarukura N., Liu Z., Ohtake H., Segawa Y. et al. Opt.Lett, 1997, 22, 994-996.

ДИЗАЙН НОВЫХ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ САМООРГАНИЗАЦИИ ВХОДЯЩИХ В ИХ СОСТАВ ХРОМОФОРОВ

Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
a.v.sharipova@yandex.ru*

Возможность использования полимерных материалов с высокой квадратичной нелинейно-оптической (НЛО) активностью в фотонике и оптоэлектронике стимулирует интерес исследователей к их созданию. НЛО отклик таких материалов на приложенное электрическое поле большой интенсивности обусловлен входящими в их состав и определяющими эффект на молекулярном уровне органическими хромофорами с большими значениями дипольного момента, μ , и первой гиперполяризуемости, β . Создание условий, препятствующих их centrosymmetric расположению, составляет одну из задач дизайна полимерных материалов с квадратичной НЛО активностью. Введение хромофорных групп в ветви дендритных фрагментов позволяет осуществить их пространственное разделение и препятствует нежелательной агрегации.

Методами молекулярного моделирования исследована структура олигомеров на основе диглицидилового эфира бисфенола-А (ДГЭБА) с ковалентно присоединенными хромофорсодержащими дендритными фрагментами. На основе конформационного поиска методом Монте-Карло было установлено наличие так называемых стекинг-структур, образованных хромофорами, принадлежащими как одному, так и соседним дендронам; расстояние между плоскостями хромофоров составляет ~ 4 Å. Структура и электрические характеристики, μ и β , стекинг-организованных димеров исследованы на основании квантово-химических расчетов на уровне DFT с использованием различных функционалов с дисперсионными поправками, позволяющими учесть межмолекулярные взаимодействия: B97D, ω B97X-D, CAM-B3LYP и M06-2X. В рамках теории AIM исследованы особенности связывания в межмолекулярной области и установлено, что оно осуществляется посредством невалентных ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Поскольку установлен некоторый рост значения β димера по сравнению с β хромофора, можно рассчитывать на увеличение НЛО активности материала с такими упорядоченными структурами.

НИЗКОВЯЗКИЕ ЭПОКСИДНЫЕ СВЯЗУЮЩИЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ АРМИРОВАННЫХ ПЛАСТИКОВ

Шергин А., Магсумова А.Ф.

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н.Туполева –КАИ,
Казань
rapsody93@list.ru, ajzamags@mail.ru*

В производстве конструкционных полимерных композиционных материалов (ПКМ) наиболее широко применяемыми остаются эпоксидные связующие. Изготовление изделий из ПКМ методами трансферного формования (пропитка под давлением, инфузионная пропитка под вакуумом) предполагает пропитку сухой преформы связующим в процессе их формования. Высокое качество пропитки в этих случаях определяется уровнем технологических свойств связующего, таких как вязкость, поверхностное натяжение, смачивающая и пропитывающая способности. Возможность совмещения реакционноспособных эпоксидных олигомеров друг с другом позволяет регулировать их технологические свойства в заданном направлении.

Целью работы было исследование реологических свойств полимерных связующих на основе низкомолекулярных эпоксидных олигомеров и их смесей, а также в присутствии активных разбавителей. В качестве объектов исследования были выбраны низкомолекулярные эпоксидные олигомеры ЭД-22, ЭД-20 (ГОСТ 10587-84), DER-331, DER-354 фирмы Dow Chemical, активные разбавители: промышленно-выпускаемые алифатические эпоксидные олигомеры ДЭГ-1, Э-181, а также синтезируемый в ИОФХ им. А.Е. Арбузова – триглицидилфосфат (ТГФТ).

Вязкость смесей изучали при различных температурах на ротационном динамическом реометре «Reostress 6000» фирмы «Haake» при разных скоростях сдвига. Анализ полученных зависимостей вязкости от концентрации активных разбавителей при различных температурах показал, что существенное снижение вязкости (в 2-3 раза) наблюдается уже при 20-30%-ном содержании активных разбавителей.

Плотность эпоксидных композиций определяли пикнометрическим методом. Поверхностное натяжение, смачивающую способность изучаемых составов определяли на приборе DSA20E (EasyDrop) фирмы «Krus».

Изменения в показателях вязкости, плотности, поверхностном натяжении и угле смачивания композиций позволили оценить их пропитывающую способность.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУМАГНИТНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА HgSe:Fe МЕТОДОМ ЭПР

Шестаков А.В.^a, Фазлижанов И.И.^{a,b}, Яцык И.В.^{a,b}, Еремина Р.М.^{a,b}

a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
b Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань
Aleksey665@gmail.com

В настоящее время интенсивно исследуются полумагнитные полупроводники, как перспективные составляющие различных гетероструктур спиновой электроники. Перспективными в этом направлении являются полупроводники группы АII BVI, в которых магнитным ионом служит железо [1, 2], полупроводники с высокой подвижностью носителей заряда. Нами исследовался монокристалл селенида ртути, легированного ионами железа.

Измерения спектров ЭПР HgSe:Fe проведены на спектрометре Bruker EMX plus в температурном диапазоне от 5К до 300К. Концентрация ионов железа составляет 10^{20} см⁻³. Изучены температурные зависимости положений и ширин линий в спектре ЭПР. В спектре ЭПР ниже комнатной температуры наблюдалась группа линий, обязанная примесному иону железа Fe³⁺ (S=5/2) в тетраэдрическом окружении [3], $\Delta H \sim 110$ Ое. Ниже 80К вид спектра резко меняется. В спектре ЭПР в температурном диапазоне от 5 до 20К наблюдалась линия на $g \sim 4,1$ с шириной $\Delta H \sim 65$ Ое. Вероятно, она относится к примесному иону железа Fe²⁺. В магнитных полях выше 5000 Ое наблюдались квантовые осцилляции де Гааза-ван Альфена при температурах ниже 20 К.

Образцы предоставлены проф. В.И. Окуловым (Институт физики металлов г. Екатеринбург).

1. U. Zeitler, A. WX. Y. Cui, J. E. Medvedeva, B. Delley, A. G. Freeman, N. Newman, and C. Stampfl, Phys. Rev. Lett. 95, 256404 (2005).
2. K. Dybko, A. Lusakowski, J. Kossut, M. Arciszewska, P.J.E.M. vd Linden, A. Wittlin, J.A.A.J. Perenboom, A. Mysielski, Acta Physica Polonica A, 1995, 87, 193-196.
3. К. Ламонова, Б.Бекиров, И.Иванченко, Н. Попенко, Е.Житлухина, В. Бурховецкий, С.Орел, Ю.Пашкевич, ФНТ, 2014, 40, 842-851.

СИНТЕЗ 1-АМИНОМЕТИЛБИСФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ п-трет-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Шибяева, К.С., Назарова А.А., Стойков И.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
alleoks@mail.ru*

Современные подходы медицинской диагностики и разработки лекарств, в значительной степени, основаны на способности распознавания белков синтетическими молекулами. В настоящее время поиск новых рецепторов, способных к распознаванию поверхностей белков с высокой эффективностью и селективностью, нечувствительных к ферментативному разложению и легко проникающих через клеточные мембраны является одной из важнейших задач органической химии.

Каждый белок обладает уникальным распределением аминокислотных остатков на его поверхности, что определяет возможность селективного связывания этой поверхности молекулами «хозяев». Платформа *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена является привлекательной и очень удобной для дизайна новых синтетических рецепторов. Возможность модификации ее различными функциональными группами может обеспечить необходимую молекулярную архитектуру для связывания с пространственно сложной структурой биомакромолекул. Для избирательного связывания с белками особо интересно введение в структуру тиакаликс[4]арена фрагментов альфа-аминофосфоновых кислот, так как последние представляют собой полифункциональные соединения, биоизостерные альфа-аминокислотам, и широко известные в качестве эффективных комплексообразующих агентов.

Так, нами был разработан метод синтеза новых производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащих четыре или восемь фрагментов альфа-аминометилбисфосфоновой кислоты на нижнем ободе макроцикла, в конфигурации *1,3-альтернат*. Структура полученных соединений была доказана комплексом физических методов ЯМР ^1H , ^{31}P , ^{13}C , ИК спектроскопией, масс-спектрометрией, элементным анализом.

МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ Co(II), Ni(II), Cu(II) НА ОСНОВЕ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИКАРБАМАТА ВТОРОЙ ГЕНЕРАЦИИ

Шигапов М.Я., Кутырева М.П., Улахович Н.А., Гатаулина А.Р.

*Химический Институт им. А.М. Бутлеров КФУ, Казань
Marsell172@yandex.ru*

В настоящее время активно развиваются методы анализа объектов экологического контроля, в основе которых лежит сорбционное извлечение и концентрирование определяемых компонентов из растворов. Использование сорбентов, модифицированных хелатообразующими реагентами или функциональными группами, позволяет значительно увеличить степень извлечения и коэффициенты распределения ионов металлов. Применение модифицированных полимерных матриц для сорбционного концентрирования изучено в меньшей степени, несмотря на их очевидные преимущества, к которым можно отнести увеличение констант связывания и извлекающей способности иммобилизованных реагентов по сравнению с мономерными соединениями в растворе.

Реакцией полиэфиropoлиoла Boltorn H20 с фенилизотиоцианатом синтезирован гиперразветвленный полиэфиropoликарбамат второй генерации, содержащий 14 фрагментов фенилкарбаматных фрагментов из 16 возможных.

Разработаны методики синтеза металлокомплексов и оценены параметры комплексообразования полиэфиropoликарбамата второй генерации с ионами Cu(II), Co(II) и Ni(II). Координация ионов металлов осуществляется донорными атомами кислородакарбонильного фрагмента и азота фенилкарбаматного фрагмента. Значения констант устойчивости соответствующих комплексных форм для полиэфиropoликарбамата второй генерации возрастают в ряду $Co \approx Ni < Cu$.

Получены твердофазные пленочные сорбенты на основе нитрата целлюлозы, модифицированной полиэфиropoликарбаматом второй генерации. Оценены параметры нового модифицированного сорбента по отношению к ионам Cu(II), Co(II) и Ni(II) в водных растворах. Так, максимальная сорбционная емкость модифицированных НЦ мембран по отношению к катионам Cu(II), Co(II), Ni(II) составляет от 0,1988 до 0,3978 мг/см² и увеличивается в ряду ионов $Co < Cu < Ni$.

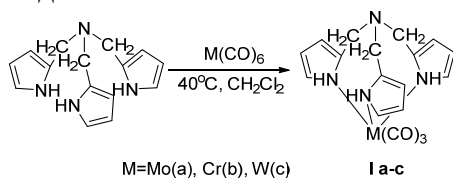
ТРИС(ПИРРОЛ- α -МЕТИЛ)АМИН В СЕЛЕКТИВНОМ РЕГИОФОСФОРИЛИРОВАНИИ КООРДИНИРОВАННЫХ ОКСО- И АЗАДИЕНОВ

Шишлюк Е.О., Черкасов Р.А., Курамшин А.И.

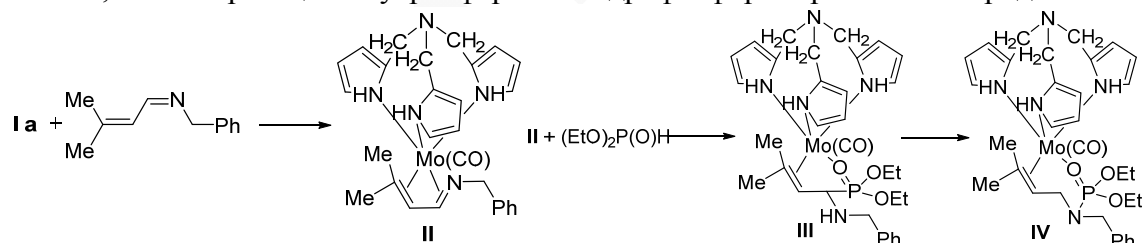
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
helen.eos@yandex.ru

Ранее было продемонстрировано, что использование металлоорганических соединений с карбонильными лигандами для региоселективного гидрофосфорилирования не позволяет выделять и изучать фосфаметаллоорганические соединения на препаративном уровне из-за обратимости реакции фосфорилирования и склонности к диспропорционированию [1].

В качестве устойчивой к диспропорционированию металлоорганической платформы для региоселективной функционализации элементоорганических соединений выгоднее использовать металлоорганические соединения, в которых для понижения вероятности диспропорционирования часть карбонильных лигандов замещена на полидентатный лиганд. В поисках подходящих лигандов мы изучили реакционную способность представителя сравнительно нового класса тридентатных лигандов – трис(пиррол- α -метил)амин (H_3tra) и его производных.



В условиях термической активации мы осуществили синтез трис(пиррол- α -метил)аминтрикарбонилметаллов(0), изучена их реакция с азадиенами и гидрофосфорильными соединениями, а также реакции внутрисферного гидрофосфорилирования гетеродиенов:



В докладе обсуждаются структуры продуктов реакций и механизмы их образования.

1. Курамшин А.И., Курамшина Е.А., Черкасов Р.А. Журн. орг. хим. 2004. Т.40. Вып.9. С.1315-1323

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ АМИЛОИДНО ПОДОБНЫХ ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ФЕНИЛАЛАНИНА ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Шленская А., Масленникова А., Сергеева И., Жданова Н., Ширшин Е.

Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
Anastasi.sh@gmail.com

Образование структурированных агрегатов белковых молекул и амилоидных фибрилл является причиной многих социально значимых заболеваний, относящихся к группе конформационных (болезни Паркинсона, Альцгеймера, и др.).

Возрастающий интерес медицины к проблеме конформационных заболеваний связан с необходимостью изучения механизма образования амилоидных фибрилл, а также разработкой методики их детектирования [1].

В данной работе различными оптическими методами (светорассеяния и флуоресцентной спектроскопии) были получены результаты, которые могут быть интерпретированы как образование агрегатов из мономеров фенилаланина в водных растворах. Методом динамического светорассеяния было получено, что интенсивность рассеяного света возрастает на 6-8 день, причем концентрация фенилаланина оказывает существенную роль на процесс самоагрегации.

В полученных спектрах флуоресценции появляется новая полоса на 420 нм, что также указывает на образование агрегатов в растворах фенилаланина. Аналогичная полоса имеет место в спектрах флуоресценции коллагена и связывается с взаимодействием типа π -stacking между остатками фенилаланина, входящими в структуру коллагена [2]. Таким образом, полоса на 420 нм может являться индикатором образования амилоидных фибрилл независимо от способа их получения и может быть использована для их детектирования.

Результаты данной работы представляют как фундаментальный интерес с точки зрения исследования взаимодействия типа π -stacking, так и практический — в качестве использования методов светорассеяния и флуоресцентной спектроскопии для детектирования заболеваний, связанных с образованием амилоидных фибрилл на ранней стадии.

1. L. Alder-Abramovich, L. Vaks et al., Nat. Chem. Biol., 2012, 8, p. 701-706
2. K. Wu, W. Liu et al., Spectrochimica Acta, 2013, 102, p. 186-193.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОФОБНЫХ ПОКРЫТИЙ С ПОМОЩЬЮ ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ ПОЛИБЛОЧНОГО ПОЛИСИЛОКСАНОВОГО СОПОЛИМЕРА

Шорникова В.В.^{a,b}, Возняковский А.П.^a, Калинин А.В.^a

^a Федеральное государственное унитарное предприятие «НИИ синтетического каучука им. Акад. С.В. Лебедева», Санкт-Петербург

^b Санкт-Петербургский Государственный Технологический Институт, (Технический Университет), Санкт-Петербург
shornikova.vita@mail.ru

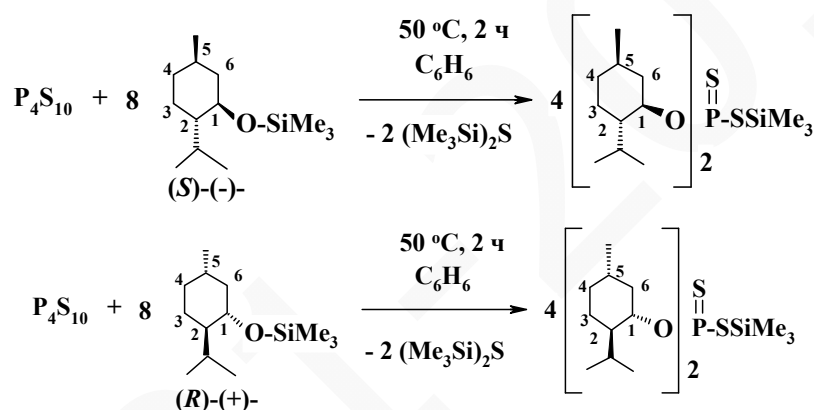
Проблема создания гидрофобных и супергидрофобных до настоящего времени привлекает внимание многих исследовательских групп. Такого рода покрытия являются востребованными при решении многих задач современного материаловедения. Большим числом работ показано, что формирование покрытий с краевым углом смачивания свыше 120 может быть обеспечено нанесением пленок гидрофобных материалов на поверхность со специально организованным наноразмерным рельефом. Иначе говоря, обеспечение условий так называемого «эффекта лотоса». В качестве базового полимера для формирования гидрофобного покрытия был выбран полиблочный полисилоксановый блок-сополимер. Выбор обусловлен изначально имеющимся сочетанием гидрофобных свойств и развитой шероховатостью поверхности его пленок. В работе было использовано два независимых направления обеспечения роста краевого угла смачивания. (1) Введение в объем полимера высокодисперсного наполнителя (детонационных наноалмазов). В этом случае мы ожидали координацию адсорбционно-активными частицами нанонаполнителя последовательностей жесткого блока и, как результат, формирования необходимого рельефа поверхности пленки. (2) Химическое модифицирование макроцепей полимера, которое подразумевало замену излишнего количества гидроксильных групп на объемный гидрофобный радикал. При этом также ожидали реализацию формирования необходимой шероховатой поверхности пленок полимера. Наши эксперименты показали, что реализация первой стратегии позволило обеспечить угол смачивания поверхности 133 ± 1 градусов. Вторая стратегия позволила обеспечить рост угол краевого смачивания до 126 градусов (от изначального 90). В работе подробно изложен предполагаемый механизм изменения энергетических свойств поверхности пленок полимера и представлен план дальнейшего развития работы.

S-ТРИМЕТИЛСИЛИЛДИТИОФОСФАТЫ НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНЫХ ТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ

Шуматбаев Г.Г., Теренжев Д.А., Низамов И.С., Черкасов Р.А., Низамов И.Д.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань
g-shumatbaev@mail.ru

Среди дитиофосфорных кислот и их производных важное практическое значение имеют соединения с хиральными центрами в качестве потенциальных биологически активных веществ. Источником хиральности могут служить такие доступные природные соединения, как монотерпеновые циклические спирты, которые извлекают из хвои и живичной смолы. В качестве дитиофосфорилирующего агента мы использовали тетрафосфордекасульфид. Однако реакции терпеновых спиртов как и других спиртов с тетрафосфордекасульфидом сопровождаются выделением токсичного газообразного сероводорода. В связи с этим мы применили метод силильной защиты гидроксильной группы терпеновых спиртов. Мы синтезировали триметилсилиловые эфиры (*S*)-(-)-ментола, (*R*)-(+)-ментола, (*R,S*)-ментола и (1*S*)-эндо-(-)-борнеола и ввели их в реакции дитиофосфорилирования с тетрафосфордекасульфидом.



Изученные реакции сопровождаются выделением бис(триметилсилил)сульфида, который легко удаляется из сферы реакции и не загрязняет целевые продукты. Полученные S-триметилсилилдитиофосфаты обладают оптической активностью. Они представляют интерес в качестве полупродуктов в реакциях замещения или присоединения, целью которых является введение хиральных терпеновых синтонов в молекулы органических соединений.

ДЕТОНАЦИОННЫЕ НАНОАЛМАЗЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА

Шумилов Ф.А., Возняковский А.П.

*Федеральное государственное унитарное предприятие «НИИ синтетического каучука им. Акад. С.В. Лебедева», Санкт-Петербург
Itachi16@mail.ru*

Несмотря на то, что детонационные наноалмазы (ДНА) получены на 10 лет раньше, чем другие виды наноматериалов (фуллерены, нанотрубки, графен) только в настоящее время они начали широко внедряться в различные области материаловедения. В частности, наиболее интенсивно они исследуются в биологии и медицине, как перспективный материал для доставки лекарств (Drug delivery). В этой связи очень важное значение приобретает возможность получения ДНА контролируемой дисперсности и химии поверхности.

Хотя постсинтетическая обработка важна для формирования финальных свойств ДНА, однако, основным фактором, влияющим на структуру кристалла, дисперсность частиц и функционализацию поверхности являются именно условия детонационного синтеза ДНА. В настоящее время условия детонационного синтеза жестко детерминированы. В этой связи повлиять на эксплуатационные параметры ДНА можно только в процессе вторичных процессов выделения. Нами была проведена работа по изучению возможности управления процессом детонационного синтеза, а именно, управлением основным механизмом – процессом цепного окисления продуктов детонационного разложения исходных взрывчатых веществ. С этой целью было использовано введение ряда ингибиторов процессов окисления продуктов детонационного разложения, как непосредственно в объем заряда, так и его бронировку.

Результаты наших экспериментов подтвердили высказанное нами предположение. Были получены ДНА пяти различных подрывов и показано, что их коллоидно-химические характеристики (дисперсность, степень окисления поверхности, массовая доля ДНА до 100нм, устойчивость суспензий к механическим воздействиям) в заметной мере зависят от природы ингибитора.

ИМПУЛЬСНЫЙ ЭПР ФОТОАКТИВНЫХ ПАРАМАГНИТНЫХ ЦЕНТРОВ В МЕТЕОРИТНЫХ НАНОАЛМАЗАХ

Юнусова К.М., Орлинский С.Б., Мамин Г.В., Явкин Б.В.

*Институт Физики КФУ, Казань
kam.chaos@gmail.com*

Изучение нанодиазмов является актуальной задачей, на данный момент рассматриваются возможности их использования даже в таких перспективных областях, как медицина [1] и разработка квантовых компьютеров [2]. Метеоритные «пресолнечные» нанодиазмы представляют отдельный интерес: обнаруженные в их составе аномальные изотопы ксенона Xe-136 [3] говорят о том, что данные кристаллы имеют больший возраст, чем Солнечная система, и, следовательно, специфические условия роста, информацию о которых можно получить посредством изучения дефектов решетки этих наночастиц. До сих пор фотоактивные парамагнитные центры в метеоритных нанодиазмах не были изучены, их структура не была установлена.

Цель работы была поставлена следующая: построение адекватных моделей рассматриваемых дефектов и последующая идентификация этих парамагнитных центров. Соответственно, задачи были определены такие: исследование зависимости интегральной интенсивности спектров ЭПР от длины волны облучающего лазера и математическое моделирование спектра.

Измерения проводились методом импульсного ЭПР на спектрометре Elexsys 680. Частота СВЧ составляла 94 ГГц. Длительности первого и второго импульсов равнялись 32 и 64 нс соответственно, эксперименты проводились при двух временных интервалах между импульсами: 200 и 1000 нс. Температура образца регулировалась с помощью гелиевого проточного криостата и изменялась в широком диапазоне. Оптическая подсветка была реализована с помощью набора твердотельных лазеров (длины волн: 266, 355, 405, 532 и 640 нм).

Оказалось, что облучение образца в ходе эксперимента влияет на интенсивность и форму получаемого сигнала, причем наибольшие изменения были зафиксированы при больших временном интервале между импульсами и энергии облучения (266 нм соответствуют 4.7эВ), из чего были сделаны выводы, что мы имеем дело с относительно медленно релаксирующим фотоактивным центром.

Была проведена симуляция полученного спектра при помощи модуля Easyspin [4]. В модель закладывались два центра – внутренний, ассоциированный с водородом, и экситонный. Параметры последнего позволяют отнести его к экситонам Ванье-Мота.

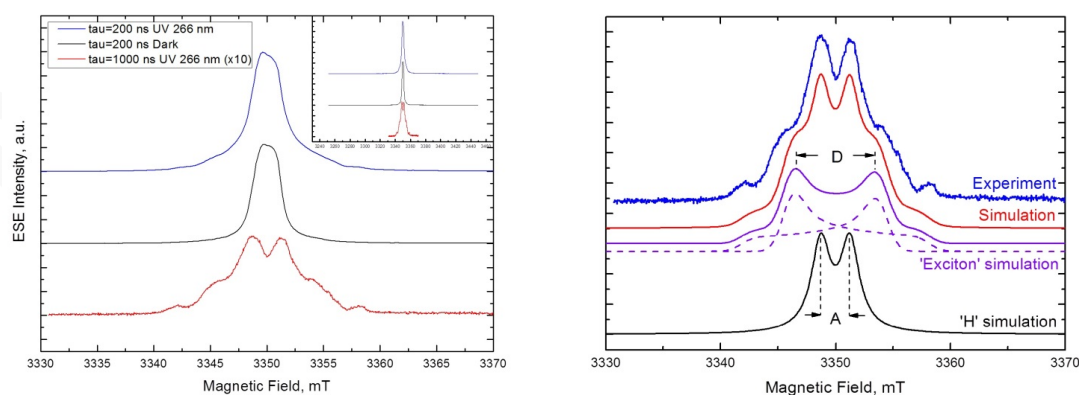


Рисунок 1. – Полученные спектры ЭПР и симуляция.

1. R.H. Baughman, A.A. Zakhidov, W.A. de Heer. *Science*, 2002, 297, 787-792.
2. M. Geiselman, M.L. Juan, J. Renger et al. *Nature Nanotechnology*, 2013, 8, 3, 175-179.
3. R.S. Lewis, B. Srinivasan, E. Anders. *Science*, 1975, 190, 1251-1262.
4. S. Stoll, A. Schweiger. *J. of Magnetic Resonance*, 2006, 1, 178, c.42-55.

**РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ И КРИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ВТСП ЛЕНТ
ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ ПРИ ПРОТОННОМ ОБЛУЧЕНИИ**Юрасов А.Д.^a, Демихов Т.Е.^b, Антонова Л.Х.^a, Троицкий А.В.^a, Михайлова Г.Н.^a^a *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва*^b *Физический институт имени Лебедева РАН, Москва**Yurasov.Aleksandr@physics.msu.ru*

В данной работе было исследовано влияние облучения протонами с энергией 2.5 МэВ на критические параметры композитных высокотемпературных сверхпроводников ВТСП-2 на основе YBCO (СуперОкс-Япония) и GdBCO (SuperPower). Облучение протонами с энергией 2.5 МэВ образцов GdBCO проводили на ускорителе Ван-де-Граафа в ОИЯИ (Дубна), образцы YBCO облучали в НИИЯФ МГУ. Флюенсы протонов Φ варьировались в интервале от 2×10^{14} p/cm² до 1×10^{17} p/cm². Измерения критического тока и критической температуры проводили резистивным методом.

Было обнаружено сильное влияние облучения на критический ток при $T = 77$ К в собственном поле для проводов-лент обоих составов. В то же время влияние на критическую температуру незначительно. В условиях данного эксперимента при температуре 77 К повышения критического тока после протонного облучения не было обнаружено. Эксперименты показали, что образцы на основе GdBCO более устойчивы к протонному облучению, чем образцы на основе YBCO. Были определены пороги радиационной стойкости для ВТСП-лент: $\Phi = 6 \times 10^{15}$ p/cm² для образцов на основе GdBCO и $\Phi = 2.7 \times 10^{15}$ p/cm² для лент на основе YBCO [1,2]. Это означает, что критический ток при этих значениях падает не более чем на 20%. При значениях $\Phi = 6 \times 10^{16}$ p/cm² для образцов на основе GdBCO и $\Phi = 2 \times 10^{16}$ p/cm² для лент на основе YBCO ток падает более чем на порядок [1,2].

Авторы выражают благодарность А.Ю. Дидыку и С.В. Самойленкову за помощь в выполнении настоящей работы.

1. Л. Х. Антонова, Т. Е. Демихов, А. В. Троицкий, А. Д. Юрасов др. Перспективные материалы, 2014, 5, 34-38.
2. Landysh Antonova, Alexander Yurasov, Alexey Troitskii et al Phys.Stat.Sol.C в печ.

ВЛИЯНИЯ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ПРОИЗВОДНОГО ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА НА ЕГО СОРБЦИОННУЮ ЕМКОСТЬ

Якупов И.Р., Лучай К.В., Зиганшин М.А., Горбачук В.В.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия
yakupov.ilsur@yandex.ru*

Супрамолекулярные рецепторы каликсарены могут быть использованы при создании систем хранения и транспорта газов, распознавании парообразных веществ в системах типа «электронный нос», для определения влажности воздуха.

Целью работы является изучение влияния фазового состояния производного трет-бутилтиакаликс[4]арена на сорбционную емкость.

Задачами данного исследования являются изучение термостабильности и определение состава клатратов, образованных различными полиморфными модификациями каликсарена. Выяснение способности производного трет-бутилтиакаликс[4]арена к запоминанию органических гостей после их удаления из клатрата.

В качестве объектов исследования был выбран трет-бутилтиакаликс[4]арен тетразамещенный по нижнему ободу ацетооксиэтилкарбомоилметоксильными группами в конфигурации «1,3-альтернат» (каликсарен 1). В качестве гостей были выбраны летучие соединения различной структуры.

Экспериментальными методами для анализа клатратов и исходных фаз каликсарена 1 в нашей работе являются ДСК и совмещенный метод ТГ/ДСК/МС анализа.

Совмещенным методом ТГ\ДСК\МС анализа была изучена термостабильность и фазовые переходы каликсарена 1 при нагревании. На ДСК кривой наблюдаются четыре эндотермических пика, соответствующих одному стеклообразному и трем фазовым переходам. На ДСК кривой для g-образца каликсарена 1 наблюдается один эндо пик, соответствующий стеклообразному переходу. Последующий нагрев g-образца каликсарена 1 способствует деструкции.

Обнаружена способность каликсарена 1 к запоминанию отдельных органических соединений. Эффект памяти выражается в образовании метастабильной β_0 -фазы после ухода гостя из клатрата. Установлено, что каликсарен 1 способен запоминать метанол, ацетонитрил и ацетон.

Выводы: Производное трет-бутилтиакаликс[4]арена способно существовать в четырех полиморфных и стеклообразной формах, а также запоминать отдельные органические соединения. Метастабильная полиморфная форма каликсарена 1 обладает наибольшей сорбционной емкостью для воды по сравнению с другими формами этого хозяина.