

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXIX

№ 1

Москва
2025

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

У78 **Успехи в химии и химической технологии:** сб. науч. тр. Том XXXIX,
№ 1 (292). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2025. – 65 с.

В сборник вошли статьи по актуальным вопросам в области теоретической и экспериментальной химии.

Материалы сборника представлены для широкого обсуждения на XXI Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «UCChT-2025», XXXIX Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2025», ряде международных и российских конференций, симпозиумов и конкурсов, а также на интернет-сайтах.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24. 35

ISSN 1506-2017

© Российский химико-технологический
университет им. Д. И. Менделеева, 2024

Содержание

Конференция обучающихся факультета ЦиТХИИ

Баранов Н.И., Сафир Р.Е., Боженко К.В., Чередниченко А.Г., Багрий Е.И. Квантово-химическое исследование получения 1-этинил-3-метиладамантана путём ионного алкилирования 1-метиладамантана этиленом.....	6
Волик Н. И., Зенкова А. А., Крючкова Т.А., Шешко Т.Ф., Чередниченко А.Г. Исследование сложных оксидов $Gd(Co,Ni)O_3$: интеграция нейросетевого моделирования и экспериментальных исследований.....	9
Горбунова М.В., Васецкий А.М. Реализация игры «Лаборатория» на платформе Unity	14
Ефимова А.М., Рублева С.А., Зверева О.В., Аверина Ю.М. Критерии оценки инновационного проекта в химической промышленности.....	18
Карченкова А.И., Уварова А.А., Гордиенко М.Г. Разработка методики количественного определения молнупиравира и её предвалидация	21
Лазаренко А.С., Аксёнова Е.С., Ахмина П.В., Скворцова Л.Г., Крючкова Т.А., Шешко Т.Ф., Чередниченко А.Г. Кислородная нестехиометрия сложных оксидов $GdFe_{1-x}Co_xO_3$, допированных калием: оценка с использованием нейронной сети и эксперимента	25
Михайлин С.В., Челноков В.В., Потапов Г.Г., Зосимов С.Э., Коржевский С.В., Рой К.О. Аддитивные технологии в производстве постоянных магнитов для вентильных электродвигателей	29
Нестерова А.В., Ильина С.И., Равичев Л.В. Электроперенос в системном анализе химико-технологической системы	33
Пигас А.В., Зубарев А.М. Покровский С.Я. К вопросу об интенсификации процесса нанесения порошковых лакокрасочных материалов	36
Скобникова Д.Д., Уварова А.А., Меньшутина Н.В. Гемостатические гели на основе хитозана	40
Ходарева М.Д., Мочалова М.С. Разработка алгоритма расчета процесса ступенчатой замены растворителя в частицах хитозанового геля.....	44
Челнокова А.В., Аверина Ю.М., Рой К.О. Автоматизация развертывания безопасной виртуальной инфраструктуры в промышленной среде	47
Гусева Е. В., Фесик Е. В. Краунсодержащий хлороплатиновый комплекс и бактерицидная активность	51

Гусева Е. В., Фесик Е. В.

18-краун-6 и дибензо-18-краун-6: сравнительная характеристика бактерицидных и антиоксидантных свойств54

Ходарева М.Д., Мочалова М.С.

Исследование процессов получения микрочастиц аэрогеля на основе хитозана в качестве местных гемостатических средств.....58

Юркин М.Е., Аверина Ю.М., Юркина Е.В.

Ключевой сотрудник цифрового предприятия: роль человека в эпоху автоматизации производства61

Конференция обучающихся факультета ЦиТХИн

УДК 544.32, 544.43

Баранов Н.И., Сафир Р.Е., Боженко К.В., Чередниченко А.Г., Багрий Е.И.

Квантово-химическое исследование получения 1-этенил-3-метиладамантана путём ионного алкилирования 1-метиладамантана этиленом

Баранов Николай Игоревич, ассистент кафедры физической и коллоидной химии; baranov-ni@rudn.ru.

Сафир Романна Евгеньевна, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии;

Боженко Константин Викторович, д.х.н., профессор кафедры физической и коллоидной химии;

Чередниченко Александр Генрихович, д.х.н., заведующий кафедрой физической и коллоидной химии.

ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН), Россия, Москва, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.

Багрий Евгений Игнатьевич, д.х.н., главный научный сотрудник;

ФГБУН «Институт Нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук», Россия, Москва, 119991, Ленинский проспект, 29

В рамках исследования была детально изучена с помощью методов квантовой химии реакция получения 1-этенил-3-метиладамантана методом ионного алкилирования 1-метиладамантана этиленом в присутствии хлорида алюминия в качестве катализатора. Обнаружено несколько возможных путей получения продукта. Вычислены значения свободной энергии Гиббса активации для всех элементарных стадий, которые имеют достаточно низкие значения свободной энергии Гиббса активации. Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности использования данного метода для получения алкениладамантанов, обладающих большим практическим значением.

Ключевые слова: адамантаны, ионное алкилирование, алкениладамантаны, DFT.

Quantum-chemical study of 1-ethenyl-3-methyladamantane formation by ionic alkylation of 1-methyladamantane with ethyleneBaranov N.I.¹, Safir R.E.¹, Bozhenko K.V.¹, Cherednichenko A.G.¹, Bagrii E. I.²¹Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba (RUDN University), Moscow, Russian Federation²A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

Quantum-chemical calculations were performed for the detailed study of 1-ethylene-3-methyladamantane formation by ionic alkylation of 1-methyladamantane with ethylene using aluminium chloride as a catalyst. Several ways of obtaining the product were found out. The values of free Gibbs energy of activation were calculated. The elementary stages has low and moderate free Gibbs energy of activation values what makes it possible to conclude that such method may be used for the production of alkenyladamantanes with high practical significance.

Key words: adamantanes, ionic alkylation, alkenyladamantanes, DFT.

Введение

Непредельные производные адамантана (алкениладамантаны) широко используются в различных областях науки и имеют большое практическое значение. Эти соединения могут быть использованы при производстве оптических материалов, ракетных топлив, лекарственных препаратов, люминофоров [1-3]. Кроме того, ненасыщенные адамантаны являются мономерами для проведения реакций полимеризации, благодаря которым получают высокомолекулярные соединения с уникальными свойствами [4]. Поэтому поиск новых методов получения непредельных адамантанов с высокой селективностью и выходом представляет актуальную задачу для исследователей. Для решения этой задачи необходимо знать механизмы, лежащие в основе рассматриваемых химических реакций и влияние строения реагентов, а также катализаторов на скорость образования ненасыщенных производных адамантана.

В настоящее время существует достаточно много методов синтеза непредельных соединений адамантанового ряда, среди которых интерес представляет процесс ионного алкилирования адамантана. Особенностью этой реакции является образование, наряду с насыщенными продуктами (алкиладамантанами), также непредельных соединений преимущественно нормального, а не разветвлённого строения [5]. Количество алкениладамантанов может быть достаточно высоким и достигать 30 % от общего количества полученных продуктов [5]. В то же время данные процессы не были детально исследованы ни в экспериментальном плане, ни путем квантово-химического моделирования. Достоинством квантово-химических расчётов, в том числе с использованием искусственного интеллекта и нейросетей, является возможность оценить скорость протекания различных химических процессов без проведения

дорогостоящих экспериментов, занимающих большое количество времени.

Цель работы заключалась в исследовании термодинамических и кинетических особенностей протекания реакций ионного алкилирования 1-метиладамантана этиленом с образованием 1-этенил-3-метиладамантана и сравнение полученных данных с ранее изученными нами реакциями получения 1-этениладамантана [6] и 1-н-транс-пропениладамантана [7]. Актуальность работы заключается в исследовании с помощью методов квантовой химии особенностей механизма синтеза алкениладамантанов, обладающих высокой практической ценностью.

Экспериментальная часть

Квантово-химические расчёты были выполнены с использованием программы Gamess US [8] с применением гибридного функционала электронной плотности B3LYP с учетом дисперсионных поправок Гримме 3 версии в приближении затухающего потенциала по Беке-Джонсону D3(BJ) и поплковского базисного набора 6-311++G**, включающего добавление поляризационных и диффузных функций на все атомы.

Свидетельством того, что атомно-молекулярная структура обладает минимальным значением энергии, являлось отсутствие мнимых гармонических частот. Доказательством обнаружения седловой точки или переходного состояния (ПС) являлось наличие 1 мнимой частоты. Процедура внутренней координаты реакции IRC (Intrinsic Reaction Coordinate) использовалась для доказательства соответствия переходного состояния именно данной элементарной химической реакции. В расчетах все процессы рассматривались как протекающие в газовой фазе. Для поиска переходных состояний использовалось сканирование вдоль координаты реакции путём оптимизации структур при заморозке расстояний и оптимизацией остальных геометрических параметров. Термические поправки рассчитаны при температуре 298 К и давлении 101325

Па (1 атм) в приближениях идеального газа, гармонического осциллятора и жёсткого ротатора. В качестве характеристик процессов рассматривались значения свободной энергии Гиббса G_{298} при 298 К. Для оценки скорости протекания химических реакций использовались значения свободной энергии Гиббса активации при 298 К $\Delta G^\#_{298}$. В качестве кислотного катализатора был выбран комплекс $AlCl_3 \cdot HCl$.

Обсуждение результатов

Известно, что ионное алкилирование адамантанов протекает по третичным атомам углерода с образованием преимущественно продуктов нормального строения. В качестве основной реакционной частицы выступают стабильные третичные адамантилкатионы.

Присутствие в реакционной смеси кислотного катализатора позволяет получать непредельные продукты. Свидетельством того, что выбранное приближение B3LYP-D3(BJ)/6-311++G** может быть использовано для изучения подобных превращений служат данные квантово-химических расчётов, демонстрирующие преимущественное образование 1-[(E)-проп-1-енил]адамантана при алкилировании адамантана пропиленом ($\Delta G_{298} = -64,2$ ккал/моль) и 1-[(E)-бут-2-енил]адаманта при взаимодействии с бутиленом ($\Delta G_{298} = -65,4$ ккал/моль), что согласуется с экспериментальными данными [5,9].

Анализ процесса образования 1-этенил-3-метиладамантана при ионном алкилировании 1-метиладамантана этиленом с целью изучения влияния метильных заместителей на механизм образования винильных производных в сравнении с реакцией для незамещённого адамантана [6] и образованием пропенилпроизводных на примере транс-пропениладамантана [7] показал, что для реакции $1-MeAd^+ + C_2H_4 + AlCl_4^- \rightarrow 1-этенил-3-метиладамантан + AlCl_3 \cdot HCl$ величина $\Delta G_{298} = -64,7$ ккал/моль (здесь и далее MeAd – метиладамантан). Рассчитанные значения ΔG_{298} и $\Delta G^\#_{298}$ для элементарных реакций представлены в таблице 1.

Таблица 1. Свободные энергии Гиббса и свободные энергии Гиббса активации элементарных реакций при алкилировании 1-метиладамантана этиленом с образованием 1-этенил-3-метиладамантана.

Реакция	ΔG_{298} , ккал/моль	$\Delta G^\#_{298}$, ккал/моль
$MeAd^+ + C_2H_4 \rightarrow MeAd^+ \cdot C_2H_4$	4,3	–
$MeAd^+ + AlCl_4^- + C_2H_4 \rightarrow MeAd-CH_2-CH_2-AlCl_4$	-22,6	2,4
$MeAd-CH_2-CH_2-AlCl_4 \rightarrow MeAd-CH=CH_2 + AlCl_3 \cdot HCl$	9,3	19,3
$MeAd-CH_2-CH_2-AlCl_4 \rightarrow MeAd-C^+H(AlCl_4^-)-CH_3$	-4,3	22,0
$MeAd-C^+H(AlCl_4^-)-CH_3 \rightarrow MeAd-C^+H-CH_3 \cdot AlCl_4^-$	12,7	13,9
$MeAd-C^+H-CH_3 \cdot AlCl_4^- \rightarrow MeAd-CH=CH_2 + AlCl_3 \cdot HCl$	0,8	-
$MeAd^+ + AlCl_4^- + C_2H_4 \rightarrow MeAd-C^+H(AlCl_4^-)-CH_3$	-23,2	6,4

По сравнению со взаимодействием с пропиленом [7], третичные адамантилкатионы с этеном не образуют катионов вида $R\text{-Ad-CH}_2\text{-CH}_2^+$ ($R = \text{H}, \text{CH}_3$). Вместо них образуются комплексы вида $R\text{-Ad}^+ \cdot \text{C}_2\text{H}_4$ ($\Delta G_{298} = 4,3$ ккал/моль для реакции с участием 1-метиладамантилкатиона), в которых расстояния между атомами углерода катиона и алкена составляют 2,8 - 2,9 Å. Непосредственно из катиона MeAd^+ , аниона AlCl_4^- и олефина можно получить интермедиат с формулой $\text{MeAd-CH}_2\text{-CH}_2\text{-AlCl}_4$. Для образования данного соединения необходимо преодолеть энергетический барьер, составляющий 2,4 ккал/моль. Таким образом, данная элементарная реакция протекает с высокой скоростью, причём быстрее, чем формирование структурного аналога $\text{Ad-CH}_2\text{-CH}_2\text{-AlCl}_4$ в случае незамещённого адамантана [6].

Из интермедиата целевой продукт может быть получен как непосредственно, так и в несколько элементарных стадий, аналогично алкилированию адамантана этиленом с образованием 1-этиниладамантана [6]. Свободная энергия Гиббса активации непосредственного образования 1-этинил-3-метиладамантана из $\text{MeAd-CH}_2\text{-CH}_2\text{-AlCl}_4$ составляет 19,3 ккал/моль и данная стадия является лимитирующей. Аналогичная ситуация с близкими значениями $\Delta G_{298}^\ddagger$ наблюдается и при получении 1-виниладамантана [6].

Рассматривая альтернативный вариант получения целевого продукта, когда интермедиат $\text{MeAd-CH}_2\text{-CH}_2\text{-AlCl}_4$ подвергается изомеризации, заключающейся в переносе протона и атома хлора: $\text{MeAd-CH}_2\text{-CH}_2\text{-AlCl}_4 \rightarrow \text{MeAd-C}^+\text{H}(\text{AlCl}_4^-)\text{-CH}_3$, следует отметить, что данная реакция протекает экзотермично, с большим значением $\Delta G_{298}^\ddagger$, чем при образовании ненасыщенного продукта алкилирования. По этой причине данный вариант синтеза алкениладамантана представляется менее энергетически выгодным. Однако данная молекула образуется значительно легче непосредственно из MeAd^+ , AlCl_4^- и C_2H_4 ($\Delta G_{298}^\ddagger = 6,4$ ккал/моль) и новая структура претерпевает разрыв связи углерод-хлор с одновременным сокращением расстояния между атомами хлора и водорода. Присоединение протона к катализатору, являющееся последней стадией получения 1-этинил-3-метиладамантана, происходит практически безбарьерно. Схожим методом может быть получен и 1-этиниладамантан [6].

Заключение

В ходе проведенного исследования было показано, что 1-этинил-3-метиладамантан может

образовываться несколькими путями при ионном алкилировании 1-метиладамантана этиленом. Виниладамантаны могут образовываться несколькими путями, в то время как пропениладамантаны образуются только по одному механизму. Наличие метильных заместителей не оказывает влияния на механизм реакции, оставляя неизменным количество элементарных реакций и сохраняя в большинстве случаев близкие значения энергий активации. Полученные значения энергии активации позволяют сделать вывод о возможности практического использования реакции ионного алкилирования для синтеза алкениладамантанов.

Список литературы

1. Robello D.R. Moderately high refractive index, low optical dispersion polymers with pendant diamondoids // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2013. – Т.127. – № 1. – С. 96-103.
2. Min J. et al. Adamantyl antiestrogens with novel side chains reveal a spectrum of activities in suppressing estrogen receptor mediated activities in breast cancer cells // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2017. – Vol. 60. – № 14. – P. 6321-6336.
3. Zhang Y. et al. A sequential dual-lock strategy for photoactivatable chemiluminescent probes enabling bright duplex optical imaging // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2020. – Vol. 59. – № 23. – P. 9059-9066.
4. Ishizone T. et al. Synthesis of polymers carrying adamantyl substituents in side chain // *Polymer Journal*. – 2018. – Vol. 50. – № 9. – P. 805-819.
5. Багрий Е.И. Адамантаны: получение, свойства, применение – М.: Наука, 1989. – 264 с.
6. Baranov N.I. et al. Quantum chemical study of the production of the 1-vinyladamantane as a result of ionic alkylation of adamantane with ethylene // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2024. – Vol. 98. – № 2. – P. 252 - 259.
7. Baranov N.I. et al. Catalytic alkylation of adamantane with propylene: quantum-chemical calculations and experimental data // *Petroleum Chemistry*. – 2020. – Vol. 60. – № 9. – P. 1033-1042.
8. Barca G.M.J. et al. Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system // *The Journal of Chemical Physics*. – 2020. – Vol. 152. – № 15. – P. 154102.
9. Baimuratov M. R. et al. Alkenylation of adamantanol with alcohols in the presence of sulfuric acid // *Russian Journal of Organic Chemistry*. – 2024. – Vol. 60. – № 8. – P. 1591-1599.

Волик Н. И., Зенкова А. А., Крючкова Т.А., Шешко Т.Ф., Чередниченко А.Г.

Исследование сложных оксидов $Gd(Co,Ni)O_3$: интеграция нейросетевого моделирования и экспериментальных исследований

Волик Надежда Игоревна, магистр 2-го года обучения кафедры физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Зенкова Анастасия Александровна, студентка 4-го курса бакалавриата кафедры физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Крючкова Татьяна Алексеевна, к.х.н., ст. преподаватель кафедры физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва; kryuchkova-ta@rudn.ru

Шешко Татьяна Фёдоровна, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва; Чередниченко Александр Генрихович, д.х.н., заведующий кафедрой Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы (РУДН), факультет физико-математических и естественных наук, кафедра физической и коллоидной химии, 117198, Москва, ул.

Миклухо-Маклая, д. 6.

В рамках данного исследования были синтезированы и охарактеризованы системы состава $GdNi_xCo_{1-x}O_{3-\delta}$. С помощью искусственного интеллекта был проведен анализ кислородной нестехиометрии при различных возможных степенях окисления катионов и расчет параметров решетки. Проведены каталитические эксперименты для реакции углекислотной конверсии метана. Установлено взаимосвязь между природой металла в В-положении и величиной кислородной нестехиометрии. Изучено влияние металлов в В-положении на каталитические свойства. Проведены эксперименты по установлению времени работы катализатора.

Ключевые слова: золь-гель метод, никель, кобальт, катализ, углекислотная конверсия метана, перовскиты

Examination of complex $Gd(Co,Ni)O_3$ oxides: integration of neural network modeling and experimental research $Gd(Co,Ni)O_3$ as catalysts for dry methane reforming

Volik N. I., Zenkova A. A., Kryuchkova T.A., Sheshko T.F., Cherednichenko A.G.

Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya Street, Moscow, 117198, Russian Federation

Within the framework of this study, $GdNi_xCo_{1-x}O_{3-\delta}$ composition systems were synthesized and characterized. The analysis of oxygen non-stoichiometry at various oxidation states of cations, and the calculation of lattice parameters were obtained using artificial intelligence. Catalytic experiments were carried out in carbon dioxide conversion of methane reaction. The presence of oxygen vacancies of an ordered nature is established, and their number is calculated. The effect of metals in the B-position influence on the catalytic properties is studied. Experiments were carried out to establish the operating time of the catalyst.

Keywords: sol-gel method, nickel, cobalt, catalysis, carbon dioxide conversion of methane, perovskites

Введение

Рациональное использование энергетических ресурсов и поиск устойчивых источников энергии является актуальной задачей в сфере энергетики. Биогаз – газообразное топливо, которое получается в результате анаэробного разложения биомассы и состоит из метана и углекислого газа.

Одно из направлений использования биогаза – превращение в синтез-газ с помощью углекислотной конверсии метана (УКМ). Данная реакция является перспективным направлением в зеленой химии по улавливанию и дальнейшему использованию CO_2 . Образующийся синтез-газ ($CO + H_2$) является экологически чистым источником тепла и энергии. Также синтез-газ играет огромную роль в промышленности, так как является сырьем для производства большого количества промышленных продуктов, например метанола, оксосинтеза, топлива и т. д. [1].

Одной из проблем использования УКМ в промышленности является отсутствие высокоэффективного, селективного и стабильного катализатора. Пример такого катализатор – перовскит, материал на основе сложных оксидов со

смешанной ион-электронной проводимостью [2]. Перовскиты обладают высокой каталитической активностью, что вызывает интерес к их изучению и использованию [3]. Применение их в катализе было обусловлено воспроизводимостью материалов для синтеза и высокой термической и механической стабильностью [4].

Перовскиты имеют структуру ABO_3 , где на месте А и В могут находиться различные металлы. Частичное замещение металлов позволяет контролировать свойства сложного оксида, что приводит к эффективным результатам.

Таким образом, данная работа направлена на изучение особенностей протекания реакции углекислотной конверсии метана на сложных оксидах $Gd(Co,Ni)O_3$ с варьируемым содержанием металлов в В-положении.

Экспериментальная часть

Синтез и характеристика сложных оксидов.

Исследуемые образцы $GdCo_{1-x}Ni_xO_{3-\delta}$ ($x = 0; 0,2; 0,5; 0,8; 1$) были получены золь-гель методом, с использованием лимонной кислоты по методике, описанной в [5]. Определение фазового состава и кристаллической структуры проводили с помощью

метода рентгенофазового анализа (РФА). Измерения рентгendifракционных спектров проводили на автоматизированном дифрактометре Bruker Advance D8 (излучение CuK_α) в интервале углов $2\theta = 10^\circ - 60^\circ$ с шагом сканирования $0,0133^\circ$.

Инфракрасная спектроскопия поглощения проводилась на спектрофотометре Nicolet 6700. Спектры были записаны в области средних и дальних волн инфракрасной спектроскопии ($4000-400 \text{ см}^{-1}$).

Для теоретического определения содержания кислорода (3- δ) в образцах и расчета параметров решетки использовали нейросеть модели deepseek-v3. Экспериментальные значения получали методом йодометрического титрования. KI растворяли в растворе HCl, затем в этот полученный раствор добавляли навеску перовскита (30–40 мг) и герметично закрывали колбу, оставляя ее в темном месте на 5–10 минут. В результате протекания окислительно-восстановительной реакции катионы Co^{3+} переходят в Co^{2+} . В качестве титранта использовали стандартный раствор $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$, индикатор – крахмал.

Тестирование каталитической активности.

Исследование каталитической активности производилось в проточной каталитической системе, используя U-образный кварцевый реактор в диапазоне температур 773–1223K, при атмосферном давлении, в объемных скоростях реакционной смеси 0,9–1,0 л/ч и при соотношении компонентов $\text{CO}_2:\text{CH}_4 = 1:1$. Температура реакционной смеси контролировалась цифровым измерителем-регулятором «Овен ТРМ1», оснащенным термопарой типа К. Реакционная смесь проходила через слой катализатора и поступала в устройство для отбора образцов хроматографа Кристалл-5000. Разделение компонентов смеси производилось на насадочной колонке с сорбентом Porapak Q. Для количественного анализа веществ использовались пламенно-ионизационный детектор и по теплопроводности. Каталитические характеристики определяли и рассчитывали при достижении постоянства площадей хроматографических пиков – стационарного состояния.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 представлены результаты рентгенофазового анализа (РФА) для всех исследуемых образцов состава $\text{GdCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0; 0,2; 0,5; 0,8; 1$). Только три образца состава $\text{GdCoO}_{3-\delta}$, $\text{GdNi}_{0,2}\text{Co}_{0,8}\text{O}_{3-\delta}$ и $\text{GdNi}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{O}_{3-\delta}$ кристаллизовались в структуру перовскита, о чем свидетельствует пик 100%-ной интенсивности в области углов $2\theta \approx 34^\circ$, относящийся к перовскитной фазе с орторомбической структурой пространственной группы $Pbnm$. Образцы со степенью замещения $x = 0,8$ и $x = 1$ имеют оксидные фазы: Gd_2O_3 и NiO , чему соответствуют пики в области углов 29° и 44° , соответственно. Пики средней интенсивности в области углов $2\theta \approx 34^\circ$ и 48°

свидетельствуют о том, что перовскитная фаза сформирована частично. Частичное формирование перовскитной структуры и преобладание оксидных фаз, предположительно, объясняется тем, что для никеля не характерна степень окисления +3 [7]. Образец со стехиометрическим количеством металлов в В-позиции имеет малоинтенсивный пик в области $2\theta \approx 29^\circ$, что говорит о присутствии примесной фазы в виде оксида гадолиния (III).

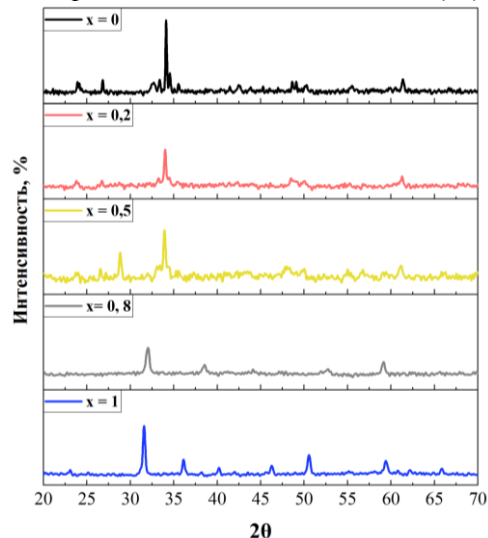


Рис.1. Диффрактограммы сложных оксидов $\text{GdCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$.

Анализ образцов с помощью ИК-спектроскопии проводился в средней области излучения ($4000-400 \text{ см}^{-1}$) и было обнаружено, что во всех ИК-спектрах в области «отпечатков пальцев» присутствуют полосы. Их наличие соответствует колебаниям связей Co-O/Ni-O , Gd-O и Gd-O-Co/Gd-O-Ni : $\sim 560 \text{ нм}$, $\sim 660 \text{ нм}$ и $\sim 500 \text{ нм}$, что соответствует колебаниям связи Me-O для катионов металлов, относящимся к октаэдрическому состоянию MeO_6 (где $\text{M} = \text{Co}, \text{Ni}$) в структуре перовскита [7-8]. Для всех никельсодержащих образцов наблюдается валентное колебание связи Ni-O в диапазоне $855-830 \text{ см}^{-1}$ [9].

С помощью искусственного интеллекта был получен анализ кислородной нестехиометрии при различных возможных степенях окисления катионов, основанный на известной формуле сложных оксидов и данных РФА.

В таблице 1 приведено сравнение сгенерированных данных с экспериментальными значениями, полученными в результате проведения йодометрического. Можно сделать вывод, что все структуры являются анион-дефицитными [10], так как $\delta > 0,1$, что подтверждено экспериментально.

Выявлено, что наблюдается зависимость между числом кислородных вакансий и процентным содержанием никеля в структуре – при введении никеля в кристаллическую решетку происходит увеличение кислородных дефектов (таблица 1). Данный эффект подтвержден литературой [11].

Таблица 1. Результаты определения кислородной нестехиометрии для оксидов $GdCo_{(1-x)}Ni_xO_3$ с помощью искусственного интеллекта

Состав	Оценка с помощью искусственного интеллекта		Экспериментальные значения
	Предполагаемые степени окисления	δ	
$GdCoO_{3-\delta}$	Co^{3+}	0	0,338
	Co^{2+}	0,25	
$GdCo_{0,8}Ni_{0,2}O_{3-\delta}$	Co^{3+}, Ni^{3+}	0	0,320
	Co^{2+}, Ni^{2+}	0,3	
	$Co^{2,5+}, Ni^{2,5+}$	0,15	
$GdCo_{0,5}Ni_{0,5}O_{3-\delta}$	Co^{3+}, Ni^{3+}	0	0,353
	Co^{2+}, Ni^{2+}	0,5	
	$Co^{2,5+}, Ni^{2,5+}$	0,25	
$GdCo_{0,2}Ni_{0,8}O_{3-\delta}$	Co^{3+}, Ni^{3+}	0	0,413
	Co^{2+}, Ni^{2+}	0,4	
	$Co^{2,5+}, Ni^{2,5+}$	0,1	
$GdNiO_{3-\delta}$	Ni^{3+}	0	0,423
	Ni^{2+}	0,5	

На основе данных РФА искусственный интеллект также рассчитал параметры решетки и размер кристаллитов оксидов $GdCo_{(1-x)}Ni_xO_3$, результаты представлены в таблице 2. Параметры

решетки монотонно уменьшаются с ростом x из-за меньшего ионного радиуса Ni^{3+} (0.56 Å) по сравнению с Co^{3+} (0.61 Å), а размер кристаллитов снижается из-за увеличения деформаций решетки.

Таблица 2. Значения параметров кристаллической решетки и среднего диаметра кристаллитов для оксидов $GdCo_{(1-x)}Ni_xO_3$

Образец	Размер кристаллитов d, нм	Параметры решетки		
		a, Å	b, Å	c, Å
$GdCoO_{3-\delta}$	30	3,87	5,32	7,72
$GdCo_{0,8}Ni_{0,2}O_{3-\delta}$	27	3,85	5,30	7,70
$GdCo_{0,5}Ni_{0,5}O_{3-\delta}$	24	3,82	5,28	7,65
$GdCo_{0,2}Ni_{0,8}O_{3-\delta}$	22	3,78	5,25	7,60
$GdNiO_{3-\delta}$	20	3,75	5,22	7,55

Результаты каталитических экспериментов (конверсия метана и диоксида углерода и выходы монооксида углерода и водорода) представлены на рисунке 2.

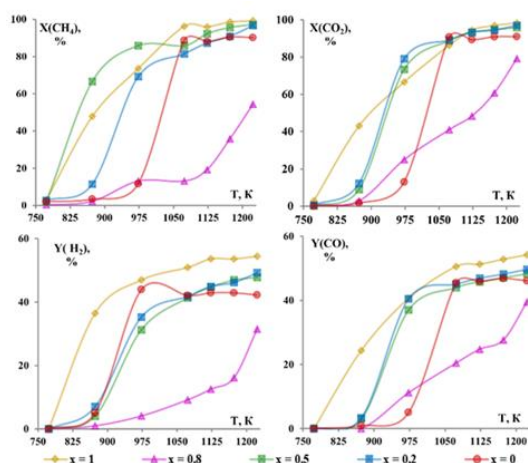
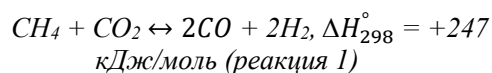


Рис. 2. Конверсии метана и углекислого газа, выходы угарного газа и водорода, образованных в реакции УКМ на исследуемых катализаторах в результате реакции УКМ в присутствии $GdCo_{1-x}Ni_xO_3$

Из полученных данных видно, что при добавлении никеля происходит уменьшение температуры процесса ($\Delta T \sim 200$ K). При дальнейшем повышении температуры катализа наблюдается рост до 99% и выравнивание конверсий всех образцов за исключением $GdCo_{0,2}Ni_{0,8}O_{3-\delta}$. Максимальные конверсии на данном катализаторе достигают около 55% для метана и порядка 80% для углекислого газа. Аналогичная картина наблюдается и для выходов водорода и монооксида углерода. Однако несмотря на высокие конверсии реагентов выходы продуктов не превышают 55%. Предположительно, это связано с параллельным протеканием побочных реакций.

Анализ данных соотношения синтез-газа, представленных в таблице 3, показывает, что наибольшее соотношение H_2/CO имеет «чистый» никеллит – значения приближены к единице. Данный результат согласуется с классическим уравнением УКМ:



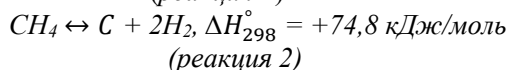
При уменьшении доли никеля в кристаллической решетке наблюдается небольшой спад H_2/CO .

Таблица 3. Значения углеродного баланса и соотношения синтез-газа на оксидах $GdCo_{(1-x)}Ni_xO_3$

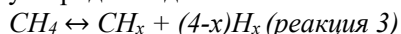
Образец	T = 1123 K			T = 1173 K			T = 1223 K		
	H ₂ / CO	C B*, %	X(CH ₄):X(CO ₂)	H ₂ / CO	C B*, %	X(CH ₄):X(CO ₂)	H ₂ / CO	C B*, %	X(CH ₄):X(CO ₂)
GdCoO ₃	0,8 9	57	0,99	0,8 7	56	0,99	0,8 7	55	0,99
GdCo _{0,8} Ni _{0,2} O ₃	0,9 4	57	0,93	0,9 4	55	0,96	0,9 7	53	1,00
GdCo _{0,5} Ni _{0,5} O ₃	0,9 3	53	0,99	0,9 5	52	1,01	0,9 4	52	1,01
GdCo _{0,2} Ni _{0,8} O ₃	0,4 9	90	0,40	0,5 6	79	0,59	0,7 7	72	0,69
GdNiO ₃	1,0 3	56	1,02	1,0 0	55	1,02	0,9 9	55	1,01

*CB - баланс по углероду

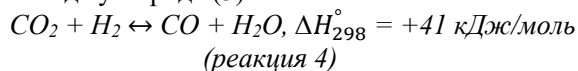
В данной тенденции выделяется $GdCo_{0,2}Ni_{0,8}O_{3-\delta}$, что согласуется с данными по селективности. При повышении температуры наблюдается более резкое изменение данных относительно соотношения синтез-газа, но максимальное значение, полученное в результате катализа, составляет около 80, что согласуется с низким дисбалансом по углероду. Сравнивая конверсии по углекислому газу и метану для данного образца, можно заметить, что конверсия по углекислому газу превышает конверсию по метану (таблица 3). Низкий дисбаланс по углероду обусловлен подавлением побочной реакции – разложение метана (реакция 2):



Известно, что процесс разложения метана может протекать и по альтернативному маршруту: с образованием углеводородов, что может приводить к понижению углеродного дисбаланса:



Аналогичная тенденция с выходом продуктов: значения выхода водорода меньше выхода монооксида углерода, что указывает на протекание побочной реакции – обратной паровой конверсии монооксида углерода (3):



Данная реакция на перовскитоподобных катализаторах преимущественно протекает при 573 – 973 К. Таким образом, с повышением температуры УКМ превалирует над реакцией обратной паровой конверсии монооксида углерода.

Из таблицы видно, что соотношения конверсий практически для всех образцов были равны ~ 1, исключение составил образец с содержанием никеля 0,8, где соотношения $X(CH_4):X(CO_2)$ меньше 1 (~0,6), что говорит о параллельном протекании обратной реакции парового сдвига (реакция 3).

Отметим, что при анализе реакционной смеси были замечены следовые количества углеводородов, суммарное количество которых на оксиде $GdCo_{0,2}Ni_{0,8}O_{3-\delta}$ превосходило значения для всей линейки образцов. Этот факт косвенно подтверждает

то, что на данной системе хемосорбция метана преимущественно протекает с образованием CH_x -радикалов и атомарного водорода (реакция 3).

Выводы

В данной работе синтезированы золь-гель методом при варьировании соотношения металлов в В-положении и охарактеризованы с помощью РФА, ИК-спектроскопии сложные оксиды Gd-Co-Ni. С помощью искусственного интеллекта и методом йодометрического титрования установлено, что все образцы являются анион-дефицитными и увеличение доли никеля в структуре приводит к росту кислородных дефектов. С применением нейросетей проведен расчет параметров решетки, что показало монотонное снижение их значений с введением никеля в структуру. Установлено, что природа В-металла (Ni/Co) практически не оказывает влияния на каталитические характеристики. Наличие кобальта или никеля в структуре сложного оксида приводит к подавлению параллельно протекающей реакции обратной паровой конверсии монооксида углерода.

Список литературы

- Osarieme Uyi Osazuwa, Chin Kui Cheng. Catalytic conversion of methane and carbon dioxide (greenhouse gases) into syngas over samarium-cobalt-trioxides perovskite catalyst. // Journal of Cleaner Production. – 2017.–Vol.– 148 – p. 202–211.
- Старков И.А. Кислородная нестехиометрия и транспортные свойства перовскитоподобного оксида $SrCo_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук 02.00.21 / Старков И.А. – Новосибирск, 2012. – 22 с.
- Крючкова Т.А. Углекислотная конверсия метана на каталитических системах из сложных оксидов со структурой перовскита $A_{n+1}B_nO_{3n+1}$ (A = Gd, Sr, B = Fe, Mn, Co): автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук 02.00.04 / ФГАОУ ВО Российский университет дружбы народов. – Москва, 2019. – 186 с.
- Deka DJ, Gunduz S, Fitzgerald T, Miller JT, Co AC, Ozkan US. Production of syngas with controllable H_2/CO ratio by high temperature coelectrolysis of CO_2

and H₂O over Ni and Co- doped lanthanum strontium ferrite perovskite cathodes. – 2019. – P. 487-503, doi: 10.1016/j.apcatb.2019.02.045

5. Ribeiro, Joenesson Filip Santos, et al. “Effect of Synthesis Method of LaNiO₃ Type Materials with Perovskite Structure on Their Features and in the Methylene Blue Dye Removal from Aqueous Media.” *Scientia Plena*, vol. 16, no. 12. — 2021

6. M. A. Pena, J. L. G. Fierro. Chemical Structures and Performance of Perovskite Oxides // *Chem. Rev.* – 2001. – V. 101, – P. 1981–2017.

7. Vijayaraghavan Thiruvankadam, Ramanathan Sivasubramanian, Shamima Hussain, Anuradha Ashok. A Facile Synthesis of LaFeO₃ -Based Perovskites and Their Application towards Sensing of Neurotransmitters// *ChemistrySelect* –2017– Vol. 2, Issue 20 – P. 5570-5577

8. Windisch C.F., Exarhos G. J., Owings R.R. Vibrational spectroscopic study of the site occupancy

distribution of cations in nickel cobalt oxides // *Journal of Applied Physics.* - 2004. - 15;95(10):5435–42.

9. Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений: Пер с англ. - М.:Мир., 1991. — 118 с.

10. Ремпель А.А., Гусев А.И. Получение и оценка гомогенности сильно нестехиометрических неупорядоченных и упорядоченных карбидов / Ремпель А.А. // *Физика твердого тела.* – 1999. – Т.42, №7. – С. 1243–1249.

11. Fang F. and al. Fabrication of perovskite-type macro/mesoporous La_{1-x}K_xFeO_{3- Σ} nanotubes as an efficient catalyst for soot combustion // *Appl. Catal. B Environ.* Elsevier B.V. – 2018. – Vol. 236, № 2010. – P. 184–194

УДК 004.588, 004.42

Горбунова М.В., Васецкий А.М.

Реализация игры «Лаборатория» на платформе Unity

Горбунова Маргарита Владимировна – студент группы КС-46 кафедры информационных компьютерных технологий; 210334@muctr.ru

Васецкий Алексей Михайлович – старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассматривается процесс разработки обучающей игры «Лаборатория», созданной на базе современной платформы Unity. Представлены основные этапы реализации интерактивных элементов, описаны механики мини-игр, направленных на формирование интереса к естественным наукам, развитие внимательности и усвоение правил безопасного поведения в лаборатории.

Ключевые слова: игрофикация, образовательная игра, химические опыты, виртуальная лаборатория, интерактивное обучение, Unity

Implementation of the game «Laboratory» on the Unity platform

Gorbunova M.V., Vasetsky A.M.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the development process of the educational game “Laboratory”, created using the modern Unity platform. The main stages of implementing interactive elements are presented, along with the mechanics of mini-games aimed at fostering interest in natural sciences, developing attention skills, and reinforcing safe laboratory practices.

Key words: gamification, educational game, chemical experiments, virtual laboratory, interactive learning, Unity

Введение

Развитие цифровых технологий и внедрение интерактивных решений в образовательный процесс открывают широкие возможности для формирования новых форм подачи материала. Одной из таких форм является игрофикация – применение игровых элементов в неигровом контексте [1]. Особенно актуальна игрофикация в условиях дистанционного и смешанного обучения, а также в работе с абитуриентами, которым важно предложить современный и увлекательный способ знакомства с выбранной профессией.

Виртуальные лаборатории являются одним из наиболее перспективных направлений цифровизации образования. Они позволяют проводить моделирование химических и физических процессов без риска для здоровья, при этом обеспечивая высокий уровень наглядности [2, 3].

Выбор платформы Unity обусловлен её широкой функциональностью, удобством визуального редактирования сцен и поддержкой кроссплатформенной сборки [4]. Кроме того, Unity позволяет эффективно сочетать графические и интерактивные элементы, что делает её оптимальной средой разработки для реализации образовательных проектов. Сцена «Лаборатория», разработанная в рамках выпускной квалификационной работы, представляет собой часть игры, направленной на привлечение абитуриентов. Основной акцент сделан на визуализацию лабораторной деятельности, обучение правилам техники безопасности и развитие интереса к химии и науке.

Материалы и методы разработки

Разработка сцены «Лаборатория» проходила на игровом движке Unity с использованием языка

программирования C#. Для визуализации применялся пакет инструментов Universal Render Pipeline (URP), обеспечивающий оптимальный баланс между производительностью и качеством изображения.

Система перемещения реализована с использованием компонента Character Controller, который позволяет игроку свободно передвигаться по лаборатории.

Анимации химических реакций созданы вручную из последовательностей спрайтов и с помощью системы Particle System. Управление анимацией осуществляется через Animator Controller и событийные триггеры, активируемые по нажатию кнопок и таймеру.

Для реализации пользовательского интерфейса применялись компоненты Canvas System и UI Toolkit, обеспечивающие адаптацию под различное разрешение экрана.

Модели лабораторного оборудования создавались как вручную (на базе стандартных объектов и материалов Unity), так и с помощью импортированных ассетов из открытых источников (Sketchfab, Free3D). Все сторонние модели подвергались оптимизации: снижалось количество полигонов, менялись текстуры, убрались лишние коллайдеры.

Звуковое сопровождение выполнено с применением встроенного аудиомикшера Unity.

Описание сцены «Лаборатория»

Игровая сцена «Лаборатория» моделирует учебное помещение с соответствующей обстановкой: лабораторные столы, стеллажи с пробирками, микроскоп, вешалка с халатом, плакаты по технике безопасности. Декоративное оформление выполнено

в фирменных цветах вуза, что придаёт сцене узнаваемость и идентичность.

Общий вид сцены в редакторе Unity представлен на рис. 1.



Рис. 1. Обстановка 3D-лаборатории.

Ключевые объекты сцены:

- Вешалка с халатом и очками – интерактивный элемент. При наведении курсора на него появляется подсказка, при клике – проигрывается анимация надевания.
- Стол с колбой – точка запуска мини-игры «Химические опыты».
- Микроскоп – точка запуска мини-игры «Укажи нужное».
- Статичные объекты – мебель, техника, настенные постеры создают реалистичную атмосферу, но не подлежат взаимодействию.

Игровая логика построена на флагах состояния, контролируемых через GameStateManager. Допуск (isReady) обновляется после выполнения обязательного действия – надевания средств индивидуальной защиты. До этого момента перемещение и все мини-игры недоступны.

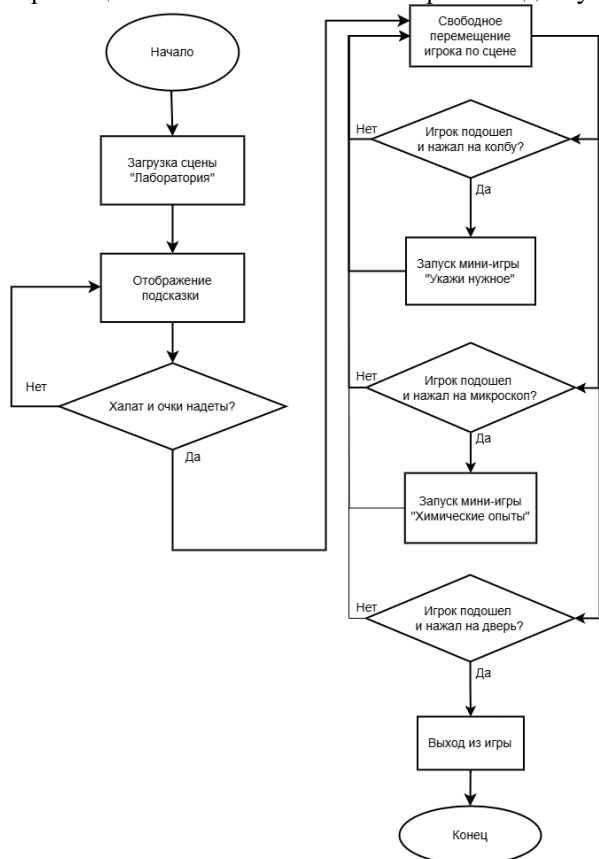


Рис.2. Блок-схема игры.

При попытке досрочного запуска появляется предупреждающее сообщение. Алгоритм поведения игрока в сцене представлен на Рис. 2.

Мини-игра «Химические опыты»

Мини-игра «Химические опыты» предназначена для освоения простейших химических реакций. Она активируется при взаимодействии с лабораторной колбой на столе в основной сцене. После запуска игроку предлагается выбрать один из трёх опытов: «Вулкан», «Фараонова змея» или «Лавовая лампа». Каждый опыт представляет собой пошаговую последовательность действий с визуальной и звуковой обратной связью.

Опыт 1. «Вулкан»

Цель: Демонстрация кислотно-щелочной реакции с бурным выделением газа и пенообразованием.

Описание: Игроку предлагается провести известный школьный опыт, моделирующий извержение вулкана. В интерфейсе (рис. 3) отображаются компоненты: сода, уксус, жидкое мыло и краситель. Игрок поочерёдно перетаскивает их в колбу (реализовано с помощью drag-and-drop системы). После запуска начинается реакция: из горлышка колбы стремительно вырывается окрашенная пена, сопровождаемая звуками бурления.

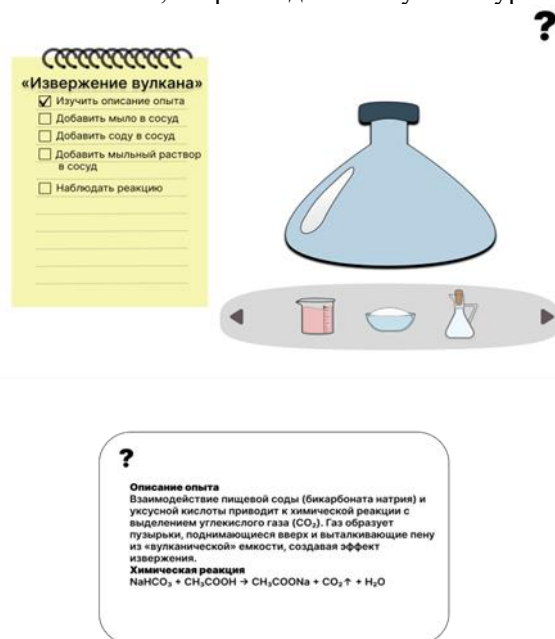
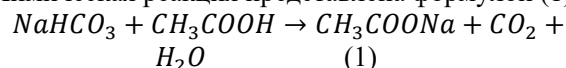


Рис. 3. Визуализация опыта «Вулкан».

Алгоритм опыта:

1. Выбор опыта из меню.
2. Изучение описания опыта.
3. Последовательное добавление компонентов.
4. Активация реакции – триггер запуска Animator Controller и звукового эффекта.
5. Демонстрация вспенивания.
6. Кнопка «Повторить» или возврат в лабораторию.

Химическая реакция представлена формулой (1).



В реакции (1) CO_2 – это углекислый газ, выделяющийся в процессе реакции и создающий эффект «вулканического» извержения.

Мыло не участвует в реакции, но способствует удержанию CO_2 в пузырьках, многократно усиливая объём пены.

Опыт 2. «Фараонова змея»

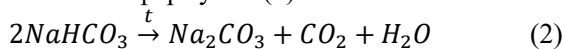
Цель: Демонстрация экзотермической реакции разложения с образованием пористой углеродистой массы и выделением газа.

Описание: Этот опыт демонстрирует, как при нагревании смеси сахара (сахарозы) и пищевой соды ($NaHCO_3$) происходит тепловая реакция, сопровождающаяся вспучиванием массы, напоминающей извивающуюся змею.

Алгоритм опыта:

1. Выбор опыта из меню.
2. Изучение описания опыта.
3. Перетаскивание компонентов в жаропрочную чашу.
4. Нажатие кнопки «Нагреть» – активация анимации. Тёмный углеродный столб медленно вытягивается вверх. Реакция сопровождается выделением дыма и искр, а также шипящим звуком.

При нагревании сахар начинает карамелизоваться и частично разлагаться с выделением углерода, в то время как сода разлагается с выделением газа. Этот процесс описан формулой (2).



CO_2 и H_2O в виде пара расширяют нагретую массу, создавая «змею». Сам сахар подвергается сложной термической деструкции, образуя пористый углерод.

Образование пористой массы происходит за счет выделения углекислого газа и водяного пара, которые «вспучивают» расплавленный сахар.

В игре это реализовано путём создания анимированного объекта SnakeEmitter, который вытягивается и извивается с эффектом дыма.

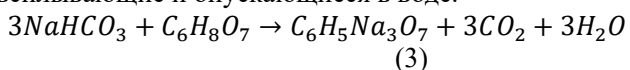
Опыт 3. «Лавовая лампа»

Цель: Наглядное представление различий в плотности жидкостей и образования газовых пузырьков при химической реакции.

Описание: Опыт основан не столько на химической реакции, сколько на физике и визуальных эффектах. Игрок добавляет в колбу воду, растительное масло, пищевой краситель и шипучую таблетку. После этого в жидкости образуются пузырьки газа, которые поднимаются вверх, захватывая окрашенные капли воды и создавая эффект движущихся пузырей, аналогичный работе настоящей лавовой лампы.

Алгоритм опыта:

1. Выбор опыта из меню.
2. Изучение описания опыта.
3. Добавление воды, масла и красителя.
4. Добавление шипучей таблетки (описано реакцией (3)) – начинается реакция с выделением пузырьков CO_2 .
5. Активация эффектов: движущиеся пузыри, всплывающие и опускающиеся в воде.



Физическое явление:

– CO_2 поднимается вверх, увлекая за собой капли воды.

– По мере выхода газа капли опускаются.

Реализация визуальных эффектов в опыте «Лавовая лампа» представлена на рис. 4.

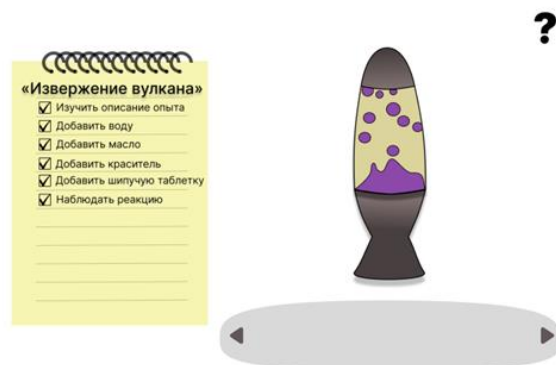


Рис. 4. Визуализация опыта «Лавовая лампа».

Алгоритм каждого опыта представлен в виде чек-листа. После завершения эксперимента игрок может выбрать другой или вернуться в лабораторию.

Мини-игра «Укажи нужное»

Данная мини-игра направлена на развитие внимательности и закрепление базовых знаний по химии и биологии. Игровая механика строится на распознавании изображений и выборе правильного объекта в соответствии с заданием.

Игровой процесс:

При запуске мини-игры пользователю предлагается пройти серию из пяти раундов. На каждом этапе на экране появляются десять изображений, расположенных в случайном порядке. В нижней части интерфейса находится текстовое задание, например: «Найди: колбу Эрленмейера».

Игроку необходимо кликнуть по изображению, которое, по его мнению, соответствует заданию. В случае правильного выбора картинка подсвечивается зелёным цветом, и через короткую паузу загружается следующий раунд. При ошибочном выборе – красным, после чего игроку предоставляется возможность попробовать снова.

Для игрового процесса были отобраны следующие изображения, охватывающие как биологические, так и химические объекты:

- Эритроцит – красное кровяное тельце округлой формы с центральным вдавлением;
- ДНК – двойная спираль, характерная структура нуклеиновой кислоты;
- Медный купорос – кристалл ярко-синего цвета;
- Бюретка – измерительный стеклянный прибор с градуировкой и краном;
- Молекула воды – классическое изображение молекулы с двумя атомами водорода и одним – кислорода;
- Колба Бунзена – плоскодонная коническая колба с отводом;
- Колба Эрленмейера – коническая колба с широким основанием и узким горлом;
- Этанол – шаростержневая модель C_2H_5OH ;

– Перманганат калия – фиолетовый порошок.

Пример одного из этапов мини-игры «Укажи нужное» приведён на рис. 5.



Рис. 5. Визуализация мини-игры «Укажи нужное».

Мини-игра реализована в Unity с использованием системы Canvas UI. Изображения размещаются в сетке с помощью компонента Grid Layout Group. Выбор игрока обрабатывается через события OnClick, а проверка осуществляется в скрипте QuizManager. Подсветка правильных и неправильных ответов реализована с помощью анимации изменения цвета (ColorAnswer).

Переход между раундами осуществляется автоматически после успешного выбора, а по окончании серии игроку предлагается повторить игру или вернуться в основную сцену. Для увеличения информативности после каждого верного ответа реализовано всплывающее окно с кратким пояснением по выбранному объекту (например, «Эритроциты – клетки крови, переносящие кислород»).

Игра способствует не только тренировке визуального восприятия, но и закреплению теоретических знаний в игровой форме. Использование изображений лабораторного оборудования и веществ расширяет кругозор учащихся и формирует устойчивые ассоциации между объектами и их функциями или химическими свойствами. Таким образом, мини-игра «Укажи нужное» представляет собой эффективный инструмент для визуального запоминания и активного вовлечения в образовательный процесс.

Заключение

Создание сцены «Лаборатория» на платформе Unity показало, как игровые технологии могут успешно применяться в образовательной среде. Благодаря интерактивному подходу, визуальной выразительности и акценту на технику безопасности проект позволяет не только заинтересовать пользователя, но и закрепить базовые знания по химии и биологии.

Мини-игры «Химические опыты» и «Укажи нужное» органично вписаны в игровое пространство, дополняют основную сцену и развивают важные навыки, такие как соблюдение лабораторных правил и внимательность, а также формируют знание базовых химических терминов. Подобная игрофицированная подача делает обучение увлекательным и эффективным, особенно в рамках профориентации и дополнительного образования.

Проект обладает потенциалом для расширения за счёт новых заданий, рейтингов и адаптации под другие научные дисциплины. Таким образом, разработанная сцена не только выполняет развлекательную функцию, но и служит примером того, как современное программное обеспечение может содействовать обучению через игру.

Список литературы

1. Капустина Л. В., Черпакова Н. А. Методы геймификации в образовании // Молодой учёный. – 2023. – № 47 (494). – С. 162–165.
2. Тунгушбек М. Б., Курмет А. К. Применение игровых технологий в преподавании химии: виды химических игр и методические рекомендации // Молодой учёный. – 2024. – № 34 (533). – С. 155–158.
3. Наговицын С. С., Шамшуринов М. А., Смирнов С. В. Виртуальные лабораторные на основе системы Unity // Цифровизация инженерного образования: сборник материалов международной онлайн-конференции. – 2021. – С. 241–246.
4. Шестаков Е. И., Пирматов А. З., Жолдошов Т. М. Применение Unity 3D для развития профессиональных навыков // Вестник Ошского государственного университета. – 2024. – № 2. – С. 369–383.

УДК 65.01

Ефимова А.М., Рублева С.А., Зверева О.В., Аверина Ю.М.

Критерии оценки инновационного проекта в химической промышленности

Ефимова Анастасия Максимовна – студент группы ТМ-39 кафедры логистики и экономической информатики; Рублева Софья Алексеевна – преподаватель кафедры логистики и экономической информатики; Зверева Ольга Владимировна – преподаватель кафедры логистики и экономической информатики; Аверина Юлия Михайловна – заведующий кафедрой логистики и экономической информатики.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены ключевые критерии оценки эффективности инновационного проекта, систематизированы выявленные показатели по группам относительно основных параметров оценки: экономической целесообразности, технологической осуществимости и рыночной перспективности. Особое внимание уделено анализу взаимосвязей между этими параметрами, что позволяет проводить как комплексную оценку проекта с учётом созависимых факторов, так и детальный анализ каждого критерия в отдельности. Результаты исследования могут быть полезны при принятии управленческих решений в сфере инновационного менеджмента в химической промышленности.

Ключевые слова: инновационный проект, критерии оценки

Criteria for evaluating an innovation project in the chemical industry

Efimova A.M., Rubleva S.A., Zvereva O.V., Averina Yu.M.

D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, 9 Miusskaya Square, Moscow, 125047, Russia

The article considers the key criteria for assessing the effectiveness of an innovation project, systematises the identified indicators into groups with respect to the main evaluation parameters: economic feasibility, technological feasibility and market prospects. Particular attention is paid to the analysis of interrelationships between these parameters, which makes it possible to conduct both a comprehensive assessment of the project taking into account co-dependent factors, and a detailed analysis of each criterion separately. The results of the study can be useful in making managerial decisions in the field of innovation management in the chemical industry.

Key words: innovative project, evaluation criteria

Введение

Правильная оценка инновационного проекта является одним из этапов его реализации. Она позволяет определить жизнеспособность, перспективность и потенциальную эффективность проекта. Этот процесс необходим как для заказчиков, так и для разработчиков, чтобы оценить уровень рисков и рентабельность проекта. Для этого применяются различные параметры, критерии и показатели, обеспечивающие комплексный анализ.

Определены три основные группы критериев: технологические, экономические (финансовые), социальные параметры. Экологические параметры, которые тоже можно было бы объединить в группу, распределены равномерно среди трех выбранных основных. Так, экологическая безопасность технологии производства, финансовые затраты на снижение выбросов и сбросов, а также безопасность внутренней и внешней среды производства – учтены.

Одним из ключевых аспектов оценки инновационного проекта являются технологические параметры. Они включают степень новизны и уникальности технологии, ее реализуемость и адаптацию к существующей ситуации на рынке. Важно оценить, насколько разработка соответствует современным научным стандартам и насколько легко ее можно внедрить в производство. Кроме того, необходимо учитывать доступность необходимых ресурсов, включая комплектующие, материалы и производственные мощности [1].

Финансовые параметры определяют экономическую обоснованность проекта. В первую очередь, анализируются объем необходимых инвестиций, возможные источники финансирования и ожидаемая рентабельность. Рассматриваются такие показатели, как срок окупаемости и потенциальные финансовые потоки, а также уровень финансовой устойчивости компании-разработчика. Без четкого понимания экономической целесообразности проекта инвесторы вряд ли согласятся на его поддержку.

Экономические параметры оценивают перспективы выхода на рынок и уровень спроса на продукт. В этом контексте анализируются конкуренция, рыночные барьеры, динамика потребительских предпочтений и возможные каналы дистрибуции. Одним из важных факторов является емкость рынка и его потенциал роста, а также вероятность международного масштабирования. Проект, ориентированный на растущий и высококонкурентный рынок, требует более глубокой стратегии.

Социальные параметры включают в себя структуру управления проектом, уровень подготовки и компетентность команды, а также механизмы масштабирования бизнеса. Здесь важную роль играет эффективность выбранной бизнес-модели и способность адаптироваться к изменениям внешней среды. Гибкость в управлении и стратегическом планировании повышает шансы на успешное развитие инновационного продукта [2].

Социальные и экологические параметры становятся все более значимыми в современной экономике. Оценка воздействия на окружающую среду, включая уровень вредных выбросов, потребление природных ресурсов и соответствие экологическим нормам, не менее важные факторы при реализации работы. Проекты, способствующие устойчивому развитию, все чаще получают дополнительную поддержку со стороны государства и общественных организаций.

Актуальность проекта определяется его соответствием текущим технологическим и рыночным трендам. Важно, чтобы разработка отвечала потребностям рынка и предлагала решения, востребованные целевой аудиторией. Даже если технология инновационна, но не имеет реального спроса, ее коммерческий успех остается под вопросом [3].

Эффективность инновационного проекта оценивается через баланс затрат и ожидаемой прибыли. Оптимальное соотношение вложенных ресурсов и потенциальной выгоды является одним из ключевых факторов успешной реализации проекта. Чем выше рентабельность, тем привлекательнее проект.

Реализуемость инновационного решения определяется наличием необходимых ресурсов, производственных мощностей и организационной структуры. Даже перспективные идеи могут столкнуться с серьезными барьерами, связанными с технологическими ограничениями или недостатком квалифицированных специалистов. Риски играют важную роль в оценке перспектив инновационного проекта. Финансовые, рыночные, юридические и технические угрозы могут серьезно повлиять на успех разработки. Анализ рисков позволяет заранее предусмотреть возможные проблемы и подготовить стратегии их минимизации.

Гибкость проекта означает его способность адаптироваться к изменяющимся условиям рынка и экономической среды. В условиях быстро развивающихся технологий важно учитывать

возможность модернизации продукта и его дальнейшего усовершенствования [4].

Потенциал коммерциализации определяет, насколько легко проект может выйти на рынок и стать прибыльным. Оценивается готовность потребителей к использованию продукта, конкурентные преимущества и эффективность маркетинговой стратегии.

Финансовые показатели включают такие метрики, как чистая приведенная стоимость (NPV), срок окупаемости (PP), рентабельность инвестиций (ROI), которые рассчитываются по следующим формулам (1-3):

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{P_t}{(1+i)^t} - IC, \quad (1)$$

$$PP = \frac{I_0}{P}, \quad (2)$$

$$ROI = \frac{\text{Доход} - \text{Расход}}{\text{Расход}} \times 100\%, \quad (3)$$

где n – чистая приведенная стоимость,

P_t – чистый денежный поток за период t ,

i – ставка дисконтирования,

IC – период, за который учитывается денежный поток,

I_0 – первоначальные инвестиции,

P – чистый годовой поток денежных средств от реализации ИП.

Технические показатели оценивают уровень технологической зрелости, надежность разрабатываемого решения, количество запатентованных технологий и возможность дальнейшего совершенствования продукта. Чем выше уровень технической зрелости, тем больше шансов на успешное внедрение.

Экономические показатели включают анализ конкурентных преимуществ, доли рынка, прогнозируемого объема продаж, стоимости привлечения клиентов и их пожизненной ценности. Эти показатели помогают спрогнозировать коммерческий успех проекта и определить его стратегию продвижения.

Таблица 1. Группировка параметров

Социальные	• Целевая аудитория • Конкуренты • Количество пользователей и их активность	• Востребованность • Потребность и желание
Экономические	• NPV, PP, ROI • Кол-во клиентов и их удержание • Точка безубыточности • Увеличение доли сегмента рынка • Риски	• Объем необходимых инвестиций • Источники финансирования • Рентабельность • Окупаемость
Технологические	• Уровень технологической зрелости • Возможность совершенствования • Функциональность	• Уникальность • Степень новизны
Другое	• Компетентность команды • Механизмы масштабирования бизнеса	• Структуру управления проектом

Комплексный анализ инновационного проекта на основе технологических, экономических, социальных

и экологических параметров позволяет получить объективное представление о его перспективности.

Применение детализированных критериев и показателей помогает инвесторам и разработчикам принимать взвешенные решения, минимизировать риски и повышать шансы на успешную коммерциализацию инновации. Грамотный подход к оценке проекта способствует его успешному внедрению и развитию, увеличивая вероятность его долгосрочного успеха на рынке.

Эти параметры помогают определить уровень доходности проекта и его инвестиционную привлекательность [5]. В отличие от традиционных методик, предлагаемый метод позволяет не только проводить автономный анализ каждого критерия, но и оценивать их взаимное влияние в рамках единой системы. Такой подход обеспечивает более гибкую и точную оценку проектов. Математическое моделирование и алгоритмизация данного метода возможны, что открывает перспективы для его автоматизации и применения в системах поддержки принятия решений. Результаты исследования могут быть использованы для повышения объективности оценки инновационных проектов, минимизации рисков и оптимизации управленческих процессов в сфере инновационного менеджмента.

Список литературы

1. Горохова А. Е. Оценка инноваций: экономическое содержание и методическое обеспечение // Известия МГТУ. 2013. №1 (15). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/otsenka-innovatsiy-ekonomicheskoe-soderzhanie-i-metodicheskoe-obespechenie> . (дата обращения. 25.05.2025)
2. Максименко Людмила Сергеевна, Поповиченко Марк Андреевич, Година Ольга

Викторовна «О разработке инструментов анализа и оценки инновационных проектов» // Индустриальная экономика. 2023. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/o-razrabotke-instrumentov-analiza-i-otsenki-innovatsionnyh-proektov> (дата обращения. 25.05.2025).

3. Третьякова Л. А., Лаврикова Н. И., Азарова Н. А. «Особенности оценки инновационных рисков с позиции их технико-экономических индикаторов в отраслевых системах» // Организатор производства. 2023. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/osobennosti-otsenki-innovatsionnyh-riskov-s-pozitsii-ih-tehniko-ekonomicheskikh-indikatorov-v-otraslevykh-sistemah> (дата обращения. 25.05.2025).

4. Демидова, Е. В. Анализ процесса реализации и оценка фактической эффективности инвестиционных проектов / Е. В. Демидова // Современные проблемы лингвистики и методики преподавания русского языка в ВУЗе и школе. – 2022. – № 38. – С. 772-777. – EDN BYFIMW(дата обращения. 25.05.2025) .

5. Николенко Татьяна Юрьевна, Тарасова Елена Владимировна Система сбалансированных показателей и инструментарий оценки эффективности инновационных проектов // π-Economy. 2016. №6 (256). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/sistema-sbalansirovannyh-pokazateley-i-instrumentariy-otsenki-effektivnosti-innovatsionnyh-proektov> (дата обращения. 25.05.2025).

УДК 543.544.5.068.7

Карченкова А.И., Уварова А.А., Гордиенко М.Г.

Разработка методики количественного определения молнупиравира и её предвалидация

Карченкова Алина Игоревна – студентка группы К-47; almanul81@gmail.com.

Уварова Анастасия Анатольевна – ассистент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, uvarova.a.a@muctr.ru;

Гордиенко Мария Геннадьевна – д.т.н, профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, gordienko.m.g@muctr.ru;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены принцип действия молнупиравира, методика количественного определения молнупиравира методом высокоэффективной жидкостной хроматографии и определение основных валидационных характеристик разработанной методики, а именно специфичность, линейность, воспроизводимость и предел количественного обнаружения, с помощью статистической обработки данных. Ключевые слова: молнупиравир, предвалидация, методика количественного определения, ВЭЖХ, статистическая обработка данных

Development of a method for quantitative determination of molnupiravir and its validation

Karchenkova A.I., Uvarova A.A., Gordienko M.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the principle of action of molnupiravir, the method of quantitative determination of molnupiravir by high-performance liquid chromatography and the determination of the main validation characteristics of the developed technique, namely specificity, linearity, reproducibility and limit of quantitative detection, using statistical data processing.

Keywords: molnupiravir, validation, quantitative determination technique, HPLC, statistical data processing

Введение

Коронавирусная инфекция (COVID-19) – острое инфекционное заболевание, вызываемое вирусом SARS-CoV-2, которое представляет серьезную опасность для здоровья. Известно, что появление новых разновидностей коронавируса SARS-CoV-2 увеличивает заболеваемость COVID-19 [1]. В настоящее время согласно версии № 17 временных методических рекомендаций Министерства здравоохранения Российской Федерации по профилактике, диагностике и лечению новой коронавирусной инфекции для терапии COVID-19 рекомендуется назначать такие противовирусные препараты, как молнупиравир (рис. 1) и фавипиравир [2].

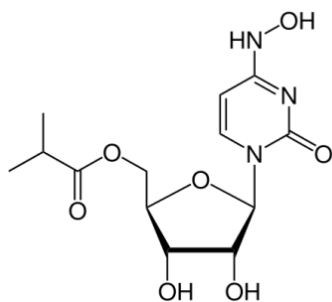


Рис. 1. Химическая структура молнупиравира

Молнупиравир – противовирусный препарат с анти-РНК-полимеразной активностью. Молнупиравир представляет собой пролекарство, которое в организме подвергается метаболической активации. Под действием ферментов плазмы крови он сначала превращается в β-D-N4-гидроксицитидин (NHC) – аналог рибонуклеозида. Далее этот метаболит фосфорилируется клеточными киназами до активной формы – рибонуклеозидтрифосфата.

Именно это соединение проявляет противовирусную активность, встраиваясь в вирусную РНК вместо естественных нуклеотидов, вызывая накопление мутаций и подавление вирусной репликации [3].

В исследовании [4] была разработана методика для количественного определения молнупиравира в его чистой форме и таблетированных лекарственных формах с использованием метода обратной фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. Метод показал высокую степень линейности в диапазоне концентраций 20–100 мкг/мл; значения ОСО (относительное стандартное отклонение) для повторяемости и промежуточной прецизионности составили менее 0.5%, что указывает на высокую точность метода. Низкие пределы обнаружения и количественного определения делают метод пригодным для анализа малых количеств молнупиравира. В связи с этим было принято решение использовать эту методику в данной работе и при дальнейшей фармацевтической разработке ингаляционной формы молнупиравира.

Актуальность разработки ингаляционной формы молнупиравира обусловлена необходимостью эффективной терапии острых повреждений легких и респираторного дистресс-синдрома, которые развиваются при тяжелых формах COVID-19. Ингаляционный путь введения позволяет достичь высокой локальной концентрации препарата непосредственно в очаге поражения, минуя системный кровоток и минимизируя побочные эффекты, характерные для перорального приема (желудочно-кишечные нарушения, снижение биодоступности при приеме с пищей). Физиологические особенности легких, включая обширную площадь альвеолярной поверхности и

минимальную толщину альвеолярно-капиллярного барьера, обеспечивают быстрое поступление действующего вещества в системный кровоток и начало терапевтического действия. Разработка ингаляционного сухого порошка представляется перспективным направлением, поскольку позволяет снизить терапевтическую дозу, избежать эффекта первого прохождения и сохранить фармакологическую активность молнупиравира, что является значимыми факторами в условиях появления новых штаммов SARS-CoV-2.

Целью данной работы является разработка методики количественного определения молнупиравира методом ВЭЖХ и проведение ее предвалидации.

Экспериментальная часть

Анализ проводился с использованием метода высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) на приборе Agilent 1220 (рис. 2).

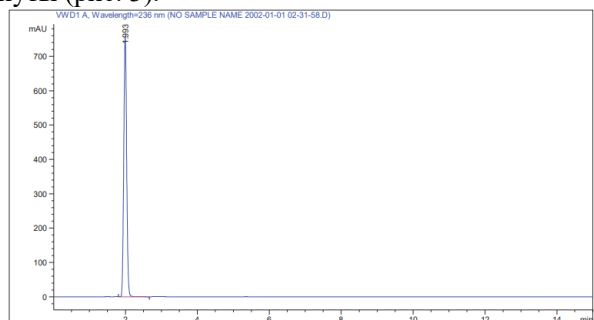


Рис. 2. ВЭЖХ система Agilent 1220

Изократическая ВЭЖХ система Agilent 1220 состоит из детектора с переменной длиной волны 1220 Infinity II LC Variable Wavelength Detector, автосамплера 1220 Infinity II LC Autosampler, бинарного насоса 1220 Infinity II LC Pump.

Для приготовления подвижной фазы использовались дигидрофосфат калия, ультрачистая вода и метанол. Навеску дигидрофосфата калия массой 3,40 грамма растворяли в 500 мл воды. Значение pH, равное 4,2, достигали путем добавления фосфорной кислоты. Далее 325 мл приготовленного фосфатного буфера смешивали со 175 мл метанола и фильтровали через фильтр с диаметром пор 0,4 мкм с помощью насоса. Для дегазации раствор обрабатывали в ультразвуковой ванне в течение 30 минут.

В работе использовалась колонка Eclipse Plus C18, 5 мкм, 4,6 на 150 мм. Параметры анализа: скорость потока достигала 1 мл/мин; объем закола составил 10 мкл; длина волны детектирования была равна 236 нм; время удерживания молнупиравира составляло 2 минуты (рис. 3).



Рису. 3. Хроматограмма молнупиравира с концентрацией 0,125 мг/мл

Методом разбавления были получены 5 растворов молнупиравира с концентрациями 0,5 мг/мл; 0,25 мг/мл; 0,125 мг/мл; 0,0625 мг/мл; 0,03125 мг/мл. Анализ каждого раствора производили по 3 повтора.

Расчетная часть

Валидация методики – обязательный этап, подтверждающий её пригодность для заявленных целей. В данной работе она включала оценку параметров: специфичность, линейность, правильность и воспроизводимость, предел количественного определения.

Задача специфичности – экспериментальное подтверждение того, что присутствие сопутствующих компонентов не влияет на конечный результат анализа. На основе литературного обзора были подобраны следующие вспомогательные вещества для разработки прототипов сухого порошка для ингаляций: гидроксипропилметилцеллюлоза, поллоксамер 188, поллоксамер 407, растворитель – метанол/вода. Поэтому были подготовлены и проанализированы растворы чистых вспомогательных веществ. По результатам анализа можно отметить, что на хроматограммах растворителя и поллоксамера 188 не имеется пиков, время удерживания поллоксамера 407 и гидроксипропилметилцеллюлоза является 1,5 минуты. Исходя из того, что время удерживания молнупиравира 2 минуты (рис. 3), пики вспомогательных веществ не пересекаются. Таким образом, методика специфична.

Задача линейности – оценить способность методики «количественное определение вещества» выражать пропорциональную зависимость между найденными результатами и концентрацией анализируемого вещества в пробе. По зависимости площади от концентрации раствора была построена калибровочная кривая (рис. 4).

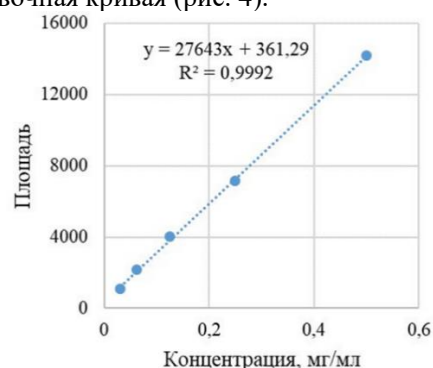


Рис. 4. Калибровочная кривая результатов ВЭЖХ растворов молнупиравира

Калибровочная кривая, построенная для диапазона концентраций 0,03125 – 0,5 мг/мл, продемонстрировала высокую линейную зависимость с коэффициентом детерминации $R^2 = 0,9992$. Это подтверждает отсутствие систематических отклонений.

По результатам ВЭЖХ была проведена предвалидация методики. Результаты анализа модельных смесей сведены в таблице 1.

Таблица 1 Результаты анализа модельных смесей для критерия линейность

Модельный раствор	Аналитический сигнал вещества A_i	Введенное количество аналита C_i , мг/мл	$Y_i = \frac{A_i}{A_{st}} \cdot 100\%$	$X_i = \frac{C_i}{C_{st}} \cdot 100\%$
1	14202	0,505	336,94	404,0
	14540	0,505	344,96	404,0
	14560	0,505	345,43	404,0
2	7135	0,256	169,28	204,8
	7284	0,256	172,81	204,8
	7301	0,256	173,21	204,8
3	4021	0,126	95,39	100,8
	4197	0,126	99,57	100,8
	4205	0,126	99,76	100,8
4	2151	0,062	51,03	49,2
	2239	0,062	53,12	49,2
	2278	0,062	54,05	49,2
5	1077	0,031	25,55	24,9
	1121	0,031	26,60	24,9
	1121	0,031	26,67	24,9

где C_i – концентрация молнупиравира в i -ом анализируемом растворе, C_{st} – это концентрация молнупиравира в растворе сравнения, A_i – площадь пика молнупиравира для i -ого анализируемого раствора, A_{st} – это площадь молнупиравира в растворе сравнения. За стандарт был принят раствор молнупиравира с концентрацией 0,125 мг/мл и площадью 4215.

Были рассчитаны величины a , b , r – свободный член регрессионной прямой (формула 1), угол наклона для регрессионной прямой (формула 2) и коэффициент корреляции (формула 3) соответственно:

$$a = \frac{\sum Y_i \cdot \sum X_i^2 - \sum X_i \sum (X_i \cdot Y_i)}{n \cdot \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} = 9,79 \quad (1)$$

$$b = \frac{n \cdot \sum (X_i \cdot Y_i) - \sum Y_i \cdot \sum X_i}{n \cdot \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} = 0,82 \quad (2)$$

$$r = \frac{n \cdot \sum (X_i \cdot Y_i) - \sum Y_i \cdot \sum X_i}{\sqrt{(n \cdot \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2) \cdot (n \cdot \sum Y_i^2 - (\sum Y_i)^2)}} = 0,99 \quad (3)$$

где n – объём выборки.

Согласно критерию статистической незначимости, свободный член a должен не превышать доверительный интервал Δ_a (формула 4).

$$|a| \leq \Delta_a = t(95\%, n-2) \cdot S_a \quad (4)$$

где S_a – стандартное отклонение для отрезка, который отсекается на оси ординат, t – коэффициент Стьюдента для одностороннего распределения. При доверительной вероятности 0,95 и при числе степеней свободы $f = n - 2 = 13$ табличный коэффициент Стьюдента равен 2,16.

Стандартное отклонение отрезка, отсекаемого на оси ординат, было определено по формулам (5-7):

$$S_a = S_b \cdot \sqrt{\frac{\sum X_i^2}{n}} = 47,56 \quad (5)$$

$$S_b = \sqrt{\frac{n \cdot S_0^2}{n \cdot \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}} = 0,23 \quad (6)$$

$$S_0 = \sqrt{\frac{\sum Y_i^2 - \frac{(\sum Y_i)^2}{n} - \frac{(\sum (X_i \cdot Y_i) - \frac{\sum X_i \cdot \sum Y_i}{n})^2}{n \cdot \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}}{n-2}} = 121,81 \quad (7)$$

По формуле 4 получено, что доверительный интервал составляет 102,72. Значит, свободный член a статистически значимо отличается от нуля ($19,79 \leq 102,72$), критерий статистической незначимости выполняется. Исходя из вышесказанного можно сделать вывод, методика линейна и соответствует требованиям ОФС.1.1.0012.15 «Валидация аналитических методик» Государственной фармакопеи РФ XV издания [5].

Правильность и воспроизводимость методики проводилась методом «введено-найдено». Правильность методики характеризуется отклонением среднего результата определений, выполненных с ее использованием, от значения, принимаемого за истинное. Для определения правильности методики было проведено по три повтора детектирования растворов исследуемых концентраций. Правильность выражается в виде степени извлечения (открываемости) Z_i известного количества аналита (формула 8):

$$Z_i = \frac{Y_i}{X_i} \cdot 100\%, \quad (8)$$

где X_i – введено аналита, Y_i – найдено аналита.

Средняя степень извлечения $\bar{Z}$ – это статистический показатель, отражающий средний процент восстановления аналита из образца на всех исследованных концентрациях. Рассчитывается как среднее арифметическое индивидуальных степеней извлечения Z_i . По результатам расчетов $\bar{Z} = 103,18$. Такое значение проходит по условиям к методике ВЭЖХ, так как минимальные требования находятся в диапазоне 95-105 [5].

Важным параметром оценки правильности и воспроизводимости является критерий статистической незначимости (9). Согласно данному

критерию, систематическая погрешность статистически незначима, если отклонение $\bar{Z}$ не превышает свой доверительный интервал:

$$\delta\% = |\bar{Z} - 100| \leq \frac{\Delta_Z}{\sqrt{n}} \quad (9)$$

Односторонний доверительный интервал рассчитывался по формуле (10):

$$\Delta_Z = S_Z(\%) \cdot t(95\%, n - 1) \quad (10)$$

где t — коэффициент Стьюдента для одностороннего распределения. При доверительной вероятности 0,95 и при числе степеней свободы $f = n - 1 = 2$ табличный коэффициент Стьюдента равен 4,3.

Стандартное отклонение S_Z (формула 12) является важнейшим статистическим показателем, характеризующим разброс значений извлечения аналита Z_i относительно среднего значения $\bar{Z}$.

$$S_Z(\%) = \sqrt{\sum \frac{(Z_i - \bar{Z})^2}{n-1}} = 3,58 \quad (11)$$

Данный результат соответствует требованиям для стандартного отклонения (≤ 5) [5].

Тогда, по формуле 10 получено, что односторонний доверительный интервал составляет 15,39. Следовательно, систематическая погрешность статистически незначима ($3,18 \leq 5,13$) и критерий статистической незначимости выполняется.

Следовательно, методика правильна, воспроизводима и систематические ошибки отсутствуют.

Предел количественного определения (ПКО) был рассчитан по формуле (12):

$$\text{ПКО} = 10 \cdot \frac{S_a}{b} = 0,016 \text{ мг/мл} \quad (12)$$

Данное значение удовлетворяет требованиям [5], так как оно ниже минимальной концентрации рабочего диапазона (0,03125 мг/мл).

Заключение.

В ходе проведённого исследования была разработана и предварительно валидирована методика количественного определения молнупиравира методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. Полученные результаты демонстрируют, что методика обладает высокой линейностью ($R^2 = 0,9992$) в диапазоне концентраций 0,03125-0,5 мг/мл, что значительно превышает минимальные требования Государственной Фармакопеи РФ XV издания. Показано, что методика количественного определения является специфичной, так как пики молнупиравира и подобранных вспомогательных веществ для разработки прототипов ингаляционной формы не пересекаются. Средняя степень извлечения аналита составила 103,18 %, что

свидетельствует о правильности методики и отсутствии значимых систематических погрешностей. Значение относительного стандартного отклонения (3,58%) соответствует критерию приемлемости ($RSD \leq 5\%$), подтверждая воспроизводимость методики. Установленное значение ПКО (0,016 мг/мл) соответствует нормативным требованиям, демонстрируя адекватную чувствительность аналитической методики. Таким образом, разработанная методика соответствует основным валидационным критериям согласно ОФС.1.1.0012.15 «Валидация аналитических методик» Государственной фармакопеи РФ XV издания. По полученным данным можно сделать вывод, что методика является перспективной и применимой для контроля качества прототипов сухих порошков для ингаляций, содержащих молнупиравир, при планируемой дальнейшей фармацевтической разработке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научной тематики FSSM-2025-0003.

Список литературы

1. Popovic M., Marko E.: XBB.1.5 Kraken Cracked: Gibbs Energies of Binding and Biosynthesis of the XBB.1.5 Variant of SARS-Cov-2 // Microbiological Research. – 2023. – V. 270. – P. 1-2.
2. Временные методические рекомендации профилактика, диагностика и лечение новой коронавирусной инфекции (COVID-19) версия 17. – С. 38. – [Электронное издание]. Режим доступа: https://static0.minzdrav.gov.ru/system/attachments/attachments/000/061/252/original/%D0%92%D0%9C%D0%A0_COVID-19_V17.pdf.
3. Lee C. C., Hsieh C. C., Ko W. C.: Molnupiravir — A Novel Oral AntiSARS-CoV-2 Agent // Antibiotics. – 2021. – V. 10. – № 11. – P. 1-4.
4. Gandu Sravanthi, Kumara Swamy Gandla, Lalitha Repudi: New analytical method development and validation for estimation of molnupiravir in bulk and tablet dosage form by RP-HPLC method // Cellular, Molecular and Biomedical Reports. – 2023. – V. 3. – № 3. – P. 130-136.
5. ОФС.1.1.0012.15 Валидация аналитических методик. XV издание. [Электронное издание]. Режим доступа: <https://pharmacopoeia.ru/ofs-1-1-0012-15-validatsiya-analiticheskikh-metodik/>.

УДК 544.72, 54.057

Лазаренко А.С., Аксёнова Е.С., Ахмина П.В., Скворцова Л.Г., Крючкова Т.А., Шешко Т.Ф., Чередниченко А.Г.

Кислородная нестехиометрия сложных оксидов $GdFe_{1-x}Co_xO_3$, допированных калием: оценка с использованием нейронной сети и эксперимента

Лазаренко Алиса Сергеевна, студентка 4-го курса кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва; 1032217062@pfur.ru

Аксёнова Елена Сергеевна, студентка 4-го курса кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Ахмина Полина Владимировна, студентка 2-го курса магистратуры кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Скворцова Лилия Гивиевна, аспирант 2-го года кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Крючкова Татьяна Алексеевна, к.х.н., ст. преподаватель кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва;

Шешко Татьяна Фёдоровна, к.х.н., доцент кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва; Чередниченко Александр Генрихович, д.х.н., профессор кафедры Физической и коллоидной химии РУДН, Россия, Москва.

ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН), факультет физико-математических и естественных наук, кафедра физической и коллоидной химии, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.

В рамках данного исследования были синтезированы и охарактеризованы перовскитные материалы состава $GdCo_{1-x}Fe_xO_{3-\delta}$. Все образцы являются анион-дефицитными с упорядоченными кислородными вакансиями. До синтеза с помощью нейросетей оценено число вакансий. Исследовано влияние замещения $Fe \leftrightarrow Co$ на кислородное окружение и степень окисления. Замещение $K \rightarrow Gd$ в А-позиции увеличивает δ , вызывает появление дырок и формирование Fe^{3+}/Fe^{4+} и Co^{2+}/Co^{3+} . Оценено влияние степени окисления В-элемента на активность в CO_2 -синтезе Фишера–Тропша.

Ключевые слова: кислородная нестехиометрия, золь-гель метод, железо, кобальт, перовскиты

Oxygen nonstoichiometry of $GdFe_{1-x}Co_xO_3$ complex oxides doped with potassium: assessment using neural networks and experiment

Lazarenko A.S., Aksenova E. S., Akhmina P.V., Skvortsova L.G., Kryuchkova T.A., Sheshko T.F., Cherednichenko A.G.

Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya Street, Moscow, 117198, Russian Federation

Within the framework of this study, perovskite materials with the composition $GdCo_{1-x}Fe_xO_{3-\delta}$ were synthesized and characterized. All samples are anion-deficient with ordered oxygen vacancies. A neural network was used to estimate the number of vacancies before synthesis. The effect of $Fe \leftrightarrow Co$ substitution on the oxygen environment and oxidation state was studied. $K \rightarrow Gd$ substitution in the A-site increases δ , induces hole formation, and leads to Fe^{3+}/Fe^{4+} and Co^{2+}/Co^{3+} states. The influence of oxidation on catalytic activity in CO_2 -based Fischer–Tropsch synthesis was evaluated. Keywords: oxygen nonstoichiometry, sol-gel method, iron, cobalt, perovskites.

Введение

Разработка экологически чистых и безотходных каталитических процессов требует создания новых высокоэффективных катализаторов, в том числе на основе сложных оксидов. Перовскитоподобные соединения представляют собой перспективный класс таких материалов благодаря уникальным физико-химическим свойствам и широкому спектру применений в катализе, электронике, магнетизме и энергетике [1–4].

Одним из ключевых факторов, определяющих каталитические и функциональные свойства перовскитов, является кислородная нестехиометрия. Гибкость кристаллической решётки типа ABO_3 допускает отклонение от идеального состава, что приводит к образованию соединений формулы $ABO_{3\pm\delta}$ ($0 < \delta \leq 1$) [5]. Наиболее распространённой формой нестехиометрии является кислородный

дефицит ($ABO_{3-\delta}$), возникающий вследствие образования кислородных вакансий. Эти вакансии играют важную роль в обеспечении кислородной подвижности и повышении каталитической активности [6].

Кислородные вакансии изменяют электронную структуру материала, способствуют генерации дырок и редокс-пар, повышая эффективность каталитических процессов [7]. Управление концентрацией вакансий и степенью окисления В-катионов критически важно для настройки окислительно-восстановительных свойств и адсорбционной способности оксидных систем. Как правило, нестехиометрические перовскиты характеризуются высокой ионной и электронной проводимостью благодаря состоянию смешанной валентности и наличию кислородных вакансий [8].

Экспериментальная часть

Перовскитоподобные оксиды состава $Gd_{1-y}K_yFe_{1-x}Co_xO_3$ ($x = 0; 0,5; 1$; $y = 0; 0,01; 0,05$) синтезированы методом цитрат-нитратного золь-гель процесса при атмосферном давлении [9].

Фазовый состав определяли методом РФА с использованием дифрактометра Bruker D8 Advance (CuK α -излучение, $2\theta = 5^\circ\text{--}80^\circ$, шаг $0,02^\circ$, скорость сканирования — $1,57^\circ/\text{мин}$).

Кислородная нестехиометрия δ определялась йодометрическим титрованием. Навеску образца (~ 30 мг) растворяли в 0,7 моль/л HCl с избытком KI (1,5 г). После выдержки в герметичной колбе в темноте (10–15 мин) высвобождавшийся I_2 титровали 0,02 моль/л раствором $Na_2S_2O_3 \cdot 5H_2O$. На основе расхода тиосульфата рассчитывали количество ионов Fe^{3+}/Fe^{4+} или Co^{3+}/Co^{2+} и определяли δ .

Обсуждение результатов

Полученные образцы являются однофазовыми и имеют орторомбическую структуру с пространственной группой Pnma (Рис.1).

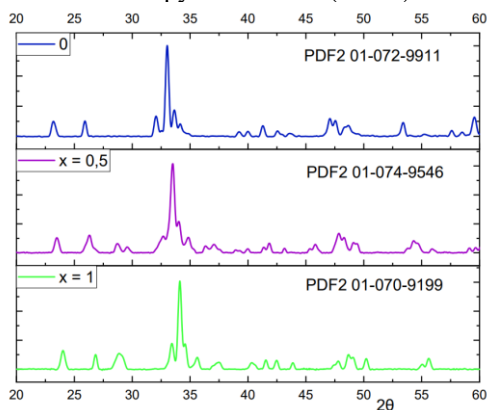


Рис.1. Дифрактограммы образцов $GdFe_{1-x}Co_xO_3$

Дифракционные пики соответствуют $GdFeO_3$, $GdFe_{0,5}Co_{0,5}O_3$ и $GdCoO_3$ и их твердым растворам. Анализ дифрактограмм выявляет некоторое смещение параметров в область больших углов при увеличении доли кобальта в феррите, что связано с различиями в кристаллографических радиусах ионов ($r(Fe^{3+}) = 0,67 \text{ \AA}$, $r(Co^{3+}) = 0,64 \text{ \AA}$) и искажением параметров кристаллической решетки по мере замещения железа на кобальт.

С помощью нейросети Google AI Studio проведён предварительный расчёт δ по структурной формуле, предполагая известную валентность катионов и электронейтральность. Введение щелочного металла (K^+) в А-позицию $GdBO_3$ способствует образованию кислородных вакансий, компенсируя зарядовое несоответствие за счёт формирования дырок и изменения валентности В-металлов (Fe^{3+}/Fe^{4+} , Co^{3+}/Co^{2+}) [5,9].

Полученные результаты демонстрируют, что введение калия в решётку перовскита приводит к дефициту положительных зарядов, что требует компенсации через образование кислородных вакансий. Теоретические расчёты показали, что уровень нестехиометрии зависит от содержания калия: для образцов с 1% калия значение составило 0,01, в то время как для образцов с 5% калия это значение увеличилось до 0,05 (Табл. 1). Это свидетельствует о том, что увеличение содержания калия в структуре ведёт к большему количеству кислородных вакансий.

Таблица 1. Значения числа кислородных дефектов образцов $Gd_xK_{1-x}(Fe)CoO_{3-\sigma}$

Образец	Оценка с помощью нейронной сети		Эксперимент	
	$\sigma \pm \Delta$	$B^{\delta+}$	$\sigma \pm \Delta$	$B^{\delta+}$
$Gd_{0,99}K_{0,01}FeO_{3-\sigma}$	0,010	2,19	$0,330 \pm 0,003$	2,36
$Gd_{0,95}K_{0,05}FeO_{3-\sigma}$	0,050	2,18	$0,346 \pm 0,002$	2,41
$Gd_{0,99}K_{0,01}CoO_{3-\sigma}$	0,010	2,19	$0,340 \pm 0,004$	2,34
$Gd_{0,95}K_{0,05}CoO_{3-\sigma}$	0,050	2,18	$0,345 \pm 0,005$	2,41
$Gd_{0,99}K_{0,01}Fe_{0,5}Co_{0,5}O_{3-\sigma}$	0,010	2,19	$0,309 \pm 0,001$	2,20
$Gd_{0,95}K_{0,05}Fe_{0,5}Co_{0,5}O_3$	0,050	2,22	$0,340 \pm 0,007$	2,42
$GdFe_{0,5}Co_{0,5}O_{3-\sigma}$	0,000	2,18	$0,311 \pm 0,000$	2,19
$GdFeO_{3-\sigma}$	0,000	2,20	$0,051 \pm 0,002$	2,90
$GdCoO_{3-\sigma}$	0,000	2,20	$0,386 \pm 0,005$	2,23

Эксперимент подтвердил, что все образцы относятся к анион-дефицитным перовскитам ($0,1 \leq \sigma \leq 1$). Полное замещение железа на кобальт в В-позиции структуры ABO_3 увеличивает количество кислородных вакансий, что подтверждается низким содержанием кислорода в $GdKCoO_{3-\sigma}$ (рисунки 2,3). Полученные значения концентрации анионных вакансий $\sigma > 0,1$, то есть их распределение в основном имеет упорядоченный характер вдоль определённых кристаллографических направлений с образованием анион-дефицитных слоёв, чередующимися в свою очередь со слоями, относящимися к перовскитной структуре состава ABO_3 [9].

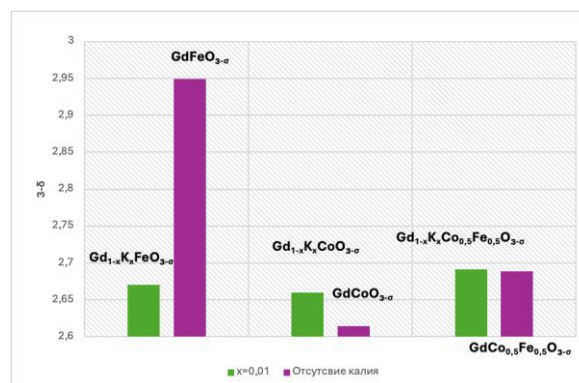


Рис.2. Значения содержания кислорода в образцах $Gd_{1-x}K_xAO_3$ (где А – Co, Fe; $x=0,01$)

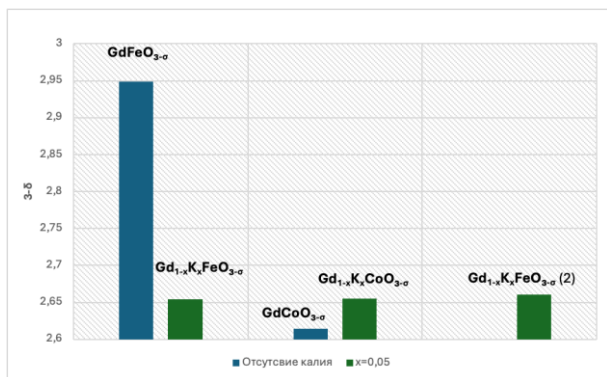


Рис.3. Значения содержания в образцах $Gd_{1-x}K_xAO_3$ (где $A - Co, Fe$; $x=0,05$)

В случае исследованных образцов введение калия в А-позицию увеличивает количество вакансий, так как калий замещает в решетке ионы металлов с большей степенью окисления, изменяя ее электронную структуру. Увеличение электронной плотности вокруг катионов способствует образованию дополнительных дефектов, влияющих на стехиометрию и равновесие в решетке материала.

Влияние переходных металлов (Fe и Co) на кислородную нестехиометрию также оказало значительное влияние. Железо (Fe) в перовскитах склонно восстанавливаться с Fe^{3+} до Fe^{2+} , что сопровождается более выраженным дефицитом кислорода и, как следствие, большими концентрациями кислородных вакансий. Это подтверждается тем, что образцы на основе Fe (например, $K_{0,01}Gd_{0,99}FeO_3$) показывают более высокую нестехиометрию по сравнению с образцами на основе Co. Кобальт, в свою очередь, проявляет меньшую склонность к восстановлению по сравнению с железом. В процессе восстановления Co^{3+} до Co^{2+} образуется меньше кислородных вакансий, что приводит к меньшей кислородной нестехиометрии в соответствующих образцах.

Сравнение теоретических и экспериментальных значений показало некоторые отклонения, которые могут быть связаны с особенностями синтеза образцов или дополнительными дефектами в кристаллической решетке. Например, для образцов с Fe наблюдается незначительное увеличение экспериментальных значений нестехиометрии по сравнению с теоретическими, что может быть связано с дополнительными дефектами или воздействием внешних факторов в процессе синтеза.

Для исследуемых перовскитных образцов была рассчитана средняя степень окисления переходных металлов (Fe и Co) на основе экспериментально определенной кислородной нестехиометрии (σ). Вычисленные значения зарядов составили от 2.23 (для $GdCoO_3$) до 2.90 (для $GdFeO_3$), что указывает на наличие значительного количества восстановленных центров (Fe^{2+} , Co^{2+}), способных участвовать в активации и восстановлении молекул CO_2 .

Искусственным интеллектом (ИИ) был проведен оценочный анализ влияния степени окисления переходных металлов на активность катализаторов в CO_2 -синтезе Фишера–Тропша ($H_2:CO_2 = 2:1$) (рис.4а)

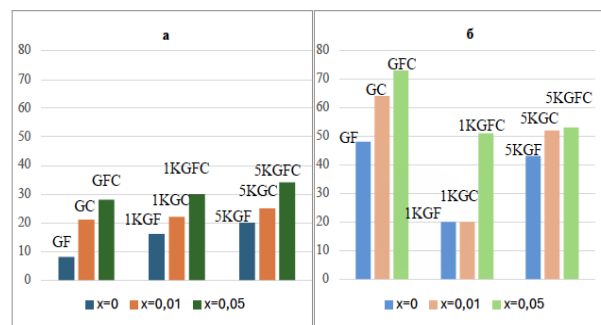


Рис.4. Конверсии CO_2 при $T=723K$: а) рассчитанные ИИ; б) эксперимент (GF - $GdFeO_3$; GC - $GdCoO_3$; GFC - $GdFe_{0,5}Co_{0,5}O_3$; 1K, 5K – образцы, допированные 1% и 5% калия)

Так как восстановление CO_2 в реакциях обратной конверсии водяного пара (RWGS) и синтезе Фишера–Тропша (FT) требует передачи электронов, катализаторы с более низкой средней валентностью переходных металлов могут быть потенциально более активными. В частности, образцы, содержащие кобальт (особенно $GdCoO_3$ и K-допированные аналоги), демонстрируют пониженную степень окисления Co, что свидетельствует о высокой степени восстановления. Это соответствует литературным данным о высокой активности Co^{3+}/Co^{2+} -систем в синтезе углеводородов из CO и CO_2 [3,4].

Катализаторы на основе железа, в свою очередь, проявляют более высокие значения средней валентности (например, 2.90 у $GdFeO_3$), что может указывать на меньшую восстановленность и, соответственно, меньшую активность в восстановлении CO_2 , особенно при температурах ниже 623 K. Однако введение калия способствует росту нестехиометрии, а значит и восстановленность железа (например, до 2.41 у $Gd_{0,95}K_{0,05}FeO_3$), что может повысить каталитическую активность за счёт увеличения количества активных Fe^{2+} -центров.

Смешанные Fe/Co-системы демонстрируют промежуточные степени окисления (2,20–2,42), обеспечивая баланс между восстановительной способностью и устойчивостью к агрегации активных фаз, что делает их перспективными для CO_2 -FT-синтеза при 573–673 K.

На основе расчётов и анализа зарядов переходных металлов предполагается следующий тренд активности: $GdFeO_3 < K$ -допированные Fe-системы $< Fe/Co$ -смешанные $< K$ -допированные Co-системы $< GdCoO_3$. Такое распределение соответствует теоретическим представлениям о роли восстановленных центров.

С помощью ИИ оценено влияние восстановительных свойств и состава на конверсию CO_2 . Результаты сопоставлены с экспериментальными данными в интервале температур 523–723 K. При 723 K наибольшую активность (73% показал $GdCoO_3$ -σ, благодаря высокой подвижности кислорода и Co^{3+}/Co^{2+} -редокс-способности. Калиевая модификация Co-катализаторов снижала активность до 51–53%. Железосодержащий $GdFeO_3$ -σ ($\delta = 0,051$) продемонстрировал 48 % конверсии. Добавление

калия уменьшало активность (20–43 %), что связано с изменениями в электронной структуре. Смешанные катализаторы $\text{GdFe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_{3-\sigma}$ показали 64 % конверсии, подтверждая синергетический эффект Fe и Co. Несмотря на частичное снижение активности при допировании K, такие системы оставались более эффективными, чем чисто железосодержащие аналоги.

Заключение

В ходе проведенного исследования было установлено наличие упорядоченных кислородных вакансий во всех образцах, что подтверждает их анион-дефицитную природу. Введение калия и переходных металлов (Fe и Co) в структуру перовскитов значительно влияет на кислородную нестехиометрию, что в свою очередь отражается на каталитических свойствах этих материалов.

Активность катализаторов в реакции модифицированного CO_2 синтеза Фишера-Тропша зависит от состава, кислородной нестехиометрии (δ) и восстановления ионов переходных металлов. Наилучшие результаты по конверсии CO_2 показали смешанные системы на основе железа и кобальта. Это свидетельствует о важности взаимодействия между этими металлами. А добавление калия в состав катализаторов изменяет их кислородный баланс, что влияет на их каталитические свойства.

Таким образом, результаты исследования подтверждают, что для эффективного катализатора важно поддержание оптимального соотношения компонентов и степени восстановления переходных металлов, а также контроль за кислородной нестехиометрией, что позволяет значительно улучшить активность катализаторов в процессе восстановления CO_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-29-00341.

Список литературы

1. Y. Xie, X. W. Lou et al. Mixed Transition-Metal Oxides: Design, Synthesis, and Energy-Related Applications. // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2014. – V. 53. – P.1488 – 1504
2. Г. В., Чеботарев, Серов, А. Ю. Изучение магнитных свойств перовскитоподобных оксидов $\text{GdFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$. // *Журнал физической химии.* – 2010. – Т. 84 (3). – С. 463-468.
3. Li, Y., Liu, L., Zhou, X., Xie, Y., & Yang, J. $\text{GdFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ Perovskite-Type Oxides as Catalysts for CO Oxidation: Synergistic Effect of Gd and Co Ions. // *ACS Catalysis.* – 2016. – V. 6. – P. 6305-6318.
4. Tsai, M.-K., Chen, K.-H., Huang, C.-H. A review of perovskite-based catalysts for volatile organic compounds elimination and the synthesis of energy carriers. // *Applied Catalysis B: Environmental.* – 2017. – V.206. – P. 428-447.
5. Ji Q. et al. The role of oxygen vacancies of ABO_3 perovskite oxides in the oxygen reduction reaction // *Energy & Environmental Science.* – 2020. – V. 13 (5). – P. 1408-1428.
6. Pena M. A., Fierro J. L. G. Chemical structures and performance of perovskite oxides // *Chemical reviews.* – 2001. – V. 101 (7). – P. 1981-2018.
7. Zhu J. et al. Perovskite oxides: preparation, characterizations, and applications in heterogeneous catalysis // *Acs Catalysis.* – 2014. – V. 4 (9). – P. 2917-2940.
8. Mizusaki J. Nonstoichiometry, diffusion, and electrical properties of perovskite-type oxide electrode materials // *Solid State Ionics.* – 1992. – V. 52 (1-3). – P. 79-91.
9. Попов, М. П. Изучение влияния модификации вольфрамом на функциональные свойства перовскита состава $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\sigma}$ // дис. на соиск. уч. ст. канд. хим. наук: 02.00.21. / М. П. Попов. – Новосибирск, 2016. – 110

УДК 621.762.04

Михайлин С.В., Челноков В.В., Потапов Г.Г., Зосимов С.Э., Коржевский С.В., Рой К.О.

Аддитивные технологии в производстве постоянных магнитов для вентильных электродвигателей

Челноков Виталий Вячеславович – д.т.н., профессор кафедры логистики и экономической информатики;

Зосимов Семен Эрикович – студент группы МТ-28; semenzosimov@yandex.ru;

Коржевский Савва Владимирович – студент группы АС-115;

Рой Ксения Олеговна – студент группы МТ-18,

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Михайлин Станислав Васильевич – к.т.н., генеральный директор ООО «НПО «Магнитные Материалы» 121561, г. Москва, ул. Молодогвардейская, д.18 кв.100

Потапов Григорий Геннадьевич – к.т.н., заместитель генерального директора

Общество с ограниченной ответственностью «Электромагнитные системы»

630015, Новосибирская область, г. Новосибирск, Планетная ул, зд. 30 к. 1а

В статье рассмотрены актуальные аддитивные технологии для производства постоянных магнитов на основе редкоземельных элементов (Nd-Fe-B, Sm-Co, Sm-Fe) применительно к вентиляторным электродвигателям. Подчеркивается зависимость магнитных и механических свойств магнитов от настройки технологических параметров, таких как мощность лазера, скорость сканирования и толщина слоя. Предложены меры по устранению недостатков путём введения внешних воздействий и разработки новых материалов.

Ключевые слова: аддитивные технологии, магниты

Additive technologies in the production of permanent magnets for valve electric motorsMikhailin S.V.², Chelnokov V.V.¹, Potapov G.G.³, Zosimov S.E.¹, Korzhevsky S.V.¹, Roy K.O.¹¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation² Open Company «NPO Magnetic materials»³ Limited Liability Company «Electromagnetic Systems»

The article discusses current additive for the production of permanent magnets based on rare earth elements (Nd-Fe-B, Sm-Co, Sm-Fe) as applied to fan electric motors. The dependence of magnetic and mechanical properties of magnets on the adjustment of process parameters, such as laser power, scanning speed and layer thickness, is emphasized. Measures are proposed to eliminate shortcomings by introducing external effects and developing new materials.

Key words: additive technologies, magnets

Введение

Вентильные электродвигатели широко используются в различных отраслях, включая автомобильную, авиационную и промышленную благодаря своей простоте конструкции, высокой надежности и энергоэффективности [1]. Эффективность и производительность этих двигателей во многом зависят от качества постоянных магнитов.

Аддитивные технологии (AM – Additive Manufacturing) представляют собой перспективное направление в производстве постоянных магнитов для вентильных электродвигателей, что обусловлено их способностью создавать сложные геометрические формы с минимальными потерями материала и энергии, что позволяет более точно управлять моментами и токами в фазах двигателя. В контексте производства редкоземельных постоянных магнитов, таких как Nd-Fe-B, Sm-Co и Sm-Fe, аддитивные технологии открывают новые возможности для создания магнитов с улучшенными магнитными и механическими свойствами, что особенно важно для применения в вентильных электродвигателях, где требуются высокая энергоэффективность и компактность [2, 3]. Кроме того, аддитивные технологии позволяют интегрировать магниты непосредственно в конструкцию ротора, что может улучшить эффективность электродвигателей и

снизить их вес [4]. Благодаря точному дозированию материалов и минимизации необходимости механической обработки аддитивные технологии завоевывают все большее место в производстве постоянных магнитов [5].

Экспериментальная часть

1. Аддитивное производство магнитов Nd-Fe-B. Магниты на основе Nd-Fe-B являются наиболее распространёнными в современных электродвигателях благодаря их высокой магнитной энергии и относительной доступности. Лазерное плавление в порошковом слое (LPBF – Laser Powder Bed Fusion) включает два основных метода: селективное лазерное плавление (SLM – Selective Laser Melting) и селективное лазерное спекание (SLS – Selective Laser Sintering). Эти аддитивные технологии позволяют создавать магниты с высокой плотностью и сложной геометрией, что невозможно при использовании традиционных методов, таких как спекание или горячее прессование [4, 6, 7, 8].

Магнитные свойства NdFeB сильно зависят от ориентации зерен и микроструктуры. Исследование выявило, что при угле лазерного межслоевого перехода между слоями в 67° зерна Nd₂Fe₁₄B имеют наибольшую ориентацию вдоль оси, что обеспечивает высокую прочность текстуры и способствует улучшению магнитных свойств. Однако наилучшие магнитные характеристики были

достигнуты при угле перехода 90° , где наблюдалась оптимальная ориентация оси и меньший размер зерен (решающее значение для улучшения магнитных свойств), что привело к максимальному значению магнитной энергии $(BH)_{\max}$ 13.8 кДж/м³ [9]. Это подтверждает, что контроль ориентации зерен и микроструктуры является ключевым фактором для достижения высоких магнитных свойств в аддитивно изготовленных магнитах.

Уменьшенная толщина слоя увеличивает скорость охлаждения расплавленной ванны, тем самым улучшая относительную плотность образца [10, 11]. Скорость охлаждения во время процесса LPBF влияет на фазовый состав и магнитные свойства магнитов NdFeB. Более высокая скорость охлаждения способствует образованию фазы Nd₂Fe₁₄B, тогда как более низкая скорость охлаждения приводит к осаждению мягкой магнитной фазы α -Fe, что ухудшает магнитные характеристики [7].

Механические свойства магнитов NdFeB, произведенных с помощью аддитивных лазерных технологий, оказались худшими, чем магниты, созданные по традиционным технологиям, с максимальной прочностью на растяжение менее 3 МПа. Это объясняется наличием термических трещин и отсутствием участия определенных зерен Nd₂Fe₁₄B в механическом растяжении [8]. Механизм разрушения можно идентифицировать как смешанный, включающий как по поверхности зерен, так и вызванные трещинами. Для вентильных электродвигателей, где механическая прочность имеет важное значение, это представляет собой проблему. Однако исследование показывает, что упрочнение границ зерен и плотность дислокаций играют важную роль в механических характеристиках, указывая на потенциальные области для улучшения посредством микроструктурной оптимизации.

Метод SLM – это полное плавление металлических порошков под лазерным лучом, что позволяет создавать магниты с высокой плотностью и малым размером зерна, что положительно влияет на коэрцитивную силу H_c и остаточную намагниченность Br [9]. Например, магниты Nd-Fe-B, изготовленные методом селективного лазерного плавления, могут достигать H_c до 1790 кА/м и Br до 0,62 Тл [13] или Br до 0,9 Тл и коэрцитивной силой H_c до 1025 кА/м [7, 14]. Эти параметры сопоставимы с магнитами, изготовленных по традиционным технологиям. Однако для достижения таких результатов требуется тщательный контроль параметров процесса, таких как мощность лазера, скорость сканирования и толщина слоя [15].

Быстрые скорости охлаждения 104–106 К/с во время SLM приводят к мелкозернистым структурам, которые полезны для повышения коэрцитивной силы [4]. Однако неравномерность размера зерен остается проблемой, ограничивающей достижение магнитных свойств, сравнимых с традиционными спеченными магнитами [9]. Увеличение объемной плотности энергии Ev при SLM приводит к повышению

относительной плотности магнитов, но одновременно вызывает образование термических трещин шириной около 10 мкм вдоль направления построения. Это связано с высокими термическими напряжениями, возникающими в процессе быстрого охлаждения [16]. Стратегия повторного плавления позволила увеличить относительную плотность на 5–10%, что важно для минимизации пористости и улучшения механической прочности магнитов [17].

Технология SLS позволяет создавать магниты при частичном плавлении порошкового слоя с использованием связующих материалов, таких как полиамид-12 (PA12), что упрощает процесс изготовления, но снижает магнитные свойства из-за наличия немагнитных компонентов. Тем не менее, добавление низкоплавких сплавов, таких как Nd-Cu, в процессе SLS может значительно повысить коэрцитивную силу магнитов до 1200 кА/м [12]. Хотя магниты SLS обычно демонстрируют более низкие значения остаточной намагниченности Br 0,33–0,44 Тл, они могут достигать высоких значений коэрцитивной силы H_c до 1552 кА/м за счет инфильтрации границ зерен сплавами с низкой температурой плавления [18, 19].

Процесс LPBF методом послойного наплавления (FDM – Fused Deposition Modeling) особенно подходит для производства магнитов со сложной формой. Однако использование термопластичных связующих часто приводит к снижению магнитных свойств из-за снижения содержания магнитного порошка. Недавние достижения продемонстрировали, что увеличение содержания магнитного порошка до 70 об. % может обеспечить остаточную намагниченность Br 0,58 Тл и коэрцитивную силу H_c 708,2 кА/м [15]. Кроме того, выравнивание магнитного поля *in situ* во время процесса послойного наплавления может значительно улучшить магнитные свойства, при этом Br достигает 0,73 Тл, а H_c 811,7 кА/м [20].

Технология струйного нанесения связующего (BJ – Binder Jetting) обеспечивает нанесение жидкого связующего на слой порошка с последующим отверждением. Хотя магниты, произведенные посредством струйного нанесения связующих, обычно демонстрируют низкую остаточную намагниченность Br 0,3–0,35 Тл. Включение сплавов с низкой температурой плавления может повысить коэрцитивную силу H_c до 1345 кА/м [21]. Однако пористая природа магнитов, произведенных по технологии BJ, остается проблемой для достижения высокой плотности магнитов и механической прочности.

2. Аддитивное производство магнитов Sm-Co. Магниты на основе Sm-Co обладают высокой температурной стабильностью и используются в высокотемпературных приложениях, таких как аэрокосмическая промышленность. Аддитивные технологии, такие как селективное лазерное плавление, позволяют создавать магниты Sm-Co с высокой плотностью и улучшенными магнитными свойствами. Например, команда Goll et al. [4]

продemonстрировала, что магниты $(\text{CoCuFeZr})_{17}\text{Sm}_{20}$, изготовленные методом селективного лазерного плавления и подвергнутые трёхступенчатому отжигу, достигают коэрцитивной силы H_c 2204 кА/м и остаточной магнитной индукции B_r 0,78 Тл, что делает их пригодными для использования в высокотемпературных электродвигателях.

3. Аддитивное производство магнитов Sm-Fe. Магниты на основе Sm-Fe, такие как $\text{Sm}(\text{Fe},\text{T})_{12}$ и Sm-Fe-N, представляют интерес для применения в электродвигателях благодаря их высокой коэрцитивной силе и температурной стабильности. Аддитивная технология SLM, команда Незахина [22] продемонстрировала возможность создания магнитов $(\text{Sm},\text{Zr})\text{Fe}_{11}\text{Ti}$ с коэрцитивной силой до H_c 256 кА/м с использованием низкоплавких добавок, таких как $\text{Sm}_{75}(\text{Cu},\text{Co})_{26}$.

Преимущества и вызовы аддитивных технологий

Аддитивные технологии предлагают значительные преимущества для производства постоянных магнитов, включая возможность создания сложных геометрических форм, таких как микроскопические охлаждающие каналы, что может улучшить тепловые характеристики электродвигателей [14]. Однако остаются вызовы, связанные с улучшением магнитных свойств аддитивно изготовленных магнитов, особенно в сравнении с традиционными спечёнными магнитами. Для этого требуется оптимизация параметров процесса, таких как мощность лазера, скорость сканирования и толщина слоя, а также использование дополнительных методов, таких как *in situ* магнитное выравнивание и постобработка [18].

Перспективные области для научных исследований и внедрения аддитивных технологий в производстве постоянных магнитов для вентильных электродвигателей:

1. Оптимизация параметров аддитивных процессов. Необходимы дальнейшие исследования для оптимизации параметров (мощность лазера, скорость сканирования, толщина слоя, предварительный нагрев или охлаждение подложки) процесса LPBF, послойного наплавления и струйного нанесения связующего для достижения лучшего баланса между относительной плотностью, микроструктурой и магнитными свойствами. Например, использование адаптивных технологий сканирования, которые динамически регулируют мощность лазера и скорость сканирования на основе тепловой обратной связи в реальном времени, может привести к улучшению магнитных и механических свойств [15]. Многомасштабное моделирование, машинное обучение и подходы, основанные на анализе больших данных (Big Data), могут быть использованы для установления корреляций между параметрами процесса и характеристиками получаемых магнитов [23].

2. Интеграция аддитивных технологий в производство электродвигателей включает в себя: разработку специализированных аддитивных

технологий для производства магнитов с нестандартной сложной геометрией для улучшения тепловых характеристик электродвигателей [15] и создание магнитов с распределёнными магнитными полями может значительно улучшить эффективность и производительность вентильных электродвигателей [24].

3. Внешние методы обработки подразумевают под собой выравнивание магнитного поля *in situ*. Интеграция источников магнитного поля во время аддитивных процессов для ориентации анизотропных порошков, особенно в послойном наплавлении и струйном нанесении связующего, показывает перспективность для производства анизотропных магнитов с индивидуальным распределением магнитного поля [20, 25]; использование сплавов с низкой температурой плавления для диффузии добавок (инфильтратов) на границе зёрен значительно улучшает коэрцитивную силу H_c в магнитах, изготовленных послойным наплавлением и струйным нанесением связующего. Оправдано дальнейшее исследование различных инфильтратов и их влияния на магнитные свойства [18, 19]. Холодное изостатическое прессование (CIP – Cold Isostatic Pressing) и отжиг, являющиеся также внешними методами обработки, также могут улучшить плотность и магнитные свойства магнитов, созданных по аддитивным технологиям. Исследования влияния этих методов на характеристики различных магнитов имеют важное значение [26].

4. Разработка новых материалов магнитов охватывает следующие сферы: использование аддитивных технологий для создания магнитов на основе композитных или наноструктурированных материалов, сочетающих NdFeB с другими материалами, такими как ферриты или аморфные металлы, для улучшения термостойкости и снижения стоимости; возможность создания гибридных структур, где магнитные материалы сочетаются с другими функциональными слоями, например, для улучшения теплоотвода или защиты от коррозии [2]; совершенствование передовых методов микроструктурного контроля, такие как измельчение зёрен и проектирование текстуры, для улучшения магнитных характеристик магнитов, например, оптимизации стехиометрии Fe в исходном порошке позволяет уменьшить осаждение фазы $\alpha\text{-Fe}$ в процессе лазерного спекания для улучшения магнитных свойств магнитов [8]; разработку новых сплавов и методов производства, позволяющих уменьшить содержание неодима Nd в магнитах без ухудшения их характеристик, добавление кобальта Co или диспрозия Dy позволяет повысить термостойкость магнитов [4]; исследование новых редкоземельных материалов для магнитов, таких как Sm-Fe, в частности, системы $\text{Sm}(\text{Fe},\text{T})_{12}$ и Sm-Fe-N, обладают высокими высокой коэрцитивной силой H_c и температурной стабильности T_c , что делает их пригодными для использования в высокотемпературных условиях. Разработка

аддитивных методов для материалов данного класса может привести к значительным достижениям в этой области [14].

Заключение

Аддитивные технологии представляют собой перспективное направление для производства постоянных магнитов для вентильных электродвигателей, позволяя создавать магниты с улучшенными магнитными и механическими свойствами, снизив стоимость производства электродвигателей. Однако для достижения полного потенциала аддитивных технологий требуется дальнейшее исследование и оптимизация процессов, а также разработка новых материалов и методов обработки во время аддитивного процесса или после. Это открывает новые возможности для создания более эффективных и компактных электродвигателей, что особенно важно для развития электромобилей и других высокотехнологичных приложений.

Список литературы

1. Корнеев А. А., Третьяков А. С., Капитонов О. А. Перспективы развития вентильно-индукторного привода // Вестник Белорусско-Российского университета. – 2018. – №. 3 (60). – С. 63-69.
2. Chen Y., Xiong C., Li Y. Additive manufacturing of rare earth permanent magnetic materials: Research status and prospects // Metals. – 2024. – Vol. 14. – №. 4. – P. 446.
3. Nakamura H. The current and future status of rare earth permanent magnets // Scripta Materialia. – 2018. – Vol. 154. – С. 273-276.
4. Майоров А. А., Сафин А. Р. Возможность применения в электродвигателях постоянных магнитов без редкоземельных элементов // Известия высших учебных заведений. ПРОБЛЕМЫ ЭНЕРГЕТИКИ. – 2022. – Т. 24. – №. 4. – С. 116-130..
5. Goll D. et al. Additive manufacturing of permanent magnets based on (CoCuFeZr) 17Sm2 // physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters. – 2021. – Vol. 15. – №. 10. – P. 2100294.
6. Attaran M. The rise of 3-D printing: The advantages of additive manufacturing over traditional manufacturing // Business horizons. – 2017. – Vol. 60. – №. 5. – P. 677-688.
7. Bittner F., Thielsch J., Drossel W. G. Microstructure and magnetic properties of Nd-Fe-B permanent magnets produced by laser powder bed fusion // Scripta Materialia. – 2021. – Vol. 201. – P. 113921.
8. Dong H. et al. Influence of laser powder bed fusion scanning strategies on the magnetic and mechanical properties of NdFeB // Journal of Alloys and Compounds. – 2025. – Vol. 1020. – P. 179384.
9. Wu J. et al. Process-structure-property relationships in laser powder bed fusion of permanent magnetic Nd-Fe-B // Materials & Design. – 2021. – Vol. 209. – P. 109992.
10. Skalon M. et al. Influence of melt-pool stability in 3D printing of NdFeB magnets on density and magnetic properties // Materials. – 2019. – Vol. 13. – №. 1. – P. 139.
11. Goll D. et al. Additive manufacturing of bulk nanocrystalline FeNdB based permanent magnets // Micromachines. – 2021. – Vol. 12. – №. 5. – P. 538.
12. Jadimović, J. et al. Net Shape 3D Printed NdFeB Permanent Magnet. // Adv. Eng. Mater. – 2017. – Vol. 19. – P. 1700098.
13. Tosoni O. et al. High-coercivity copper-rich Nd-Fe-B magnets by powder bed fusion using laser beam method // Additive Manufacturing. – 2023. – Vol. 64. – P. 103426.
14. Engeroff J. A. B. et al. Additive manufacturing of Sm-Fe-N magnets // Journal of Rare Earths. – 2019. – Vol. 37. – №. 10. – P. 1078-1082.
15. Engeroff J. A. B. et al. Additive manufacturing of Sm-Fe-N magnets // Journal of Rare Earths. – 2019. – Vol. 37. – №. 10. – P. 1078-1082.
16. Genç K. et al. Laser powder bed fusion of NdFeB and influence of powder bed heating on density and magnetic properties // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. – 2024. – Vol. 132. – №. 9. – P. 5017-5038.
17. Yao B. et al. An effective laser in-situ re-scanning strategy in laser powder bed fusion of Nd-Fe-B permanent magnets: Crack reduction and magnetic properties enhancement // Additive Manufacturing. – 2024. – Vol. 90. – P. 104311.
18. Huber C. et al. Coercivity enhancement of selective laser sintered NdFeB magnets by grain boundary infiltration // Acta Materialia. – 2019. – Vol. 172. – P. 66-71.
19. Maltseva V. E. et al. The magnetic properties of a NdFeB permanent magnets prepared by selective laser sintering // Physics of Metals and Metallography. – 2022. – Vol. 123. – №. 8. – P. 740-745.
20. Gandha K. et al. Additive manufacturing of anisotropic hybrid NdFeB-SmFeN nylon composite bonded magnets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2018. – Vol. 467. – P. 8-13.
21. Li L. et al. A novel method combining additive manufacturing and alloy infiltration for NdFeB bonded magnet fabrication // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 438. – P. 163-167.
22. Neznakhin D. S. et al. Phase composition and magnetic properties of (Sm, Zr) Fe₁₁Ti magnets produced by selective laser melting // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2022. – Vol. 563. – P. 169937.
23. Wu J. et al. Amorphous-crystalline nanostructured Nd-Fe-B permanent magnets using laser powder bed fusion: Metallurgy and magnetic properties // Acta Materialia. – 2023. – Vol. 259. – P. 119239.
24. Périgo E. A. et al. Additive manufacturing of magnetic materials // Additive Manufacturing. – 2019. – Vol. 30. – P. 100870.
25. Nlebedim I. C. et al. Studies on in situ magnetic alignment of bonded anisotropic Nd-Fe-B alloy powders // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 422. – P. 168-173.
26. Jinwen Y. E. et al. Preparation of isotropic Sm₂Fe₁₇N_x magnetic powders and their bonded magnets // Rare Metals. – 2006. – Vol. 25. – №. 6. – P. 568-571.

УДК 303.732.4: 66.087

Нестерова А.В., Ильина С.И., Равичев Л.В.

Электроперенос в системном анализе химико-технологической системы

Нестерова Алиса Витальевна – студентка группы МТ-11, кафедры процессов и аппаратов химической технологии, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, alisa2002nesterova@mail.ru;
Ильина Светлана Игоревна – к.т.н., доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии, electis@yandex.ru;

Равичев Леонид Владимирович – д.т.н., заведующий кафедрой процессов и аппаратов химической технологии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассматривается понятие системного анализа химико-технологической системы, его иерархия и составляющие. Проведен анализ типовых процессов химической технологии. Показано, что наряду с процессами гидромеханики, массопередачи и теплопередачи в химических производствах существуют процессы, протекающие под действием разности электрических потенциалов. Предложена модернизированная схема составляющих типовых процессов химической технологии.

Ключевые слова: системный анализ химико-технологической системы, элемент, подсистема, иерархия, электрические процессы

Electrical transfer in the system analysis of a chemical technology system

Nesterova A.V., Ilyina S.I., Ravichev L.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the concept of a system analysis of a chemical technology system, its hierarchy and components. The analysis of typical processes of chemical technology is carried out. It is shown that along with the processes of hydromechanics, mass transfer and heat transfer in chemical industries, there are processes that occur under the influence of electric potential differences. A modernized scheme of the components of typical chemical technology processes is proposed.

Keywords: system analysis of a chemical technology system, element, subsystem, hierarchy, electrical processes

Введение

Современная химическая промышленность характеризуется высокой степенью сложности технологических процессов, большим количеством взаимосвязанных аппаратов и агрегатов, а также необходимостью строгого соблюдения требований к качеству продукции, экологической безопасности и экономической эффективности. Для успешного функционирования таких сложных объектов требуется системный подход к их анализу, проектированию и управлению. Одним из ключевых инструментов, позволяющих решать эти задачи, является системный анализ химико-технологических систем (ХТС).

Основная часть

Системный анализ ХТС представляет собой междисциплинарную область знаний [1], объединяющую методы математики, кибернетики, химии, экономики и инженерии. Его основная задача – комплексное исследование структуры, функционирования и развития химико-технологических систем с целью повышения их эффективности, надёжности и устойчивости. Данный подход позволяет выявлять взаимосвязи между элементами системы, определять влияние различных факторов на её поведение, а также разрабатывать оптимальные решения для управления и совершенствования производства.

Процессы, применяемые в химической технологии, отличаются большим разнообразием. К ним относятся механические, гидромеханические,

тепловые, массообменные, а также, собственно, химические и биохимические процессы. Это множество технологических операций приводит к появлению широкого спектра конструктивных решений для аппаратов, в которых реализуются данные процессы [2].

Объединение различных взаимосвязанных процессов и соответствующих аппаратов, работающих совместно для преобразования природного сырья в конечные или промежуточные продукты, формирует химико-технологическую систему. Основная задача функционирования ХТС – эффективная переработка исходных материалов с получением продукции, востребованной в промышленности или быту.

Каждая ХТС характеризуется определённой технологической структурой и набором параметров, которые задают её режим работы. Оценка эффективности функционирования такой системы осуществляется путём анализа входных и выходных параметров, что позволяет судить о её производительности и качестве выпускаемой продукции.

Любая ХТС базируется на двух ключевых составляющих: элементах и подсистемах:

- Элемент — это структурно-целостная часть системы, обладающая уникальными функциональными характеристиками. Например, при исследовании производственного цикла элементами могут выступать отдельные аппараты: реакционные

колонны, адсорбционные установки, теплообменные устройства и другие технологические единицы [2].

- Подсистема формируется из группы элементов со схожими свойствами и функционирует как автономный блок в рамках общей системы.

Важно отметить, что понятия «система», «подсистема» и «элемент» носят иерархический характер. Так, подсистема одного уровня может стать элементом системы более высокого порядка (например, цех как подсистема завода), а отдельный элемент (например, реактор) при детальном анализе может быть разложен на составляющие части (зоны нагрева, смесители и т.д.).

Взаимодействие между элементами ХТС происходит через потоки, которые обеспечивают передачу вещества, тепловой энергии или импульса. Каждый элемент выполняет специфическое преобразование входных потоков - изменяет их состав, температуру, давление или другие параметры за счёт протекания химических, физических или гидромеханических процессов. Таким образом, ХТС представляет собой динамическую сеть взаимосвязанных элементов, где преобразование ресурсов на каждом этапе дает возможность решить задачу оптимальной работы системы в целом.

Иерархия ХТС

В химическом производстве можно выделить три основных уровня иерархии: [1]:

- Первый, базовый уровень, включает в себя основные процессы химической технологии - такие как химические реакции, тепловые, диффузионные, гидромеханические и механические процессы, реализуемые в различных технологических аппаратах.

- Второй уровень представлен производственными цехами, которые специализируются на выполнении определённых технологических операций или выпуске конкретной продукции. На этом уровне также функционируют системы управления цехами.

- Третий, высший уровень, охватывает системы управления всем комплексом цехов, организацию

производственного процесса в целом, планирование запасов сырья и сбыт готовой продукции.

Для лучшего понимания иерархии рассмотрим структуру химического процесса, происходящего, например, в реакторе:

- На самом низком, молекулярном уровне анализируются взаимодействия между молекулами, законы химического и фазового равновесия, а также основные механизмы протекания реакций.

- Следующий уровень — это уровень отдельного элемента дисперсной фазы, которым может быть, например, гранула катализатора, частица адсорбента или пузырьёк газа. Здесь исследуются процессы тепло- и массопереноса между дисперсной и сплошной фазами.

- Третий уровень охватывает физико-химические процессы в ограниченном объёме аппарата, например, в слое катализатора или насадки. На этом уровне учитываются особенности движения фаз и распределения потоков в пределах слоя.

- Наивысший уровень — это уровень всего аппарата, где анализируется взаимодействие между различными рабочими зонами, такими как зоны нагрева и охлаждения, сорбции и десорбции.

Следует отметить, что количество уровней и их содержание в иерархической структуре ХТС может варьироваться в зависимости от целей анализа и объёма доступной информации о системе. Такой подход позволяет гибко адаптировать исследование под специфику конкретного объекта и задачи проектирования.

Таким образом, для расчёта деятельности предприятий необходимо основываться на расчёте отдельных типовых процессов.

«Исходя из блочной структуры модели типовые процессы химического производства можно представить в виде отдельных составляющих, как это показано в таблице 1. В зависимости от назначения отдельных моделей эти составляющие будут иметь описание различной степени детализации» [3].

Таблица 1. Составляющие типовых процессов химической технологии

Фундаментальные законы движения. Структура потоков	Термокинетика	Диффузионная кинетика	Химическая кинетика	Биохимическая кинетика
Гидродинамические процессы	Гидродинамическая структура потоков	Термокинетика	Диффузионная кинетика	Химическая кинетика
Теплообменные процессы	Массообменные процессы	Химические процессы	Биохимические процессы	

В представленной классификации отсутствуют:

- механические процессы (дробление, диспергирование и т.п.);
- процессы, протекающие под действием разности электрических потенциалов.

При изучении процессов как тепло-, так и массообмена (а также разделения и химических реакций) мы сталкиваемся с использованием электричества (это и электрофилтры, электрокоагуляция, индукционная сушка и т.д.),

однако, это напрямую не отображается в блочной структуре (конечно, можно допустить, что под фундаментальными законами движения авторы подразумевали, как механическое движение, так и движение электрического заряда со всеми следствиями, однако, тогда это не отображено в последующих блоках). Однако, как известно, все процессы протекают в результате гравитационного и электромагнитного взаимодействия. Таким образом, логично, что они могут также основываться на законах электродинамики и механики (таблица 2).

Таблица 2. Модернизированная схема составляющих типовых процессов химической технологии

	Механические/ Электрические процессы	Гидро- динамические процессы	Тепло- обменные процессы	Массо- обменные процессы	Химические процессы	Био- химические процессы
Биохимическая кинетика						+
Химическая кинетика					+	+
Диффузионная кинетика				+	+	+
Термокинетика			+	+	+	+
Гидродинамическая структура потоков		+	+	+	+	+
Фундаментальные законы механики и/или электродинамики	+	+	+	+	+	+

В качестве примеров можно привести следующие процессы, реализация которых невозможна без разности электрических потенциалов:

- 1) Формирование материала – электроспиннинг.
- 2) Изменение физико-химических параметров системы при наложении электрического поля (изменение вязкости согласно закону Эйнштейна) оказывает влияние на гидродинамику.
- 3) Обогрев материалов с помощью электрического тока.
- 4) Электродиализ (электромассообменный процесс).
- 5) Электролиз (электрохимический процесс).
- 6) Электрофорез (используется в биотехнологии).

Заключение

На основании вышеперечисленного можно сделать выводы:

- Системный анализ позволяет комплексно изучать химико-технологические системы, выявлять взаимосвязи и оптимизировать процессы.
- Электрические процессы, такие как электрофлотация, электродиализ и электрофорез,

оказывают значимое влияние на технологические операции и должны учитываться наряду с тепловыми и массообменными процессами.

- Включение электрических процессов в системный анализ расширяет возможности моделирования и управления химическими производствами

Список литературы

1. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии: основы стратегии. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Юрайт, 2020. — 499 с.
2. Натарева С.В. Системный анализ и математическое моделирование процессов химической технологии/ С.В. Натарева; под ред. В.Н. Блиничева; Иван. гос. хим.-технол. ун-т: учебное пособие. - Иваново, 2007. 80 с.
3. Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. Основы конструирования и проектирования промышленных аппаратов: учебник для вузов. - 2-е изд. - Москва: Юрайт, 2025. - 368 с.

УДК 667.61

Пигас А.В., Зубарев А.М. Покровский С.Я.

К вопросу об интенсификации процесса нанесения порошковых лакокрасочных материалов

Пигас Александр Валерьевич – студент группы ТМ-46 кафедры логистики и экономической информатики; A.v.pigas@list.ru.

Зубарев Андрей Михайлович – старший преподаватель кафедры логистики и экономической информатики.

Покровский Савва Ярославович – студент группы ТМ-46, кафедры логистики и экономической информатики.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье предложена универсальная технико-экономическая модель процесса нанесения порошковых ЛКМ, учитывающая массовый и энергетический балансы и уровень рекуперации сырья. Основываясь на концепции интенсификации химико-технологических процессов, модель в Excel визуализирует влияние технологических решений на эффективность покрытия. Показано, что её применение повышает производительность, снижает затраты и улучшает экологические показатели, служит основой для инвестиций и модернизации линий.

Ключевые слова: инжиниринг, порошковые лакокрасочные материалы, математическое моделирование, технико-экономический анализ, интенсификация, окраска.

On the issue of intensifying the powder coating application process

Pigas A.V. Zubarev A.M. Pokrovskiy S.Y.

D. I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology

This article presents the development of a universal techno-economic mathematical model for the application process of powder coatings. The model incorporates key parameters of the production line, including mass and energy balances as well as raw material recovery rates. The study is based on the concept of process intensification, which is especially relevant in the field of paint and coating technologies. Implemented in Excel, the model enables visual analysis of how technological and innovative changes affect coating process efficiency. The results confirm that the model facilitates improved productivity, cost reduction, and enhanced environmental performance. This tool can support investment justification and strategic decision-making in the modernization of coating facilities.

Keywords: engineering, powder coatings, mathematical modeling, techno-economic analysis, process intensification, painting.

Введение

Эффективность инжиниринга в химической, включая лакокрасочную, промышленности должна оцениваться не только по технологическим, но и по финансово-экономическим или организационно-управленческим критериям [1–6]. В то же время традиционные методы инжиниринга бизнес-процессов слабо учитывают технологическую специфику. Использование моделирования бизнес-процессов в химической технологии позволяет комплексно решать организационно-экономические задачи с учётом особенностей производственных процессов.

Основной задачей инжиниринга в окрасочных и лакокрасочных производствах является повышение качества, энергоэффективности и экологичности технологических решений. Современные исследования в этой области сосредоточены на моделировании процессов ресурсного обеспечения и проектных решений.

Настоящая работа направлена на разработку универсальной математической модели процесса нанесения порошковых ЛКМ, предназначенной для анализа влияния технологических параметров и инновационных решений на интенсивность и эффективность данного процесса.

Основная часть

Порошковые лакокрасочные материалы (ЛКМ) представляют собой сухие композиции, состоящие из термопластичных или термореактивных смол, наполнителей, пигментов и функциональных добавок.

Нанесение порошка является сложным, составным процессом и состоит из электростатического напыления и термической обработки.

При электростатическом напылении частицы порошка притягиваются к заземлённой металлической поверхности под действием электрического поля.

После напыления изделие подвергается термической обработке в печи, где порошок плавится, растекается и полимеризуется, образуя равномерное сплошное покрытие.

В результате получают прочное, устойчивое к механическим повреждениям, коррозии и химическим воздействиям покрытие без растворителей и испарений вредных летучих веществ. Порошковые ЛКМ обеспечивают высокую адгезию к металлам, отличную стойкость к ультрафиолету и широкий спектр декоративных

эффектов — от матового до глянцевого, включая текстурные и металлизированные варианты [7].

На основании обширного массива экспериментальных и эксплуатационных данных, полученных в ходе исследования процесса нанесения порошковых лакокрасочных материалов (ЛКМ), разработана и формализована математическая модель, представленная уравнениями (1–15), и визуализированная в виде детализированной блок-схемы технологической последовательности (рис. 1). Данная модель, реализованная в среде электронных таблиц Excel, обеспечивает не только количественный расчёт ключевых технико-экономических показателей, но и предоставляет инструментарий для оперативного моделирования различных сценариев технологического процесса.

В частности, при помощи построенной модели осуществляются расчёты массового баланса сырьевых компонентов и энергетического баланса технологической линии, что позволяет выявлять и минимизировать узкие места в цепочке поставок и энергопотребления. Интеграция алгоритмов расчёта уровня рекуперации непокрытого порошка и отработанного материала даёт возможность прогнозировать эффективность систем возврата сырья и оценивать экономическую целесообразность их модернизации.

Математическая модель процесса нанесения порошковых лакокрасочных покрытий

Скорость нанесения (шт/ч или м²/ч): если конвейер движется со скоростью «*v*» (м/с) и ширина захвата «*w*» (м) при высоте слоя «*h*», то теоретическая производительность по площади «*A*»:

$$A = v \cdot w; (1)$$

Массовая производительность «*M*» (покрытая масса в единицу времени)

$$M = \rho_k \cdot A \cdot h; (2)$$

В поточном режиме массовый расход осаждаемого порошка «*m_{o/n}*»

$$m_{o/n} = \rho_k \cdot v \cdot w \cdot h; (3)$$

Производительность (П) также связывают с массовым расходом порошка и эффективностью нанесения:

$$П = \frac{m_{o/n}}{\rho_c} = \frac{\eta \cdot m_{p/n}}{\rho_c}; [м^3/с], (4),$$

где «*m_{o/n}*» — массовый расход осаждаемого порошка, «*m_{p/n}*» — массовый расход распыленного порошка.

а часто в единицах площади:

$$П = v \cdot w; (5) .$$

КПД переноса η : определяется отношением массы порошка, осевшего на деталь («*m_{o/n}*»), к массе поданного порошка («*m_{p/n}*). Формально

$$\eta = \frac{m_{o/n}}{m_{p/n}}; (6)$$

Высокий КПД означает, что большая доля порошка попадает на деталь. Типовые значения η для электростатического напыления составляют 60–90%.

Связь расходов: откуда следует

$$m_{p/n} = \frac{m_{o/n}}{\eta}; (7)$$

Остаток порошка «*m_{ост}*»:

$$m_{ост} = (1 - \eta) \cdot m_{p/n}; (8)$$

составляет *переулет*.

Потери и рекуперация: часть переулета теряется (попадает в фильтр и пылесборник), а часть возвращается в цикл (рециркулируется в бункер). Пусть *R* — коэффициент рекуперации (доля переулета, которая возвращается в процесс). Тогда эффективный расход порошка из бункера «*m_{исп}*»:

$$m_{исп} = m_{o/n} + (1 - R) \cdot m_{ост}; (9)$$

При *R*=1 (полная рекуперация) расход «*m_{исп}*» равен «*m_{o/n}*». При *R*=0 весь переулет «*m_{ост}*» считается потерянным. Таким образом, реальный расход учитывает возвратную часть: каждую единицу неосажденного порошка возвращает возможность уменьшить потребление материалов. На практике системы рекуперации улавливают большую часть переулета.

Массовый баланс порошка (камера):

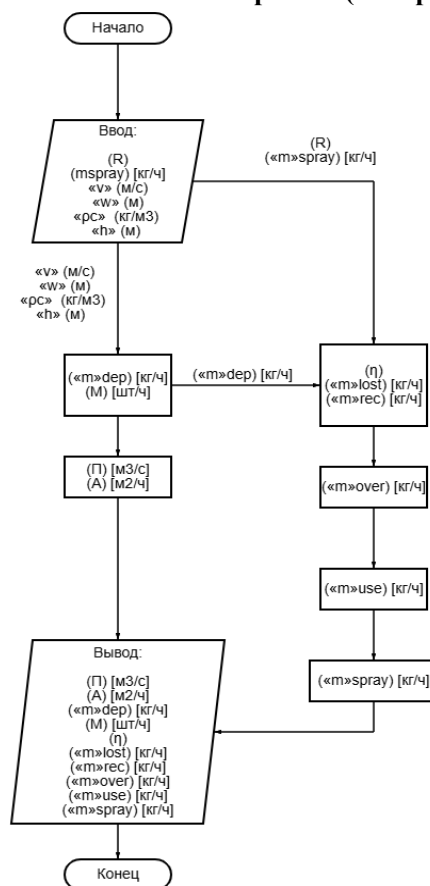


Рис. 1. Блок-схема реализации модели.

Где, m_{spray} – массовый расход распыленного порошкового ЛКМ, m_{dep} – массовый расход осажденного порошка, v – скорость движения конвейера, ρ_c – плотность ЛКМ, R – коэффициент рекуперации, w – ширина захвата пистолета, h – толщина слоя покрытия, A – теоретическая производительность по площади, M – массовая производительность, Π – производительность, m_{lost} – массовый расход потерянного ЛКМ, m_{rec} – массовый расход рекуперированного ЛКМ, m_{use} – эффективный расход ЛКМ, m_{over} – остаток ЛКМ, η – КПД переноса. Массовый баланс порошка (камера):

$$\dot{m}_{p/n} = \dot{m}_{o/n} + \dot{m}_{пот} + \dot{m}_{рек}; \quad (10)$$

Где « $\dot{m}_{o/n}$ » – массовый расход осажденного порошка, « $\dot{m}_{p/n}$ » – массовый расход распыленного порошка, « $\dot{m}_{пот}$ » – потери, « $\dot{m}_{рек}$ » – рекуперированный порошок.

$$\dot{m}_{пот} = (1 - R) \cdot (\dot{m}_{p/n} - \dot{m}_{o/n}); \quad (11)$$

– потери (выброс в отходы),

$$\dot{m}_{рек} = R \cdot (\dot{m}_{p/n} - \dot{m}_{o/n}); \quad (12)$$

– возвращенный порошок. В стационарном режиме сумма входящих расходов (порошок из бункера) равна сумме исходящих (осаженный + потерянный + возвращенный).

Данная модель позволяет в ручном режиме изменять переменные, демонстрирует их влияние на интенсивность процесса и дает возможность оценить полезное или деструктивное воздействие на выбранные показатели эффективности процесса нанесения ЛКМ.

Заключение

Разработанная технико-экономическая математическая модель интенсификации процесса порошковой окраски представляет собой комплексную инструментальную платформу для анализа и оптимизации ключевых параметров производственного цикла. В основе модели лежит система взаимосвязанных уравнений и алгоритмов, описывающих динамику технологического процесса, распределение материальных и трудовых ресурсов, а также влияние факторов внешней среды на качество покрытия.

Применение данной модели позволяет продемонстрировать эффект от внедрения мероприятий по интенсификации, выражающийся в трёх взаимосвязанных показателях. Во-первых, отмечается снижение себестоимости единицы продукции за счёт рационализации использования порошковых составов и оптимизации режимов нанесения. Во-вторых, реализуется повышение производительности труда и оборудования за счёт сокращения простоев и увеличения пропускной способности линий. Наконец, в-третьих, улучшаются

экологические показатели за счёт уменьшения потерь материала и снижения выбросов в атмосферу, что способствует соответствию современным экологическим стандартам и повышает степень устойчивости производственной системы.

Данная технико-экономическая математическая модель может быть использована в качестве обоснованного научно-практического инструмента при формировании инвестиционных проектов и стратегическом планировании модернизации технологической базы. С её помощью заинтересованные стороны получают возможность проводить прогнозирование экономического эффекта в денежном выражении, оценивать сроки окупаемости, а также моделировать сценарии развития предприятия при различных условиях финансирования и государственно-правового регулирования.

В контексте современных тенденций цифровизации и перехода к индустрии 4.0 модель выполняет функцию связующего звена между научно-исследовательской и производственной деятельностью, обеспечивая устойчивость инновационного развития предприятий и формирование конкурентных преимуществ на внутреннем и внешнем рынках. Такой подход требует междисциплинарного взаимодействия специалистов в области процессов аддитивного производства, прикладной математики и экономического анализа, что придаёт дополнительную ценность разработанной модели и способствует её внедрению в широкий спектр отраслевых приложений.

Список литературы:

1. Болдырев В.С., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Кузнецов С.В., Колыбанов К.Ю. Технологическо-организационный инжиниринг окрасочных производств // Теоретические основы химической технологии. 2020. Т. 54, № 3. С. 299–303.
2. Богомолов Б.Б., Болдырев В.С., Зубарев А.М., Мешалкин В.П., Меньшиков В.В. Интеллектуальный логико-информационный алгоритм выбора энергоресурсоэффективной химической технологии // Теоретические основы химической технологии. 2019. Т. 53, № 3. С. 483–492.
3. Мешалкин В.П. Основы интенсификации и ресурсоэнергоэффективности химико-технологических систем. Смоленск: ООО «Принт-экспресс», 2021. 442 с.
4. Дорохов И.Н., Меньшиков В.В. Системный анализ процессов химической технологии. Интеллектуальные системы и инженерное творчество в задачах интенсификации химико-технологических процессов и производств. М.: Наука, 2005. 582 с.

5. Болдырев В.С., Кузнецов С.В., Меньшиков В.В. Инновационное развитие малотоннажных научно-производственных предприятий лакокрасочной отрасли. М.: Пэйнт-Медиа, 2021. 184 с

6. Болдырев В.С., Меньшиков В.В., Богомоллов Б.Б., Аверина Ю.М., Зубарев А.М. Анализ организационно-технологического инжиниринга энергоресурсоэффективных экологически

безопасных малотоннажных лакокрасочных производств // Химическая технология. 2021. Т. 22, № 4. С. 183–192.

7. Пигас А. В. Сравнительный анализ порошковых лакокрасочных материалов. / А. В. Пигас, О. В. Зверева, С. Я. Покровский // Успехи в химии и химической технологии. - 2024. - Т38, №12. - С. 142-144

УДК 544.777

Скобникова Д.Д., Уварова А.А., Меньшуткина Н.В.

Гемостатические гели на основе хитозана

Скобникова Дарья Денисовна – студент группы К-47; e-mail: skobnicova1@gmail.com

Уварова Анастасия Анатольевна – аспирант 3-го года обучения кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, ассистент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга; e-mail: uvarova.a.a@muctr.ru

Меньшуткина Наталья Васильевна – д.т.н., заведующий кафедрой химического и фармацевтического инжиниринга; e-mail: menshutina.n.v@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены современные методы получения гемостатических гелей на основе хитозана с добавлением различных сшивающих агентов и этанола, исследование их реологических свойств. Основной задачей данного исследования являлось экспериментальное получение гемостатического геля, устойчивого к низким температурам.

Ключевые слова: гемостатические гели, хитозан, триполифосфат натрия, этанол, реологические исследования.

Hemostatic gels based on chitosan

Skobnikova D.D., Uvarova A.A., Menshutina N.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses modern methods for producing hemostatic gels based on chitosan with the addition of various crosslinking agents and ethanol, as well as the study of their rheological properties. The main purpose of this study was the experimental production of a hemostatic gel resistant to low temperatures.

Key words: hemostatic gels, chitosan, sodium tripolyphosphate, ethanol, rheological studies.

Введение

Кровопотеря остается одной из основных причин смерти при травмах. Летальность от кровопотери при травмах составляет от 14 до 60 %. В 90% случаев кровопотеря является основной причиной смерти военнослужащих, именно неконтролируемая кровопотеря становится причиной гибели военнослужащих и спасателей в удаленных регионах. В Арктической зоне эти риски усугубляются рядом факторов: сложные климатические условия, ограниченная медицинская инфраструктура, риск вторичных инфекций из-за замедленной регенерации тканей в условиях гипотермии.

В период с 2015 по 2020 годы объем закупок местных гемостатических средств в Российской Федерации увеличился в 5 раз. Наибольшую долю рынка занимают местные гемостатические средства на основе минеральных веществ, таких как каолин и цеолит. Однако в экстремальных условиях, например, при пониженных температурах, традиционные гемостатические средства часто оказываются неэффективными. В период последних лет наблюдается рост интереса к созданию современных ранозаживляющих материалов. Это можно объяснить возможностью создавать медицинские изделия с определенными медико-биологическими свойствами, созданием новых материалов для решения актуальных задач, возможностью использовать биологически активные соединения, обладающие высокой регенерирующей способностью и отсутствием токсических эффектов. На данный момент ведется большое количество исследований в области регенеративной медицины, в том числе разработки гемостатических и ранозаживляющих медицинских изделий. В качестве сырья для таких материалов могут выступать природные

полисахариды, например хитозан. В последние годы он привлекает большой интерес ученых и является одним из наиболее изученных биополимеров. Благодаря наличию большого количества свободных amino- и гидроксильных групп в структуре, хитозан обладает уникальными физико-химическими свойствами: способностью легко образовывать поликатионные соединения, пленкообразующей способностью, хорошей адгезией, биосовместимостью, нетоксичностью [1]. За счет того, что хитозан обладает антибактериальной, противогрибковой и противоопухолевой активностью, он может рассматриваться как эффективный материал для медицинского применения.

В данной работе исследовались современные подходы к разработке гемостатических материалов на основе хитозана, обладающих высокой биосовместимостью и эффективностью при остановке кровотечений. В качестве объекта изучения была выбрана перспективная лекарственная форма – гель. Благодаря адгезивным свойствам и способности заполнять раневые полости данная композиция является подходящим вариантом для обработки сложных анатомических зон. Актуальность исследования обусловлена необходимостью создания материалов, сочетающих гемостатическую активность с удобством клинического применения и возможностью применения в условиях экстремальных пониженных температур.

Экспериментальная часть

Исследование направлено на разработку методики и подбор состава эффективного материала, пригодного для применения в экстренной медицине и хирургии. В ходе экспериментальной работы было рассмотрено несколько различных методик

получения гелей на основе хитозана, устойчивых к низким температурам.

На Рисунке 1 представлена схема получения гелей согласно разработанным методикам.

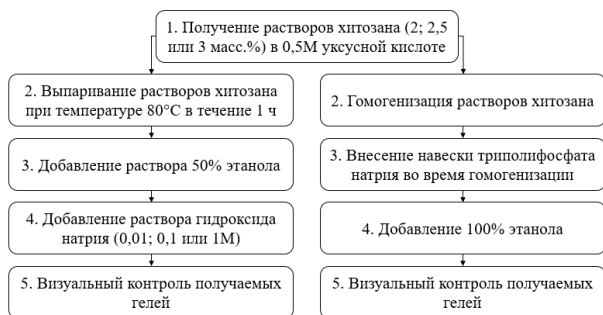


Рис.1. Схема получения гемостатических гелей

В данной работе гели на основе хитозана были получены при добавлении сшивающих агентов (гидроксид натрия (NaOH), триполифосфата (ТПФ) натрия). Процесс включает несколько стадий, направленных на формирование стабильных гелей. В ходе экспериментов было исследовано влияние концентрации растворов хитозана (2; 2,5 и 3 масс.%), типа и концентрации добавляемого сшивающего агента и раствора этанола на конечные свойства образцов.

Способ получения гемостатических гелей путем выпаривания при добавлении раствора NaOH

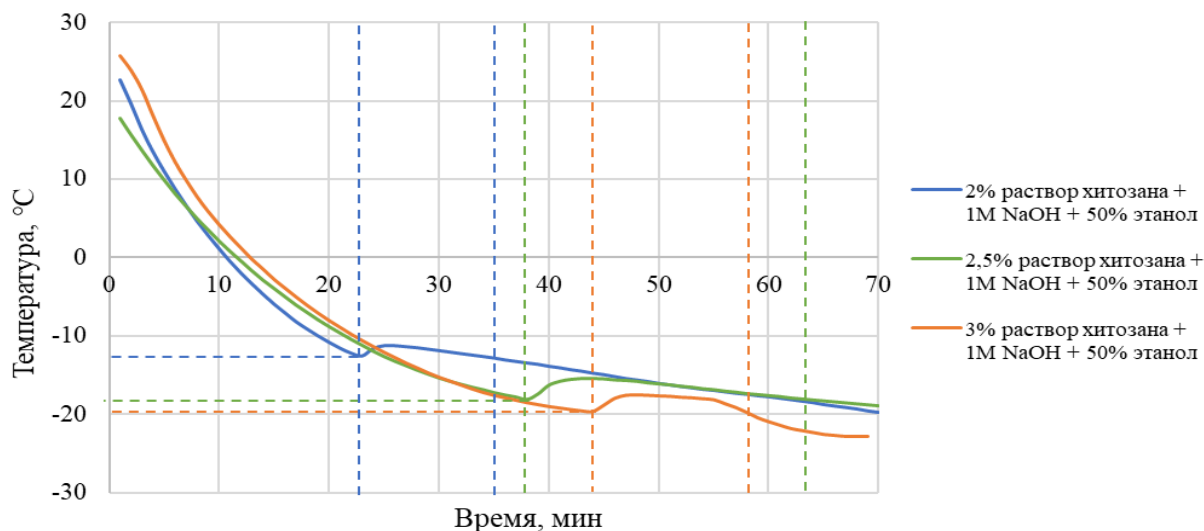


Рис.2. Кинетика заморозки образцов гелей с различной концентрацией раствора хитозана

Полученные зависимости можно разделить на три явно выраженных участка: первый участок характеризует процесс охлаждения образца от начальной температуры до криоскопической. Чем быстрее отводится теплота, тем круче линия графика. На втором участке температура понижается очень медленно (или даже постоянна), этот участок характеризует процесс массовой кристаллизации воды в образце, длина и наклон линии на этом участке зависят от интенсивности теплоотвода. Третий участок характеризует изменение температуры после перехода основной части несвязанной воды в

В ходе реализации первой методики предварительно получали растворы хитозана различных концентраций путем внесения навесок порошка хитозана в 0,5 М раствор уксусной кислоты и выдерживании при перемешивании в течение 24 часа. Далее проводилось выпаривание при температуре 80°C при перемешивании со скоростью 850 об/мин в течение 1 часа. После выпаривания к каждому раствору добавляли 10 мл 50% этанола. Объемное соотношение раствора хитозана к раствору этанолу составило 1 к 1. Было проведено варьирование концентрации добавляемого раствора NaOH (0,01; 0,1 и 1 М). На основании экспериментов был сделан вывод о том, что затрачиваемый объем NaOH с концентрациями 0,01 и 0,1 М оказался слишком большим, что приводило к сильному разбавлению раствора хитозана и потере вязкоупругих свойств. Поэтому дальнейшие исследования проводились при использовании 1 М раствора гидроксида натрия.

Для экспериментальной оценки температуры начала кристаллизации полученных образцов с 1 М NaOH были сняты температурные кривые заморозки при -26°C. Эксперимент проводился по разработанной методике, приведенной в работе [2]. Полученные кривые заморозки представлены на Рисунке 2.

кристаллическое состояние. По результатам исследования была определена температура начала кристаллизации, $T_{кр}$, для каждого из рассматриваемых образцов: $T_{кр}$ для 2 масс.% раствора составила -12°C, $T_{кр}$ для 2,5 масс.% раствора — -18°C, $T_{кр}$ для 3 масс.% раствора — -20°C. Исходя из полученных графиков был сделан вывод о том, что во всех трех рассматриваемых образцах с 50% раствором этанола образовались кристаллы льда, в результате чего итоговый образец мог потерять реологические свойства. Для проведения дальнейших исследований концентрация используемого этанола была увеличена

для понижения температуры начала кристаллизации гелей.

Способ получения гемостатических гелей при добавлении сшивающего агента при гомогенизации

В ходе осуществления второй методики работа проводилась при аналогичных концентрациях раствора хитозана в 0,5 М растворе уксусной кислоты. К каждому раствору добавляли 100% этанол. Объемное соотношение раствора хитозана к этанолу составило 2 к 1. Концентрация этанола в данной методике была увеличена ввиду необходимости понижения температуры начала кристаллизации образцов. Было проведено варьирование концентрации добавляемых навесок ТПФ натрия. Для равномерного распределения компонентов в образцах перемешивание проводилось с использованием гомогенизатора «Stegler DG-360». В ходе исследования были рассмотрены концентрации ТПФ натрия 0,5; 1; 1,5 и 2 масс.%. В результате визуальной оценки полученных образцов

был сделан вывод о том, что при использовании концентраций ТПФ натрия 1,5-2 масс.% происходит локальная сшивка геля, который в процессе диспергирования разбивается на мелкие агломераты. При использовании концентрации ТПФ натрия 0,5 масс.% структура полученного геля является однородной. Поэтому была проведена дополнительная серия экспериментальных исследований с меньшим шагом изменения концентраций ТПФ натрия в диапазоне до 1 масс.%, а именно 0,2; 0,4; 0,6 и 0,8 масс.%. Образцы с концентрацией ТПФ натрия 0,8 масс.% оказались наиболее перспективными для проведения дальнейших аналитических исследований.

Для образцов была снята кинетика заморозки образцов гелей. Полученные кинетические кривые заморозки представлены на Рисунке 3.

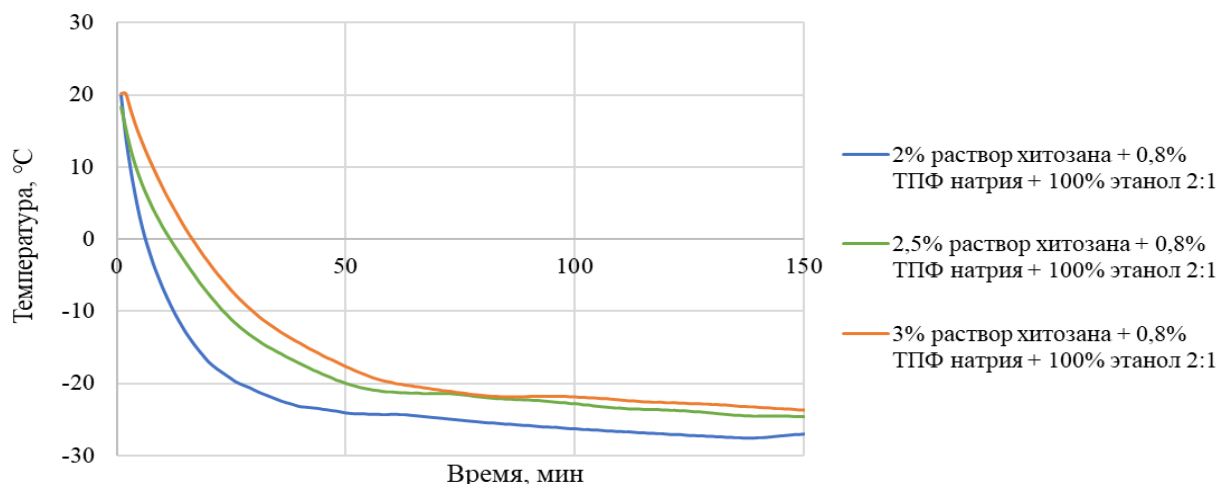


Рис.3. Кинетика заморозки образцов гелей с различной концентрацией раствора хитозана и концентрацией ТПФ натрия 0,8 масс.%

Исходя из полученных графиков был сделан вывод о том, что во всех трех рассматриваемых образцах не произошла кристаллизация большей доли воды. Увеличение концентрации раствора хитозана рассматриваемых образцов прямо пропорционально влияет на время их охлаждения. Предположительно, образцы не изменили свои свойства и при температуре -26°C остались пригодными для дальнейшего применения. Однако только на основании данных о кинетике заморозки нельзя с точностью сделать вывод о сохранении значения вязкости получаемых гелей. Данный параметр является одним из основных для подтверждения тиксотропных свойств, так как одним из наиболее удобных способов упаковки гемостатических гелей являются пластиковые и алюминиевые тубы, поэтому были проведены аналитические исследования реологических свойств полученных образцов.

Исследование реологических свойств полученных образцов

Анализ проводилось с помощью реометра «SmartPave 102e» на кафедре химического и фармацевтического инжиниринга. В ходе анализа было проведено

исследование значений вязкости при постоянных температурах -25°C при скорости сдвига 1 с^{-1} (I период, с 0 с до 200 с) и 25°C при скорости сдвига 1 с^{-1} (III период, с 400 с до 600 с), а также исследование изменения вязкости при постепенном увеличении температуры от -25°C до 25°C (линейный рост температуры, $1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$) (II период, с 200 с до 400 с). Полученные графики представлены на Рисунке 4. Полученные графики можно разделить на 3 явно выраженных периода: значения вязкости при -25°C (I период), изменение вязкости при постепенном увеличении температуры (II период), значения вязкости при 25°C (III период).

Исходя из полученных графиков можно сделать вывод, что с уменьшением концентрации хитозана значение вязкости соответственно уменьшается. В I периоде наблюдаются колебания значений вязкости для образцов с 2 масс.% и 2,5 масс.% раствором хитозана, что может быть связано с присутствием в структуре частиц или кристаллов льда. Анализируя II период, можно отметить, что на начальном этапе повышения температуры (от -25°C до -10°C) наблюдается резкое снижение вязкости, связанное

предположительно с разрушением льда в структуре. При дальнейшем повышении температуры зависимость становится линейной, что особенно выражено для образца с 3 масс.% раствором хитозана, что свидетельствует об установлении условно-

равновесного состояния системы. Это связано с тем, что при более высоких концентрациях полимера требуется больше времени и энергии для достижения устойчивого режима течения.

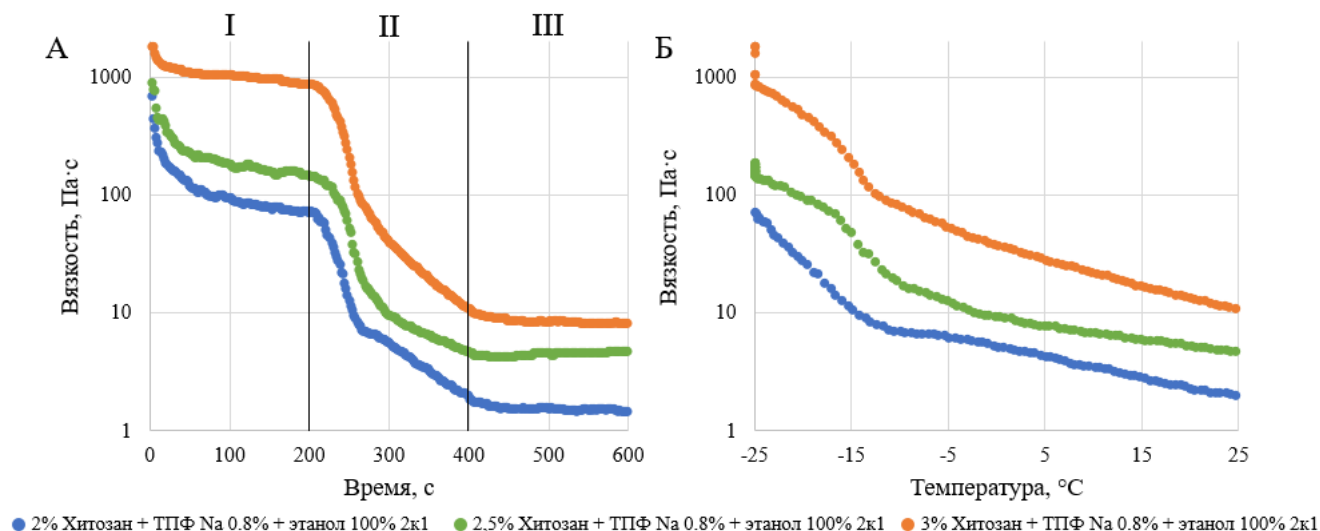


Рис. 4. График изменения вязкости образцов в разных температурных диапазонах: (А) – значения вязкости во время проведения анализа, (Б) – изменение вязкости при изменении температуры

Таким образом, предпочтительным образцом для дальнейших исследований является раствор с 3 масс.% концентрацией раствора хитозана. Увеличение концентрации полимера позволяет сохранить ранозаживляющие свойства гемостатических гелей и обеспечить необходимое качество получаемых образцов.

Заключение

Хитозан демонстрирует высокий потенциал при получении гемостатических и ранозаживляющих средств благодаря своей биосовместимости, антибактериальной активности и способности к контролируемому высвобождению активных компонентов. Гемостатические гели на основе хитозана сочетают механическую защиту раневой поверхности с пролонгированным терапевтическим действием, что особенно актуально для экстренной медицины и военной хирургии. Разработанные

материалы могут стать альтернативой традиционным гемостатическим изделиям на основе каолина и цеолита, особенно в условиях, требующих устойчивости к экстремально низким температурам.

Список литературы

1. Guibal E. Interactions of metal ions with chitosan-based sorbents: a review // Sep Purif Technol. – 2004. – V. 38. – I. 1. – P. 43–74.
2. Мохова Е. К. Интенсификация и моделирование вакуумной сублимационной сушки материалов различной структуры (на примере биополимерных матриц и суспензий) : специальность 2.6.13 «Процессы и аппараты химических технологий» : Диссертация на соискание кандидата технических наук / Мохова Е. К., Гордиенко, М. Г. ; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева». — Москва, 2024. — 241 с.

УДК 544.774.2

Ходарева М.Д., Мочалова М.С.

Разработка алгоритма расчета процесса ступенчатой замены растворителя в частицах хитозанового геля

Ходарева Мария Дмитриевна – студент группы К-47; Khodareva111@gmail.com.

Мочалова Мария Сергеевна – к.т.н., младший научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье описан алгоритм расчета ступенчатой замены растворителя в каскаде аппаратов идеального смешения с сепараторами, который предназначен для расчета материального баланса процесса ступенчатой замены растворителя в частицах геля хитозана. На базе алгоритма разработан программный модуль, осуществляющий расчет материальных потоков при различной компоновке технологической схемы, производительности, при варьировании прочих параметров процесса. Данный подход, создает перспективу для осуществления ресурсосбережения в рамках получения частиц хитозановых аэрогелей как на лабораторном, так и на промышленном уровне.

Ключевые слова: алгоритм, программный модуль, ступенчатая замена растворителя, хитозановый гель.

Development of an algorithm for calculating the process of stepwise solvent exchange in chitosan gel particles

Khodareva M.D., Mochalova M.S.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article describes an algorithm for calculating stepwise solvent exchange in a cascade of ideal mixing vessels with separators. This algorithm is designed for calculating the material balance of the solvent exchange process in chitosan gel particles. Based on the algorithm, a software module has been developed that calculates material flows for different process flow configurations, production capacities, and other variable process parameters.

Key words: algorithm, software module, stepwise solvent exchange, chitosan gel.

Введение

Хитозан является вторым по распространенности полисахаридом, полученным из биомассы на Земле, он имеет низкую стоимость, но при этом является экологически чистым, гидрофильным, обладает высокой биосовместимостью, биоразлагаемостью и антибактериальной активностью [1]. Поэтому хитозановые аэрогели являются высокоэффективными биосовместимыми, биodeградируемыми и нетоксичными материалами, которые обладают высокой площадью удельной поверхности, малым размером пор, высокой пористостью, высокой сорбционной емкостью и низкой плотностью и могут быть использованы в ряде применений [2]. Процесс получения хитозановых аэрогелей состоит из следующих этапов: подготовка исходных растворов, формирование геля хитозана, замена растворителя и сверхкритическая сушка [3].

Процесс ступенчатой замены растворителя в порах хитозановых аэрогелей является необходимой, но крайне ресурсозатратной стадией [4]. Данный этап необходим для подготовки материала к последующей сверхкритической сушке. В научно-технической литературе представлены подходы по оптимизации данного процесса с точки зрения временных затрат, например, замена растворителя под давлением или использование осушителей [5]. Однако данные подходы характеризуются высокими энергетическими или ресурсными затратами. Поэтому разработка концепции ресурсосберегающего процесса ступенчатой замены растворителя является особенно актуальным для создания технологии производства частиц и микрочастиц хитозановых аэрогелей.

Расчетная часть

Для расчета материального баланса процесса ступенчатой замены растворителя в частицах геля хитозана был разработан алгоритм, на базе которого разработан программный модуль на языке программирования Python, осуществляющий расчет материальных потоков при различной компоновке технологической схемы, различной производительности этой схемы, при варьировании прочих параметров процесса. Расчет проводится итерационным методом. В данном методе при наличии рециклов создается итерационная схема, значения которой получаются замещением величин, рассчитанных при предыдущем просчете схемы.

В рамках расчета не учитывается кинетика процесса ступенчатой замены растворителя. Исходя из экспериментальных данных, максимальное время пребывания частиц в аппарате при перемешивании для достижения равновесия равно 60 минутам. Время сепарирования и разбавления потоков бралось равным 30 минутам. Предполагается, что температура и давление процесса постоянно, а режим работы установки периодический. Результатом расчета является материальный баланс каскада аппаратов с сепараторами при заданных параметрах в установившемся режиме.

Далее представлен порядок работы алгоритма.

1. Задаются начальные данные процесса и необходимые в ходе расчета параметры: количество аппаратов (N), производительность установки (V_g , м³/ч), доля частиц геля в смеси (α), массовый расход изопропанола ($G_{ИПС}$, кг/ч), массовая доля изопропанола на входе в каскад (C_N^{S2}), фиксируются требующиеся массовые доли ИПС на отдельных ступенях каскада аппаратов (C_i^B).

2. Рассчитывается массовая концентрация изопропанола (ИПС) в i -ом аппарате с учетом входных потоков по формуле:

$$C_i^A = \frac{C_{i-1}^{S1} * G_{i-1}^{S1} + C_{i+1}^{S2} * G_{i+1}^{S2}}{G_{i-1}^{S1} + G_{i+1}^{S2}} \quad (1)$$

где C_i^A – массовая доля ИПС в i -ом аппарате, масс.%; C_{i-1}^{S1} – массовая доля ИПС в $i-1$ сепараторе; C_{i+1}^{S2} – массовая доля ИПС в $i+1$ сепараторе; G_{i-1}^{S1} –

массовый расход смеси, подающейся из предыдущего сепаратора, кг/ч; G_{i+1}^{S2} – массовый расход смеси, подающейся из следующего сепаратора, кг/ч. Схематическое обозначение потоков представлено далее (рис.1). После того как потоки, обозначенные индексами S1 и S2, поступают в аппарат идеального смешения, смесь выдерживается 60 минут при закрытых вентилях.

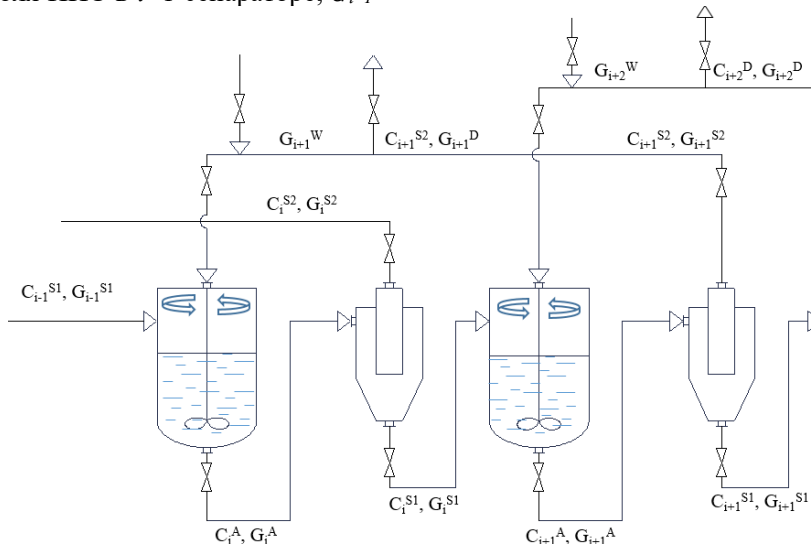


Рис.1. Обозначение потоков при расчете каскада аппаратов

Массовый расход смеси в i -ом аппарате рассчитывается по формуле:

$$G_i^A = G_{i-1}^{S1} + G_{i+1}^{S2} \quad (2)$$

где G_i^A – массовый расход смеси в i -ом аппарате, кг/ч; G_{i-1}^{S1} – массовый расход смеси, подающейся из сепаратора на $i-1$ шаге, кг/ч; G_{i+1}^{S2} – массовый расход смеси, подающейся из следующего сепаратора на $i+1$ шаге, кг/ч.

Затем вентили на выходе из аппарата идеального смешения открывают, и поток смеси, обозначенный индексом A, поступает в сепаратор, где разделяется на потоки S1 и S2. Если концентрация потока S2 из $i+1$ сепаратора слишком высокая для достижения необходимой концентрации в i -ом аппарате, то происходит слив потока S2 с массовым расходом, обозначенным индексом D, и разбавление потока водой с массовым расходом, обозначенным индексом W. Расчет материального баланса разбавления потока проводится по формуле:

$$G_{i+1}^D = \frac{(C_i^A - C_i^B) * G_i^A}{G_{i+1}^{S2}} = G_{i+1}^W \quad (3)$$

где G_{i+1}^D – массовый расход смеси из сепаратора $i+1$ с массовой долей ИПС C_{i+1}^{S2} , который сливают из системы, кг/ч; C_i^B – фиксированная массовая доля ИПС в i -ом аппарате; G_{i+1}^W – массовый расход воды для разбавления потока из $i+1$ сепаратора, кг/ч.

3. Расчет материального баланса потоков, идущих из i -го сепаратора в $i+1$ и $i-1$ аппараты, осуществляется по уравнениям:

$$G_i^{S1} = \frac{V_g}{\alpha} * \rho_i \quad (4)$$

$$G_i^{S2} = \frac{V_g}{1 - \alpha} * \rho_i \quad (5)$$

$$C_i^{S1} = C_i^{S2} = C_i^A \quad (6)$$

где ρ_i – плотность смеси на i -ом шаге, кг/м³; α – объемная доля геля в смеси; V_g – объемный расход частиц геля, м³/ч.

4. Итерационный расчет материального баланса каскада аппаратов ведется до выполнения условия сходимости значений между итерациями. По итогам расчета материальный баланс выводится на экран, а также строится график изменения концентрации спирта внутри каскада аппаратов.

5. Рассчитывается рекомендуемый рабочий объем по формуле:

$$V_i = \left(\frac{G_i^A}{\rho} \right) * 1000 * \tau \quad (7)$$

где V_i – рабочий объем i -го аппарата, л; G_i^A – массовый расход смеси в i -ом аппарате; ρ – плотность смеси на i -ом шаге, кг/м³; τ – время пребывания в аппарате, ч.

6. На экран выводится значение, соответствующее наибольшему рассчитанному рабочему объему аппарата.

7. Окончание расчета.

Схематичное изображение примера расчета материального баланса каскада аппаратов приведено далее (рис.2). Входные данные расчета: производительность частиц геля 1.94 л/ч, количество аппаратов – 5, объемная доля частиц геля в смеси составила 0.2, отношение объемного расхода спирта к объемному расходу частиц геля 4 м³/м³, время пребывания в аппарате составило 60 минут, а время на сепарирование и разбавление потоков составило 30 минут.

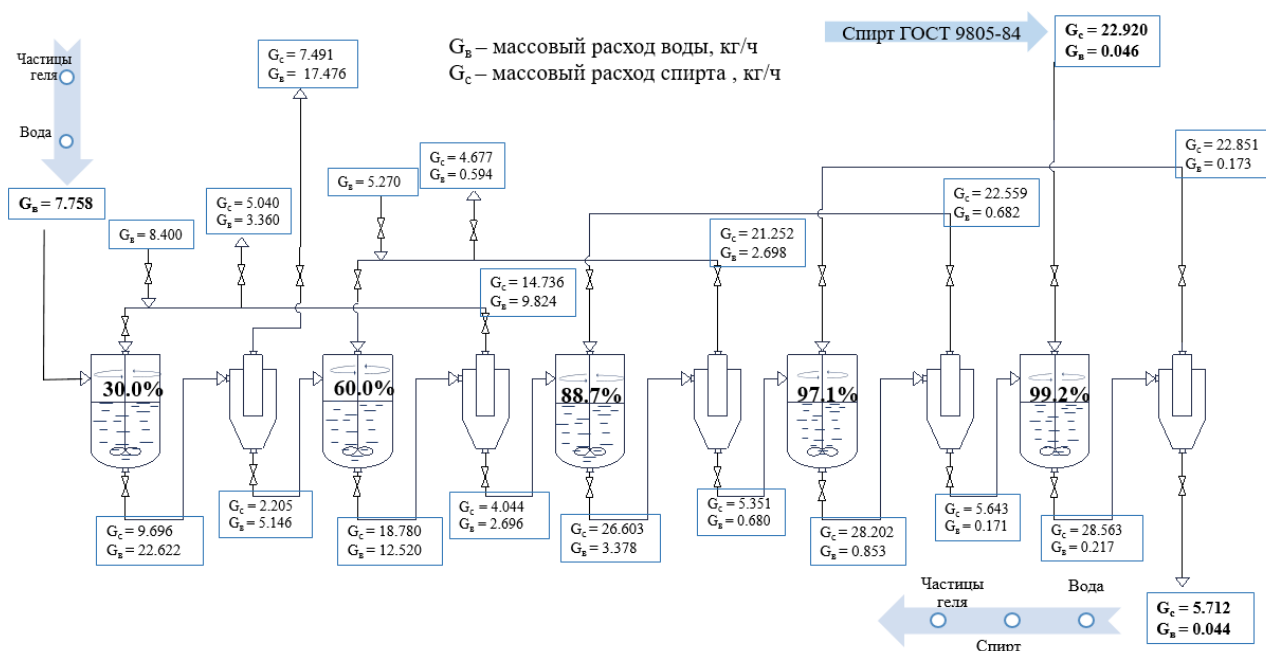


Рис.2. Результаты расчета материального баланса для каскада аппаратов при замене растворителя

При расчете были зафиксированы концентрации 30 и 60 масс.% на 1 и 2 аппаратах соответственно. Полная сходимость материального баланса установки позволяет сделать вывод о достаточно высокой

точности. Полученный расчет сравнивался с расчетом системы при идентичных параметрах, но без рекуперации изопропанола. Результаты сравнения приведены далее (Таблица 1).

Таблица 1. Результаты сравнения затрат на процесс в каскаде аппаратов с рекуперацией и без

Тип каскада аппаратов	Массовый расход ИПС, кг/ч	Массовый расход воды, кг/ч	Стоимость затрат на сырье, руб/ч
Без рекуперации ИПС	124.066	31.094	62 812.26
С рекуперацией ИПС	22.920	21.428	12 388.15

Таким образом, благодаря данному подходу возможно снизить денежные затраты на изопропанол на 80%, что снизит общую стоимость процесса ступенчатой замены растворителя и повысит его ресурсосбережение.

Заключение

Разработка данного подхода, в частности, алгоритма для расчета материального баланса при осуществлении этапа ступенчатой замены растворителя, создает перспективу для осуществления ресурсосбережения в рамках процесса получения частиц хитозановых аэрогелей как на лабораторном, так и на промышленном уровне. Таким образом, создание данного алгоритма является важным этапом для осуществления практических исследований данного процесса на полупромышленном и промышленном уровнях.

Список литературы

1. El-Aidie S. A Review on Chitosan: Ecofriendly Multiple Potential Applications in the Food Industry //

- International Journal of Advancement in Life Sciences Research. 2018. Vol. 1, № 1. P. 1–14.
2. Huang X. et al. Using absorbable chitosan hemostatic sponges as a promising surgical dressing // Int J Biol Macromol. 2015. Vol. 75. P. 322–329.
3. Lovskaya D. et al. Chitosan-Based Aerogel Particles as Highly Effective Local Hemostatic Agents. Production Process and In Vivo Evaluations // Polymers (Basel). 2020. Vol. 12, № 9. P. 2055.
4. Smirnova I., Gurikov P. Aerogel production: Current status, research directions, and future opportunities // The Journal of Supercritical Fluids. 2017. Vol. 134. P. 228–233.
5. Lebedev A. et al. Investigation of Aerogel Production Processes: Solvent Exchange under High Pressure Combined with Supercritical Drying in One Apparatus: 1 // Gels. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. Vol. 7, № 1. P. 4.

УДК 004.42

Челнокова А.В., Аверина Ю.М., Рой К.О.

Автоматизация развертывания безопасной виртуальной инфраструктуры в промышленной среде

Челнокова Александра Витальевна – студент 2 курса магистратуры, кафедра 42 «Криптология и кибербезопасность», институт интеллектуальный кибернетических систем, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, Россия, Москва, Каширское шоссе, д. 31.

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н. заведующий кафедры логистики и экономической информатики,

Рой Ксения Олеговна – студент группы МТ-18 студент 1 курса магистратуры кафедры логистики и экономической информатики факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Roi.k.o@muctr.ru,

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены подходы к обеспечению надежности и безопасности виртуальной инфраструктуры с использованием технологий автоматизированного развертывания. Предложен метод автоматизации настройки клиентских и серверных решений, исключающий ошибки ручного вмешательства. Используются Ansible и Terraform для управления конфигурациями и инфраструктурой. Тестовый стенд реализован на VMware ESXi. Проанализированы преимущества и риски решения в контексте безопасности, с выявлением ключевых угроз в сетях на базе TCP/IP. Сделан вывод о повышении устойчивости ИТ-систем и снижении уязвимостей.

Ключевые слова: виртуализация, виртуальная инфраструктура, среда виртуализации, VMware ESXi, VMware vCenter, VMware vSphere

Automating the deployment of secure virtual infrastructure to the industrial environment

Chelnokova A.V.¹, Averina I.M.², Roy K.O.²

¹ National Research Nuclear University MPEI, Moscow, Russia

² D. I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses approaches to ensuring the reliability and security of virtual infrastructure using automated deployment technologies. A method for automating the configuration of client and server solutions is proposed, eliminating manual intervention errors. Ansible and Terraform are used to manage configurations and infrastructure. The test bench is implemented on VMware ESXi. The advantages and risks of the solution in the context of security are analyzed, with the identification of key threats in TCP / IP-based networks. A conclusion is made about increasing the stability of IT systems and reducing vulnerabilities.

Key words: virtualization, virtual infrastructure, virtualization environment, VMware ESXi, VMware vCenter, VMware vSphere

Введение

Современный этап развития информационных систем характеризуется экспоненциальным ростом объема данных, требующих высокопроизводительной обработки, что обуславливает критическую зависимость предприятий от вычислительных ресурсов. Ограниченная мощность персональных компьютеров, необходимость обеспечения безопасности и отказоустойчивости виртуальных сред, а также требования законодательства формируют ключевые вызовы для сетей в промышленной среде. Решение этих задач связано с активным внедрением технологий автоматизированного управления инфраструктурой, включая инструменты виртуализации и конфигурационного администрирования.

Особую актуальность приобретают вопросы минимизации рисков, связанных с человеческим фактором при ручном конфигурировании, и обеспечения безопасности данных в виртуальных средах. Несмотря на существующие разработки в области разграничения доступа и архитектурных решений для гипервизоров [1-5], сохраняется угроза нарушения целостности инфраструктуры из-за

ошибок настройки. Нормативные требования, такие как методические указания ФСТЭК [6-9], подчеркивают необходимость защиты систем виртуализации как для коммерческих, так и государственных организаций.

Целью работы является разработка метода автоматизированного развертывания виртуальной инфраструктуры предприятия, обеспечивающего повышение надежности, отказоустойчивости и информационной безопасности за счет устранения ошибок ручного вмешательства и реализации безопасного конфигурирования клиентских и серверных решений.

Экспериментальная часть

Реализация метода автоматизированного развертывания безопасной виртуальной инфраструктуры предполагает автоматизированное проектирование и конфигурирование виртуальной инфраструктуры предприятия с использованием современных инструментов управления. Ключевым элементом архитектуры являются виртуальные коммутаторы (ВК) уровня L2+, обеспечивающие взаимодействие виртуальных машин (ВМ) внутри локальной сети и интеграцию с внешними сетевыми ресурсами. Для организации сетевой топологии

предусмотрено создание двух ВК: первый (vSwitch0) обеспечивает доступ в глобальную сеть через физический интерфейс eth0, второй (vSwitch_local) — изолированную локальную среду для обмена данными между ВМ.

На рисунках 1 и 2 представлена схема развертываемой инфраструктуры. ВК vSwitch0, настраиваемый гипервизором VMware ESXi по умолчанию, связывает сервер ESXi и виртуальную машину Gateway, выполняющую функции маршрутизатора и DHCP-сервера. Подключение дополнительных ВМ к данному коммутатору допускается для устройств, требующих прямого доступа в интернет. ВК vSwitch_local обеспечивает взаимодействие внутренних компонентов: ВМ Gateway, vCenter (для администрирования ESXi), а также клиентских рабочих мест (VM1, VM2).

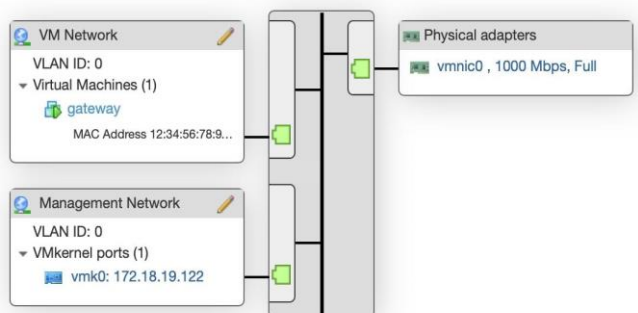


Рис. 1. Топология виртуального коммутатора с доступом к глобальной сети Интернет

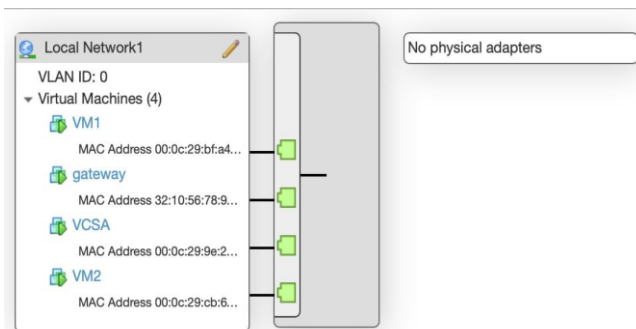


Рис. 2. Топология виртуального коммутатора без доступа к Интернету

Автоматизация конфигурации инфраструктуры реализована через Ansible-роли для настройки виртуального шлюза и сервера ESXi, а также Terraform-сценарии для управления внешними ресурсами. На рисунке 3 приведена блок-схема метода, включающая три этапа:

1. Создание виртуальной инфраструктуры (ВИ) с разделением сетевых зон.
2. Конфигурация ВМ, включая настройку безопасности (правила пакетного фильтра, трансляция сетевых адресов).
3. Организация резервного копирования (РК) для обеспечения отказоустойчивости.

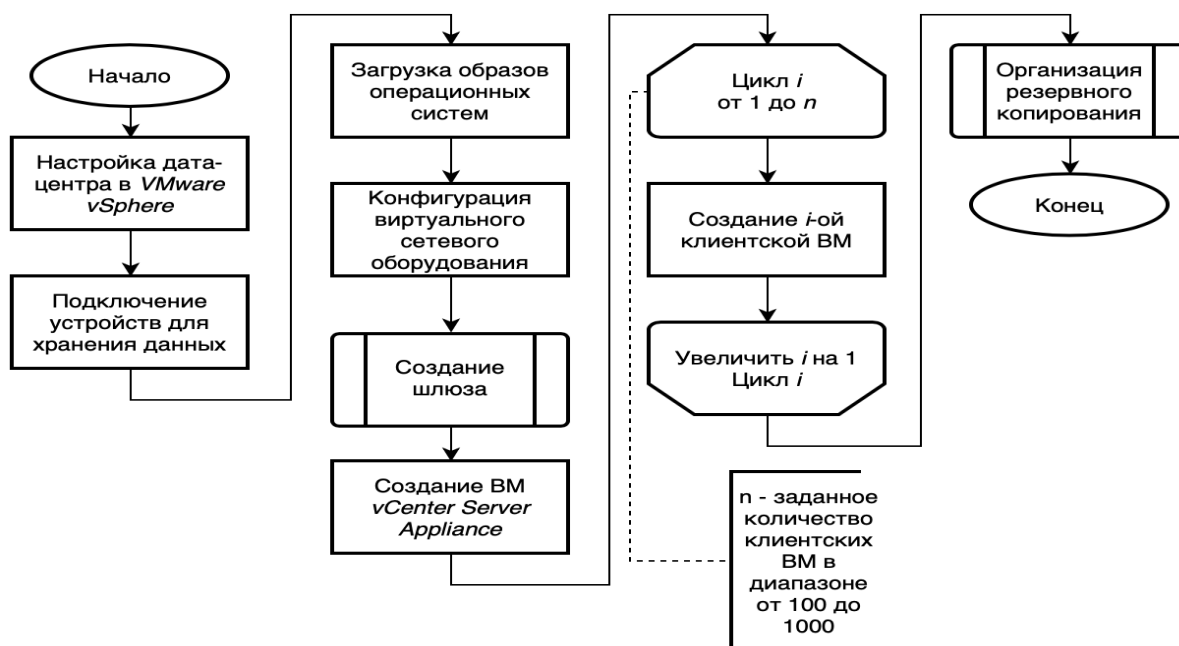


Рис. 3. Блок-схема метода развертывания безопасной виртуальной инфраструктуры

Подпрограмма «Создание шлюза», представленная на рисунке 4, детализирует процесс развертывания ВМ Gateway: настройку DHCP-сервера для локальной сети, внедрение механизмов фильтрации трафика и NAT для доступа в глобальную сеть. Резервное копирование выполняется путем создания зашифрованных копий ВМ с последующей передачей на специализированный сервер и

удалением устаревших данных для оптимизации хранилища.

Интеграция Ansible и Terraform обеспечивает:

- Минимизацию ошибок ручного конфигурирования за счет декларативного описания инфраструктуры.
- Повторяемость процессов развертывания и масштабируемость решений.

- Совместимость с существующими средами виртуализации на базе VMware ESXi.
- Централизованное управление сетевыми политиками и ресурсами через vCenter.



Рис. 4. Блок-схемы подпрограмм “Создание шлюза” и “Организация резервного копирования”

Данный подход позволяет снизить эксплуатационные риски и повысить безопасность данных за счет автоматизации процессов конфигурации и резервирования данных.

Проведенное исследование подтвердило эффективность предложенного метода автоматизированного развертывания виртуальной инфраструктуры. Тестовый стенд, включающий master-сервер, гипервизор VMware ESXi, VM Gateway и сервер резервного копирования, был успешно сконфигурирован с использованием Ansible-ролей и Terraform-сценариев. Взаимодействие компонентов осуществлялось через SSH-протокол, что обеспечило централизованное управление и мониторинг

состояния системы. Схема тестового стенда представлена на рисунке 5.

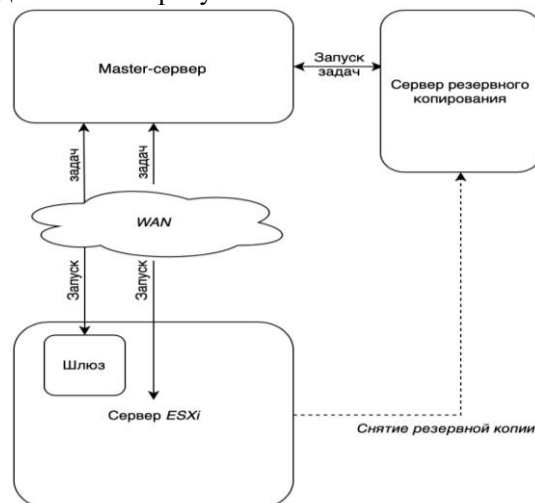


Рис. 5. Тестовый стенд развертываемой инфраструктуры

Ключевым этапом анализа стала проверка корректности кода и безопасности решения. Применение статического анализатора MegaLinter и фреймворка Molecule для модульного тестирования позволило:

- Выявить отсутствие критических уязвимостей в исходном коде Ansible-ролей и Terraform-конфигураций.
- Подтвердить изолированность тестируемых модулей и их соответствие заданным спецификациям.
- Обеспечить воспроизводимость процессов развертывания на всех этапах, включая настройку DHCP-сервера, фильтрацию трафика и резервное копирование.

Результаты, представленные на рисунках 6 и 7, демонстрируют, что автоматизация исключает ошибки ручного конфигурирования, характерные для традиционных подходов. Шифрование резервных копий и автоматическое удаление устаревших данных снизили риски утечек информации и обеспечили информационную безопасность виртуальных сред.

```
+ roles git:(mac_branch) * ansible-lint --project-dir esxi
WARNING: PATH altered to expand ~ in it. Read https://stackoverflow.com/a/44704799/99834 and correct your system configuration.
Passed with production profile: 0 failure(s), 0 warning(s) on 6 files.
```

Рис. 6. Результаты статического анализа

```
+ configure_gateway_vm git:(mac_branch) * molecule test

PLAY [Destroy] *****

TASK [Populate instance config] *****
ok: [localhost]

TASK [Dump instance config] *****
skipping: [localhost]

PLAY RECAP *****
localhost : ok=1 changed=0 unreachable=0 failed=0 skipped=1 rescued=0 ignored=0

playbook: /Users/aleksandranelnokova/ansible_project/roles/configure_gateway_vm/molecule/default/converge.yml

PLAY [Create] *****

TASK [Populate instance config dict] *****
skipping: [localhost]

TASK [Convert instance config dict to a list] *****
skipping: [localhost]

TASK [Dump instance config] *****
skipping: [localhost]

PLAY RECAP *****
localhost : ok=0 changed=0 unreachable=0 failed=0 skipped=3 rescued=0 ignored=0

PLAY [Converge] *****
```

Рис. 7. Результаты модульного тестирования

Таким образом, предложенный метод доказал свою применимость для сетей в промышленной среде, обеспечив надежность, отказоустойчивость и безопасность виртуальной инфраструктуры при минимальных эксплуатационных затратах.

Заключение

Современные решения для развертывания виртуальной инфраструктуры требуют автоматизации процессов конфигурирования и обеспечения безопасности. Разработанный в работе метод, основанный на применении инструментов Ansible и Terraform, позволяет устранить ошибки ручного вмешательства и стандартизировать создание защищенных виртуальных сред. Экспериментальная проверка, включающая статический анализ кода и модульное тестирование, подтвердила корректность и готовность решения к практическому использованию.

Предложенный подход повышает надежность и отказоустойчивость инфраструктуры за счет автоматизации настройки сетевых компонентов, резервного копирования и управления доступом. Его внедрение способствует снижению эксплуатационных рисков и обеспечению соответствия требованиям информационной безопасности, что делает метод актуальным для виртуальных промышленных сред.

Список литературы

1. Журов П.М. Особенности контроля взаимодействия клиента VMware vSphere 6.5 с vCenter // Вопросы защиты информации. - 2018. - № 3(122). - С. 31-34. 2. Ружанская А.А. Особенности разграничения доступа при управлении виртуальной инфраструктурой на базе гипервизора KVM // Вопросы защиты информации. - 2018. - № 2(121). - С. 25-29.

3. Переспелов А.В. и др. Применение технологии виртуализации для организации разграничения доступа // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. - 2021. - Т.34. - № 5. - С. 364-369.

4. Никольский, А. В. Защита облачных вычислений от атак на средства виртуализации: специальность 05.13.19 "Методы и системы защиты информации, информационная безопасность": диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Никольский Алексей Валерьевич. – Санкт-Петербург, 2013. – 148 с.

5. Меньшиков В.В., Аверина Ю.М., Зубарев А.М. Технологический маркетинг, коммерциализация и принципы реализации инноваций. учеб. пособие – М: РХТУ, 2017. –140 с

6. Документ ФСТЭК М. Методика оценки угроз безопасности информации //Утвержден ФСТЭК России. – 2021. – Т. 5.

7. Анализ защищенности систем виртуализации / Д. В. Лапшин, Ю. Е. Кабанцов, А. В. Баулин [и др.] // Colloquium-Journal. – 2020. – № 10-2(62). – С. 63-66.

8. Зима В. М., Крюков Р. О. Метод выявления уязвимостей конфигурации виртуальной инфраструктуры на основе эквивалентных преобразований схем Янова //Вопросы оборонной техники. Серия 16: Технические средства противодействия терроризму. – 2020. – №. 11-12. – С. 38-47.

9. Зима В. М., Крюков Р. О. Методика формирования защищенной виртуальной инфраструктуры в автоматизированных системах специального назначения //Труды Военно-космической академии имени АФ Можайского. – 2019. – №. 667. – С. 213-223.

УДК 547.89+546.92+541.49:661.892+579.6+502.3+547

Гусева Е. В., Фесик Е. В.

Краунсодержащий хлороплатиновый комплекс и бактерицидная активностьЕ.В. Гусева¹, Казанский национальный исследовательский технологический университет, ул. Карла Маркса, 68, Казань, 420015, e-mail: leylaha@mail.ruЕ.В. Фесик², РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., 9, Москва, 125047, e-mail: fesik.e.v@muctr.ru

*Проведено сравнительное изучение бактерицидных свойств краунсодержащего платинового комплекса и дибензо-18-краун-6 на примере химико-биологического моделирования биodeградации нефти в присутствии сульфатвосстанавливающих бактерий рода *Desulfobacter*. Установлено, что соединения проявляют бактерицидные свойства в процессах биodeградации нефти и поэтому их можно рекомендовать как эффективные бактерициды при концентрации 0.01 г/л. Бактерицидная активность соединений отличается незначительно (1%). Преимущество использования – низкая концентрация для достижения высоких эффектов и сокращение времени биodeградации (12-20 суток). Преимущество использования краунсодержащего хлороплатинового комплекса 1 состоит в том, что проявляется аддитивный эффект антибактериальной способности, способствующий менее значительному распространению сульфатвосстанавливающих бактерий.*

Ключевые слова: дибензо-18-краун-6, платина, комплекс, биodeградация нефти, нефтяные загрязнения, сульфатвосстанавливающие бактерии, бактерицидная активность

Crown-containing chloroplatinum complex and bactericidal activity

E.V. Guseva¹, E.V. Fesik²¹Kazan National Research Technological University, st. Karla Marksa, 68, Kazan, 420015, e-mail: leylaha@mail.ru²Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Musskaya sq., 9, Moscow, 125047, e-mail: fesik.e.v@muctr.ru

*A comparative study of the bactericidal properties of a crown-containing platinum complex and dibenzo-18-crown-6 was conducted using the example of chemical-biological modeling of oil biodegradation in the presence of sulfate-reducing bacteria of the genus *Desulfobacter*. It has been established that the compounds exhibit bactericidal properties in oil biodegradation processes and therefore they can be recommended as effective bactericides at a concentration of 0.01 g/l. The bactericidal activity of the compounds differs slightly (1%). The advantage of use is low concentration to achieve high effects and reduced biodegradation time (12-20 days). The advantage of using crown-containing chloroplatinum complex 1 is that it exhibits an additive effect of antibacterial ability, which contributes to a less significant spread of sulfate-reducing bacteria.*

Key words: dibenzo-18-crown-6, platinum, complex, oil biodegradation, oil pollution, sulfate-reducing bacteria, bactericidal activity

Введение. Широкий интерес к комплексным соединениям платины появился после открытия Розенбергом в 1965г цитостатической активности цис-[Pt(NH₃)₂Cl₂] (цис-ДДП). До настоящего времени цис-ДДП является одним из противоопухолевых препаратов, применяемых в медицине. Однако соединения платины, как и других соединений металлов платиновой группы (МПГ) используются не только как антиканцерогенные препараты, но и как соединения, обладающие антивирусной и/или антибактериальной активностью [1-8].

Одним из важных элементов устойчивого развития народного хозяйства страны является рациональное использование природных ресурсов. Наша страна является одним из лидеров по добыче нефти. При этом для извлечения нефти используются разные методы. В последние 50-70 лет широкое распространение получила технология заводнения пластов, повышающая в значительной степени отдачу пласта и снижающую себестоимость добычи нефти. С другой стороны, в некоторых районах нашей страны в основном преобладает нефть, в которой находятся преимущественно тяжелые фракции углеводородов. Технология заводнения помогает в значительной степени такую нефть добыть [9].

Однако использование технологий заводнения приводит к морфологическим, физико-химическим и микробиологическим изменениям почвы территорий, где ведется интенсивная добыча нефти, а также водных акваторий [10]. Микробиологические изменения почвы и водных акваторий связано с увеличением роста сульфатвосстанавливающих бактерий (СВБ) вследствие закачки в пласт воды, которая не является стерильной [11]. Жизненный цикл СВБ связан с потреблением серосодержащих веществ и их переработкой в конечном итоге в сероводород [12]. При этом отметим, что содержание серы в различных видах нефти может колебаться от сотых долей до 8 % от массы и выше [9], что благоприятно для развития СВБ и приводит к биodeградации нефти, в результате которой в нефти появляется большой процент углеводов с двойными связями.

Эффективное подавление жизнедеятельность СВБ часто осуществляется с помощью химических соединений, выбор которых определяется конкретными химическими, микробиологическими и технологическими факторами. Так, на нефтепромыслах РТ в качестве бактерицида используется формалин, проявляющий активность 80-85% при С = 0.1 г/л. Кроме того, в [13] отмечено,

что ряд алкилоксибензолов являются аутоиндукторами анабиоза бактерий.

Перспективным представляется использование комплексов МПГ с лигандами – природными соединениями, присутствующими в организме и включенными в процессы обмена веществ [14], либо с лигандами, подобными природным ионофорам и ферментам. К таковым относятся многое макрогетероциклы, например, каликс [4] резорцины и краун-эфиры [15-17].

Ранее, в [18] изучены бактерицидные свойства каликсрезорцинсодержащих родиевых комплексов. На примере химико-биологического моделирования биодеградация нефти в присутствии сульфатвосстанавливающих бактерий *Desulfobacter* показана способность уменьшать либо усиливать биодеградацию нефти в зависимости от концентрации соединений, типа функциональных групп в составе и от структурных характеристик. Усиление бактерицидной активности для комплексов объясняется двойным воздействием на микробную клетку в связи с антибактериальными свойствами ионов родия. При этом приведены рекомендации по использованию соединений в качестве бактерицидов для уменьшения биодеградация нефти либо в качестве интенсификаторов роста сульфатвосстанавливающих бактерий для переработки нефтеотходов.

В отличие от функционализированных каликс [4] резорцинов, являющихся трехмерными структурами, в краун-эфирах наблюдается двумерная организация молекул, и они являются конформационно-подвижными соединениями [19]. С другой стороны, жесткое закрепление четырех этиленгликолевых звеньев бензольными фрагментами в дибензо-18-краун-6 создает менее подвижную и пространственно плоскую молекулу. При этом наличие ионов платины в составе краунсодержащего хлороплатинового комплекса может привести не только к ионофорному эффекту, но и эффекту, связанному с антибактериальной активностью платины как таковой.

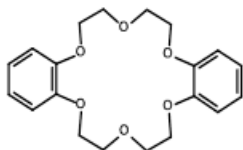


Рисунок 1. Дибензо-18-краун-6 или DB18CR6

Комплекс 1 является ионным соединением, имеет следующий состав и строение:

$\{[2(\text{H}_3\text{O})_4(\text{DB18CR6}) \cdot 2(\text{H}_2\text{O}) \cdot 2(\text{NH}_3)]^+ [\text{Pt}_2\text{Cl}_{10}]^{2-}\}$; Тразл = 178 °С; цвет желтый [20].

Цель настоящей работы состояла в сравнительной оценке бактерицидных свойств краунсодержащего хлороплатинового комплекса и лиганда дибензо-18-краун-6, находящегося в его составе, а также выдаче рекомендаций по их оптимальному использованию.

Экспериментальная часть. Химико-биологическое моделирование процессов биодеградация нефти СВБ рода *Desulfobacter* проведено на водонефтяной эмульсии (ВНЭ), отобранной с Ромашкинского

месторождения республики Татарстан (РТ). Брали ВНЭ (отстоявшуюся) в количестве 250 мл или 700 мл с обводненностью 50% и содержащую 7 г/л NaCl, 1 г/л $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 4 г/л Fe(II). Использована галофильная культура СВБ рода *Desulfobacter*, оптимум роста для которой pH 6.5-7.4, $t = 20\text{-}33^\circ\text{C}$.

Проводили два параллельных опыта: в присутствии и в отсутствии исследуемых соединений (контроль). Изучалась серия концентраций в пределах $0.01 \div 0.3$ г/л. В каждый опыт вносили культуральную среду *Desulfobacter* в объеме 10% от объема ВНЭ. В контрольном опыте в питательную среду вносили 10% культуральной среды с СВБ *Desulfobacter*. В следующих опытах в питательную среду с 10% культуральной среды с СВБ *Desulfobacter* вносили DB18CR6 или соединение 1 в концентрациях от 0,01 г/л до 0,3 г/л. Наблюдения за кинетикой роста культуры вели в течение 12 суток (или 12 месяцев); отбор клеток для наблюдений проводился в экспоненциальной фазе роста. О деструктивной способности микроорганизмов судили по остаточному объему нефти в среде. Для оценки влияния данных соединений на рост культуры *Desulfobacter* определяли концентрацию биомассы в среде по оптической плотности с пересчетом на вес абсолютно сухой биомассы (АСБ) по калибровочному графику [21]

Исследуя кинетику биодеградация по количеству деградировавшей нефти, оценивали бактерицидную активность (S) по формуле:

$$S = (C_1 - C_2/C_1) \cdot 100\%,$$

где C_1 – количество нефти в контролируемой пробе, мл; C_2 – количество нефти в исследуемой пробе, мл. О деструктивной способности микроорганизмов (степени биодеградация нефти) судили по остаточному объему нефти в среде/

Подробности методологии определения бактерицидной активности подробно представлены в [18]

Обсуждение результатов. Результаты по биодеградация нефти (в мл) в присутствии соединений DB18CR6 и 1 при $C = 0.01$ г/л и 0.3 г/л представлены на рисунке 2. В контроле на 10-12 сутки вся нефть деградирует (700 мл). По сравнению с контролем в присутствии DB18CR6 и 1 в количестве 0.01 г/л на 10-12 сутки остаточное количество нефти составляет соответственно ~ 100-110 мл и 110-120 мл. По сравнению с формалином (бактерицидная активность 80-85% при $C = 0.1$ г/л) соединения DB18CR, 1 проявляют значительную бактерицидную активность (соответственно 82% и 83%) в зоне более низких концентраций на порядок – при $C = 0.01$ г/л. Бактерицидная активность при $C = 0.3$ г/л для DB18CR и 1 составляет соответственно 80% и 82%. Таким образом, высокая бактерицидная активность соединений DB18CR6 и 1 проявляется в зоне низких концентраций. Однако эти изменения при сравнении с бактерицидной активностью DB18CR6 и 12 при $C = 0.3$ г/л практически незаметны, и разница составляет ~1 % (рис.1).

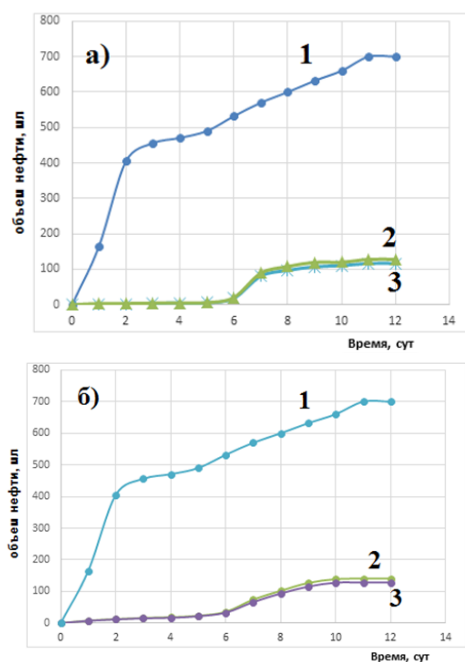


Рисунок 2. Количество деградировавшей нефти (мл) без и в присутствии добавок-соединений DB18CR6, 1: а) $C = 0.01$ г/л, где 1 – контроль, 2 – при добавлении DB18CR6, 3 – при добавлении 1; б) $C = 0.3$ г/л, где 1 – контроль, 2 – при добавлении DB18CR6, 3 – при добавлении 1.

Очевидно, при прочих равных условиях, учитывая, что DB18CR6 содержит в полости ионы гидроксония и/или аммония, основную роль могут играть ионы платины (IV), усиливающие бактерицидные свойства. Однако не следует исключать роль DB18CR6, содержащего арильные заместители, а также ионов гидроксония и/или аммония, создающих определенную среду при растворении комплекса в водонефтяной эмульсии (ВНЭ). Результаты исследований бактерицидной активности DB18CR6 и 1 характеризует их как эффективные бактерициды при подавлении процессов биодegradации нефти в присутствии СВБ *Desulfobacter* в зоне низких и высоких концентраций.

Таким образом, модельные исследования по изучению кинетики роста и потребления нефти СВБ *Desulfobacter* в водонефтяной эмульсии в присутствии соединений DB18CR6 и 1 показали, что они проявляют бактерицидные свойства в процессах биодegradации нефти. Поэтому их можно рекомендовать как эффективные бактерициды при концентрации 0.01 г/л. Причем бактерицидная активность этих соединений отличается незначительно (1%).

Одним из важных доводов в пользу использования является низкая концентрация для достижения высоких эффектов. Кроме того, наблюдается сокращение времени биодegradации до 12-20 суток, что удешевляет процессы биодegradации и процессы очистки от нефтяных загрязнений воды и почвы (в зависимости от площади очищаемой территории). Преимущество использования краунсодержащего хлороплатинового комплекса 1 состоит в том, что проявляется аддитивный эффект антибактериальной способности, который в итоге способствует

обеззараживанию от СВБ и в дальнейшем менее сильному их распространению.

Список литературы.

- Din M., Ali F., Intisar A. // *Revue Roumaine de Chimie*, 2019, V. 64, N. 1, P. 5-17.
- Mawnai. I. L., Adhikari S., Dkhar L., Lakshmi Tyagi J., Poluri K. M., Kollipara M. R. // *Journal of Coordination Chemistry*, 2019, V. 72, N. 2, P. 294-308.
- Pandrala M., Li F., Feterl M., Mulyana Y., Warner J.M., Wallace L., Keene F.R., Grant Collins J. // *Dalton Trans.*, 2013, V. 42, P. 4686–4694.
- Jain A., Wang J., Mashack E.R., Winkler B.S.J., Brewer K.J. // *Inorg. Chem.*, 2009, V. 48, P. 9077–9084.
- Aguirre J. D., Angeles-Boza A. M., Chouai A., Pellois J.-Ph, Turro Cl., Dunbar K. R. // *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, V.131, P. 11353–11360.
- Anthonyamy A., Balasubramanian S., Shanmugaiah V., Mathivanan N. // *Dalton Trans.*, 2008, P. 2136-2143.
- Vrabel M., Hocek M., Havran L., Fojta M., Votruba I., Klepetařova B., Pohl R., Rulišek L., Zendlova L., Hobza P., Shih I., Mabery E., Mackman R. // *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2007, P. 1752–1769.
- Pruchnik F.P., Jakimowicz P., Ciunik Z., Zakrzewska-Czerwińska J., Opolski A., Wietrzyk J., Wojdat E. // *Inorg. Chim. Acta*, 2002, V. 334, P. 59-66.
- Эйгенсон А.С., Шейх-Али Д.М. Закономерности компонентно-фракционного состава и химических характеристик пластовых и резервуарных нефтей.— Томск: Томский филиал СО АН СССР, 1986. — 52 с.
- Бурмистрова Т. И., Алексеева Т. П., Перфильева В. Д., Терещенко Н. Н., Стахина Л.Д. // *Химия растительного сырья*, 2003, №3, С. 69-72.
- Коханчик Я.А // *Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе*, 2019, Т.287, № 2, С.34-39.
- Беляев С.С., Борзенков И.А., Милехина Е.И. // *Микробиология*, 1990, Т.59, № 6, С. 1118-1126.
- Маргулис А. Б., Ильинская О. Н., Колпаков А. И., Эль-Регистан Г. И. // *Генетика*, 2003, Т. 39, № 9, С. 1180-1184.
- Крылова Л.Ф., Матвеева (Ковтунова) Л.М., Романенко Г.В. // *Ж. структ. химии*, 2006, Т.47, №4, С.670-681.
- Джайн В. К., Канайя П. Х. // *Успехи химии*, 2011, Т.80, № 1, С. 77-106.
- Gokel G. W., Leevy W. M., Weber M. E. // *Chem. Rev.*, 2004, V.104, N. 5, P. 2723-2750.
- Ullah F. Khan T. A., Iltaf J., Anwar S., Farhan M., Khan A., Khan M. R., Ullah S., ur Rehman M. F., Mustaqeem M., Kotwica-Mojzych K., Mojzych M. // *Appl. Sci.*, 2022., V. 12
- Guseva E. V., Sakhno T. V., Kutlakhmetova A. R., Fesik E. V. // *Chemical Safety Science (Khimicheskaya Bezopasnost')*, 2022, V. 6, N. 1, P. 106-131.
- Pedersen C.J. // *J. Am. Chem. Soc.*, 1967, V. 89, N. 26, P. 7017-7036.
- Guseva E. V., Fesik E. V. // *Chemical Safety Science (Khimicheskaya Bezopasnost')*, 2022, V.6, N.1, P.85.
- Мухаметшина, А.М. Разработка технологии получения высокоэффективного биологически активного вещества «тримиксан» широкого спектра действия дисс. к.х.н., 2008. - 150с.

УДК 547.89: 661: 579.6: 622: 620.193.81:502.3 546.97:547.565:543.632.585:544.777:579.9

Гусева Е. В., Фесик Е. В.

18-краун-6 и дибензо-18-краун-6: сравнительная характеристика бактерицидных и антиоксидантных свойствЕ.В. Гусева¹, Казанский национальный исследовательский технологический университет, ул. Карла Маркса, 68, Казань, 420015, e-mail: leylaha@mail.ruЕ.В. Фесик², РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., 9, Москва, 125047, e-mail: fesik.e.v@muctr.ru

*Проведено сравнительное изучение бактерицидных и антиоксидантных свойств 18-краун-6 и дибензо-18-краун-6 на примере химико-биологического моделирования биodeградации нефти и окисления железа (II) в железо (III) в присутствии сульфатвосстанавливающих бактерий рода *Desulfobacter*. Установлено, что соединения проявляют бактерицидные свойства в процессах биodeградации нефти и при этом обладают антиоксидантной активностью, поэтому их можно рекомендовать как эффективные бактерициды при концентрации 0.01 г/л.*

Ключевые слова: 18-краун-6, дибензо-18-краун-6, биodeградация нефти, микробиологическая коррозия, нефтяные загрязнения, сульфатвосстанавливающие бактерии, бактерицидная активность, антиоксидантные свойства.

18-crown-6 and dibenzo-18-crown-6: comparative characteristics of bactericidal and antioxidant propertiesE.V. Guseva¹, E.V. Fesik²¹Kazan National Research Technological University, st. Karla Marksa, 68, Kazan, 420015, e-mail: leylaha@mail.ru²Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Musskaya sq., 9, Moscow, 125047, e-mail: fesik.e.v@muctr.ru

*A comparative study of the bactericidal and antioxidant properties of 18-crown-6 and dibenzo-18-crown-6 was carried out using the example of chemical and biological modeling of oil biodegradation and oxidation of iron(II) to iron(III) in the presence of sulfate-reducing bacteria of the genus *Desulfobacter*. It has been established that the compounds exhibit bactericidal properties in the processes of oil biodegradation and at the same time possess antioxidant activity, therefore they can be recommended as effective bactericides at a concentration of 0.01 g/l.*

Key words: 18-crown-6, dibenzo-18-crown-6, oil biodegradation, microbiological corrosion, oil pollution, sulfate-reducing bacteria, bactericidal activity, antioxidant properties.

Введение. Закачка в пласты воды при разработке нефтяных месторождений для поддержания пластового давления приводит к активному росту сульфатвосстанавливающих бактерий (СВБ) [1-2]. В частности, культура *Desulfobacter* использует для своей жизнедеятельности как органический, так и неорганический субстраты и наиболее распространена в нефтепромысловых сточных водах нефтяных месторождений [2]. Жизненный цикл СВБ связан с потреблением серосодержащих веществ. При этом происходит перенос электронов в виде атомов водорода с помощью ферментной системы на серосодержащие вещества, находящиеся в субстрате. Содержание серы в различных видах нефти может колебаться от сотых долей до 8 % от массы и выше [3], что благоприятно для развития СВБ и приводит к биodeградации нефти, в результате которой в нефти появляется большой процент углеводов с двойными связями. Под действием СВБ постоянно идут окислительные процессы, приводящие к микробиологической коррозии трубопроводов и оборудования. Так, около 80% коррозионных поражений различного оборудования эксплуатационных скважин связано с деятельностью СВБ, а скорость коррозии при этом под действием СВБ очень высокая и достигает 5,8

мм/год [4], поэтому одновременное проявление веществом как бактерицидных, так и антиоксидантных свойств является очень важным и актуальным фактором [5-8]. Одновременно с биodeградацией нефти и микробиологической коррозией оборудования рост СВБ в местах добычи нефти ведет к необратимым морфологическим, физико-химическим и микробиологическим изменениям свойств почв, отторгающим загрязненные территории из хозяйственного использования вследствие потери плодородия [9]. Ущерб экологии от разливов нефти в НАО в 2024 году превысил 1,5 млрд рублей [10].

Эффективное подавление жизнедеятельности СВБ часто осуществляется с помощью химических соединений, выбор которых определяется конкретными химическими, микробиологическими и технологическими факторами. Так, на нефтепромыслах РТ в качестве бактерицида используется формалин, проявляющий активность 80-85% при $C = 0.1$ г/л. Кроме того, в [10] отмечено, что ряд алкилоксибензолов являются аутоиндукторами анабиоза бактерий.

Ранее, в [7-8] изучены бактерицидные и антиоксидантные свойства проксанола-168 и 18-краун-6. Показано, что проксанол-168, являющийся блок-сополимером окиси этилена и

окиси пропилена, в процессах биodeградации нефти при $C = 10^{-4} \div 10^{-1}$ г/л интенсифицирует рост микроорганизмов (на $\sim 90\%$) что создает для него перспективные предпосылки применения его при решении проблемы утилизации нефтесодержащих отходов и очистке территорий и акваторий от нефтяных загрязнений. Краун-эфиры (макроциклические полиэфиры) содержат в своем составе эфирные атомы кислорода, связанные с органическими спейсерами, обычно CH_2CH_2 -группами [12]. 18-краун-6 представляют по сравнению с проксанолом-168 более сложный пространственный способ организации молекулы. Выявлено [7], что 18-краун-6 с увеличением концентрации $C = 0,01 \div 0,14$ г/л ингибирует процесс биodeградации нефти.

18-краун-6 является конформационно-подвижным соединением [12]. Известно, что функционализация 18-краун-6 бензольными фрагментами и жесткое закрепление четырех этиленгликолевых звеньев создает менее подвижную и пространственно плоскую молекулу дибензо-18-краун-6, которая может по иному ингибировать рост СВБ. Из краун-эфиров наиболее недорогими, коммерчески и промышленно доступными являются 18-краун-6 или **18CR6** (рисунок 1а) и дибензо-18-краун-6 или **DB18CR6** (рисунок 1б).

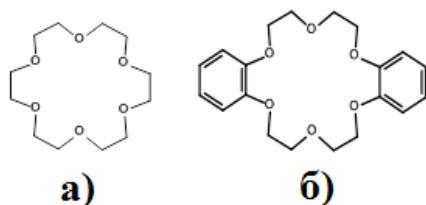


Рисунок 1. Краун-эфиры: а) 18-краун-6 или 18CR6; б) дибензо-18-краун-6 или DB18CR6

Цель настоящей работы состояла в сравнительной оценке бактерицидных и антиоксидантных свойств 18-краун-6 и дибензо-18-краун-6 в зависимости от используемых концентраций и выдаче рекомендаций по их оптимальному использованию.

Экспериментальная часть. Химико-биологическое моделирование процессов биodeградации нефти СВБ рода *Desulfobacter* и изучения антиоксидантных свойств соединений в процессах биodeградации нефти СВБ рода *Desulfobacter* проведено на водонефтяной эмульсии (ВНЭ), отобранной с Ромашкинского месторождения республики Татарстан (РТ). Брали ВНЭ (отстоявшуюся) в количестве 250 мл или 700 мл с обводненностью 50% и содержащую 7 г/л NaCl, 1 г/л $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 4 г/л Fe(II) Использована галофильная культура СВБ рода *Desulfobacter*, оптимум роста для которой pH 6.5-7.4, $t = 20\text{-}33^\circ\text{C}$.

Проводили два параллельных опыта: в присутствии и в отсутствии исследуемых

соединений (контроль). Изучалась серия концентраций в пределах $0,01 \div 0,3$ г/л. В каждый опыт вносили культуральную среду *Desulfobacter* в объеме 10% от объема ВНЭ. В контрольном опыте в питательную среду вносили 10% культуральной среды с СВБ *Desulfobacter*. В следующих опытах в питательную среду с 10% культуральной среды с СВБ *Desulfobacter* вносили 18CR6 или DB18CR6 в концентрациях от 0,01 г/л до 0,3 г/л. Наблюдения за кинетикой роста культуры вели в течение 12 суток (или 12 месяцев); отбор клеток для наблюдений проводился в экспоненциальной фазе роста. О деструктивной способности микроорганизмов судили по остаточному объему нефти в среде. Для оценки влияния данных соединений на рост культуры *Desulfobacter* определяли концентрацию биомассы в среде по оптической плотности с пересчетом на вес абсолютно сухой биомассы (АСБ) по калибровочному графику [13]

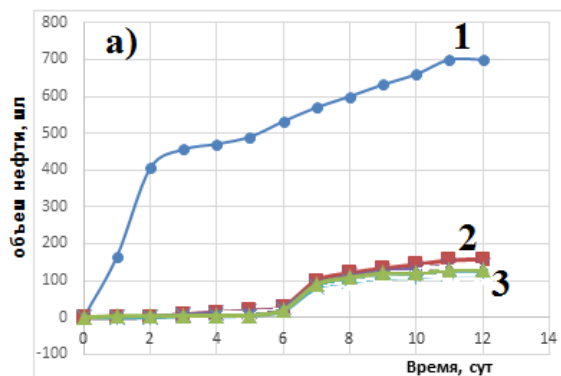
Исследуя кинетику биodeградации по количеству деградировавшей нефти, оценивали бактерицидную активность (S) по формуле:

$$S = (C_1 - C_2 / C_1) \cdot 100\%,$$

где C_1 – количество нефти в контролируемой пробе, мл; C_2 – количество нефти в исследуемой пробе, мл. О деструктивной способности микроорганизмов (степени биodeградации нефти) судили по остаточному объему нефти в среде.

Для исследования антиоксидантных свойств изучали кинетику окисления вносимых ионов железа (II) в железо (III). Дополнительно подтверждали антиоксидантные свойства, определяя остаточную концентрацию серы (VI) в ВНЭ на приборе «СПЕКТРОСКАНС». Брали максимальную концентрацию (0,3 г/л), исследованную для бактерицидных свойств, поскольку нужно было выявить предельное количество добавки вещества, при которой оно работает одновременно в качестве антиоксиданта и бактерицида. Подробности методологии определения бактерицидной активности и выявления антиоксидантных свойств подробно представлены нами в ряде работ [5-8].

Обсуждение результатов. Результаты по биodeградации нефти (в мл) в присутствии соединений DB18CR6 и 18CR6 при $C = 0,01$ г/л и 0,3 г/л приведены на рисунке 2.



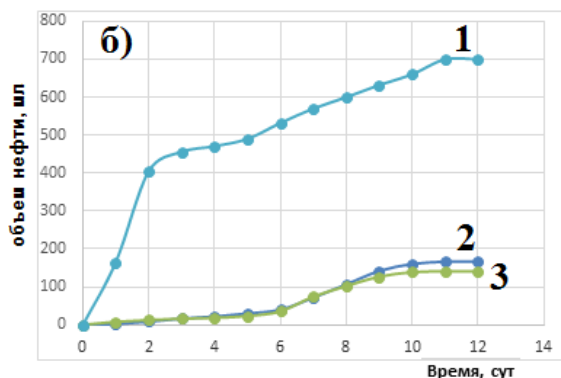


Рисунок 1. Количество деградировавшей нефти (мл) в присутствии 18СК6 и DB18CR6 при их добавлении: а) $C = 0.01$ г/л, где 1 – контроль, 2 – при добавлении 18CR6, 3 – при добавлении DB18CR6; б) $C = 0.3$ г/л, где 1 – контроль, 2 – при добавлении 18CR6, 3 – при добавлении DB18CR6;

В контроле на 10-12 сутки вся нефть деградирует (700 мл). По сравнению с контролем в присутствии DB18CR6 и 18CR6 в количестве 0.01

г/л на 10-12 сутки остаточное количество нефти составляет ~ 110-160 мл. По сравнению с формалином (бактерицидная активность 80-85% при $C = 0.1$ г/л) соединения 18CR6 и DB18CR6 проявляют бактерицидную активность при более низких концентрациях на порядок. Так при $C = 0.01$ г/л бактерицидная активность 18CR6 и DB18CR6 соответственно равны 77.5% и 82%; при $C = 0.3$ г/л бактерицидная активность составляет соответственно 76% и 80%. Очевидно, что зависимости бактерицидной активности от пространственного строения молекул 18СК6 и DB18CR, связанное с введением бензольных фрагментов в молекулу 18-краун-6 не наблюдается. Также не фиксируется зависимость бактерицидной активности от концентрации 18СК6 и DB18CR. Как при низкой концентрации (0.01 г/л), так и при более значительной концентрации (0.3 г/л), бактерицидная активность для обоих соединений колеблется в пределах 77-82%, незначительно уменьшаясь с увеличением концентрации на 1-2%.

Таблица 1. Сводные данные по кинетике изменения концентрации ионов железа (II) в железо (III) в отобранных пробах и эффекту ингибирования окисления (ЭИО) при внесении 18СК6 и DB18CR

Время, сутки	Контроль: $C_{\text{ионов}} \text{ (г/л)}$				Опыт (DB18CR6): $C_{\text{ионов}} \text{ (г/л)}$				ЭИО, %
	$C_{\text{Fe}+2}$	$C_{\Sigma \text{Fe}+2}$	$C_{\text{Fe}+3}$	$C_{\Sigma \text{Fe}+3}$	$C_{\text{Fe}+2}$	$C_{\Sigma \text{Fe}+2}$	$C_{\text{Fe}+3}$	$C_{\Sigma \text{Fe}+3}$	
1	2.42	2.42	4.6	4.6	0.2	0.2	1.1	1.1	76
2	0.1	2.42	0.56	5.16	0	0.2	1.06	2.16	58
3	0.15	2.57	0.9	6.06	0.05	0.25	1.08	2.14	65
4	0.44	3.01	1.6	7.66	0.1	0.35	1.2	2.28	70
5	0.6	3.61	1.56	9.22	0	0.35	1.72	2.92	68
6	0.25	3.61	0.2	9.42	0	0.35	1.54	3.26	65
7	0.28	3.71	0.52	9.94	0	0.35	1.09	2.63	73
8	0.35	4.06	1.75	11.69	0	0.35	0.65	1.74	85
9	0.7	4.76	2.7	14.39	0	0.35	0.2	0.85	94
10	0.92	5.68	2.21	16.6	0.09	0.44	0.65	0.85	95
11	1.1	6.78	2.0	18.6	0.18	0.62	1.5	2.15	86
12	1.0	7.78	3.72	22.32	0.2	0.82	3.4	4.9	78

Таблица 1. Сводные данные по кинетике изменения концентрации ионов железа (II) в железо (III) в отобранных пробах и эффекту ингибирования окисления (ЭИО) при внесении 18CR6 и DB18CR

Время, сутки	Контроль: $C_{\text{ионов}}$ (г/л)				Опыт (18CR6): $C_{\text{ионов}}$ (г/л)				ЭИО, %
	$C_{\text{Fe}+2}$	$C_{\Sigma\text{Fe}+2}$	$C_{\text{Fe}+3}$	$C_{\Sigma\text{Fe}+3}$	$C_{\text{Fe}+2}$	$C_{\Sigma\text{Fe}+2}$	$C_{\text{Fe}+3}$	$C_{\Sigma\text{Fe}+3}$	
1	2.42	2.42	4.6	4.6	0	0	0	0	100
2	0.1	2.42	0.56	5.16	0.16	0.16	1.38	1.38	73
3	0.15	2.57	0.9	6.06	0.12	0.28	1.4	2.78	54
4	0.44	3.01	1.6	7.66	0.08	0.36	1.22	2.62	66
5	0.6	3.61	1.56	9.22	0	0.36	1.06	2.28	75
6	0.25	3.61	0.2	9.42	0.05	0.41	1.5	2.56	73
7	0.28	3.71	0.52	9.94	0.1	0.51	1.03	2.53	74
8	0.35	4.06	1.75	11.69	0.15	0.65	0.5	1.53	87
9	0.7	4.76	2.7	14.39	0.2	0.85	0.1	0.6	96
10	0.92	5.68	2.21	16.6	0.1	0.95	1.71	1.81	89
11	1.1	6.78	2.0	18.6	0	0.95	3.32	5.03	73
12	1.0	7.78	3.72	22.32	0	0.95	2.96	6.28	72

Соединения DB18CR6 и 18CR6 обладают бактерицидными свойствами в широком диапазоне концентраций ($0.3\text{г/л} \geq C \geq 0.01\text{г/л}$). Соответственно и антиоксидантная активность проявляется в течение всего 12-дневного цикла роста СББ при $C = 0.3\text{г/л}$ и составляет в среднем: 76% для DB18CR6 и 78% для 18CR6. Эффект ингибирования окисления (ЭИО) в присутствии DB18CR6 и 18CR6 отличается в среднем на 2%, следовательно, они обладают близкими антиоксидантными свойствами. Таким образом, модельные исследования по изучению кинетики роста и потребления нефти СББ *Desulfobacter* в водонефтяной эмульсии в присутствии 18CR6 и DB18CR6 показали, что они проявляют бактерицидные свойства в процессах биodeградации нефти и поэтому их можно рекомендовать как эффективные бактерициды при концентрации 0.01 г/л.

Для достижения высоких эффектов не требуется большого количества 18CR6 и DB18CR6, что является одним из важных доводов в пользу их использования. Вторым важным доводом является сокращение времени биodeградации до 12-20 дней, что значительно удешевляет процессы биodeградации и процессы очистки от нефтяных загрязнений воды и почвы (в зависимости от площади очищаемой территории).

Список литературы

1. Беляев С.С., Борзенков И.А., Милехина Е.И. // Микробиология, 1990, Т.59, № 6, С. 1118-1126.

2. Коханчик Я.А. // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе, 2019, Т.287, № 2, С.34-39.
3. Эйгенсон А.С., Шейх-Али Д.М. Закономерности компонентно-фракционного состава и химических характеристик пластовых и резервуарных нефтей. Томск: Томский филиал СО АН СССР, 1986. – 52 с.
4. Сорокин Г. М., Ефремов А. П., Саакян Л. С. Коррозионно-механическое изнашивание сталей и сплавов. – Москва: «Нефть и газ», 2002, с.424
5. Guseva E. V., Sakhno T. V., Fesik E. V. // Chemical Safety Science, 2022, V. 6, N. 1, P. 106-131.
6. Guseva E. V., Kutlakhmetova A. R. // Polish J. Science, 2019, V. 1, N. 15, P. 16-23.
7. Гусева Е. В., Кутлахметова А. Р., Сахно Т. В. // Вестник Казан. технол. ун-та, 2014, № 21, С. 316.
8. Сахно Т.В., Курашов В.М., Емельянов В.М., Кутлахметова А.Р., Гусева Е.В., Половняк В.К., Хайдарова Р.И. // Научно-технический вестник Поволжья, 2013, № 2, С. 56-61.
9. Бурмистрова Т. И., Алексеева Т. П., Перфильева В. Д., Терещенко Н. Н., Стахина Л. Д. // Химия растительного сырья, 2003, №3, С. 69-72.
10. RCC.ru (Новости и обзоры нефтегазохимической отрасли).
11. Маргулис А. Б., Ильинская О. Н., Колпаков А. И., Эль-Регистан Г. И. // Генетика, 2003, Т. 39, № 9.
12. Pedersen C.J. // J. Am. Chem. Soc., 1967, V. 89, N. 26, P. 7017-7036.
13. Мухаметшина, А.М. Разработка технологии получения высокоэффективного биологически активного вещества «тримиксан» широкого спектра действия дисс. к.х.н., 2008. - 150с.

УДК 544.774.2

Ходарева М.Д., Мочалова М.С.

Исследование процессов получения микрочастиц аэрогеля на основе хитозана в качестве местных гемостатических средств

Ходарева Мария Дмитриевна – студент группы К-47; Khodareva111@gmail.com.

Мочалова Мария Сергеевна – к.т.н., младший научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье исследован процесс получения микрочастиц аэрогеля на основе хитозана. В ходе работы получили микрочастицы аэрогеля распылительным и масляно-эмульсионным методами, варьировали концентрации растворов хитозана и сшивающего агента (щёлочи). Проведены аналитические исследования площади удельной поверхности, объема и диаметра пор, определена пористость микрочастиц. На основании полученных данных сделан вывод о возможности использования микрочастиц хитозановых аэрогелей в качестве местных гемостатических средств.

Ключевые слова: аэрогель, хитозан, местное гемостатическое средство.

Study of the processes of obtaining chitosan-based aerogel microparticles as local hemostatic agents

Khodareva M.D., Mochalova M.S.

D. Mendelev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article studies the process of obtaining aerogel microparticles based on chitosan. In the course of the work, aerogel microparticles were obtained by spray and oil-emulsion methods, the concentrations of chitosan solutions and cross-linking agent (alkali) were varied. Analytical studies of the specific surface area, volume and diameter of pores were carried out, the porosity of the microparticles was determined. Based on the data obtained, a conclusion was made about the possibility of using chitosan aerogel microparticles as local hemostatic agents.

Keywords: aerogel, chitosan, local hemostatic agent.

Введение

На сегодняшний день наибольший интерес для фармацевтики и медицины представляют аэрогели на основе биополимеров, поскольку их производят из возобновляемой сырьевой базы, они обладают свойствами биodeградируемости и биосовместимости, а также не являются токсичными материалами. Одним из наиболее перспективных биополимеров для производства аэрогелей является хитозан. Хитозановые аэрогели обладают следующими характеристиками: высокая пористость (до 99%); высокая площадь удельной поверхности (до 600 м²/г); большой объем пор (до 1,3 см³/г); низкая плотность (от 0,05 г/см³); высокая сорбционная емкость; гемостатическая активность; антибактериальная и антиоксидантная активности; отсутствие токсичности; биосовместимость; биоразлагаемость [1-3].

Одной из наиболее перспективных областей применения аэрогеля на основе хитозана является применение в качестве гемостатического средства, что обусловлено несколькими факторами: хитозан способен оказывать выраженное гемостатическое действие за счёт положительного заряда группы – NH₃⁺, взаимодействующего с отрицательно заряженными клеточными мембранами эритроцитов и тромбоцитов; благодаря пористой структуре и малым размерам пор аэрогель в перспективе можно использовать в качестве матрицы для внедрения активных фармацевтических субстанций (АФС); при попадании в кровь аэрогель адсорбирует водную

часть, значительно увеличивая концентрацию факторов крови, которые запускают каскад свертывания [5].

В данной работе исследуется процесс получения микрочастиц аэрогеля на основе хитозана с использованием различных методов диспергирования — распылительным и масляно-эмульсионным. Изучается влияние параметров процесса, таких как концентрация хитозана, сшивающего агента и условия гелеобразования, на структурные и физические характеристики частиц. Полученные данные позволяют оценить перспективу материала для применения в качестве местного гемостатического средства и определить оптимальные параметры процесса.

Экспериментальная часть

В ходе данной работы были получены частицы хитозанового геля (1 и 2% масс.) распылительным и масляно-эмульсионным методами и проведена сверхкритическая сушка. Процесс получения частиц аэрогеля на основе хитозана можно разделить на следующие этапы: получение растворов хитозана и сшивающего агента, гелеобразование частиц, ступенчатая замена растворителя и сверхкритическая сушка.

Для получения 1 и 2% масс. растворов хитозана были подготовлены 0.2М растворы уксусной кислоты, в которые внесли порошок хитозана заданной массы и оставили растворяться при постоянном перемешивании раствора. Далее проводится стадия гелеобразования микрочастиц геля

хитозана путем распыления. Данная стадия осуществляется с помощью пневматической форсунки внешнего смешения (Glatt GmbH с диаметром внутреннего отверстия 0.5 мм). Для процесса распыления раствора хитозана в смесительную камеру форсунки одновременно подается жидкость (раствор хитозана) и сжатый воздух под давлением (0.2 бар). Далее капли раствора хитозана попадают в приемную емкость, наполненную раствором сшивающего агента. Следующим этапом является замена растворителя в порах геля на изопропанол со следующими концентрациями: 30 - 60 - 90 - 99.8 - 99.8 масс. %. Частицы геля выдерживались в каждом растворе изопропилового спирта не менее 2 часов.

В качестве варьируемых факторов эксперимента были выбраны концентрации хитозана и щелочи (Табл. 1).

Таблица 1. Варьируемые параметры процесса получения микрочастиц хитозановых гелей путем распыления

№ образца	$C_{\text{хитозана}}$, масс. %	$C_{\text{щелочи}}$, М
P1	1	0.1
P2		1
P3	2	0.1
P4		1

Далее частицы упаковываются в конверты из фильтровальной бумаги и подвергаются сверхкритической сушке, методика которой описана в работе [1].

Процесс получения микрочастиц хитозанового аэрогеля масляно-эмульсионным методом состоит из следующих этапов: подготовка раствора хитозана в уксусной кислоте и водного раствора сшивающего агента, эмульгирование подготовленных растворов в масле, формирование геля хитозана, отмывка геля хитозана от масла, замена растворителя и сверхкритическая сушка.

Растворы хитозана в уксусной кислоте и водные растворы сшивающего агента получали аналогично вышеописанной методике. Далее формируют эмульсии полученных растворов в масле (соотношение «раствор: масло» во всех экспериментах составляло 1:3 соответственно), их гомогенизируют с помощью гомогенизатора IKA ULTRA-TURRAX T 25 при скорости 3000 об/мин в течение 10 минут. При непрерывном диспергировании эмульсии хитозана к ней добавляют эмульсию раствора NaOH и перемешивают в течение 10 минут и выдерживают полученную смесь 24 часа для полного протекания стадии формирования геля. Полученные образцы многократно промываются

гексаном при отделении частиц геля от водной фазы методом центрифугирования (центрифуга Sigma 2-16P) при 6000 об/мин. Следующим этапом является замена растворителя в порах геля на изопропанол аналогично вышеописанному.

В качестве варьируемых факторов эксперимента аналогично были выбраны концентрации хитозана и щелочи (Таблица 2).

Таблица 2. Варьируемые параметры процесса получения микрочастиц хитозановых гелей масляно-эмульсионным методом

№ образца	$C_{\text{хитозана}}$, масс. %	$C_{\text{щелочи}}$, М
M1	1	0.1
M2		1
M3	2	0.1
M4		1

Далее частицы упаковываются в конверты из фильтровальной бумаги и подвергаются сверхкритической сушке, методика которой описана в работе [1].

Далее были проведены аналитические исследования полученных материалов. Для расчета пористости образцов определили истинную плотность частиц на гелиевом пикнометре «Ассурис II 1340» (Micromeritics).

Определение удельной площади поверхности образца и среднего размера пор хитозановых аэрогелей проводилось на автоматическом анализаторе удельной поверхности ASAP 2020MP. Удельная площадь поверхности ($S_{уд}$) вычислялась при помощи метода БЭТ, для получения распределения пор по размерам и вычисления среднего диаметра пор ($D_{пор}$) использовался метод Баррета-Джойнера-Халенды (БДХ), основанный на обработке экспериментальных изотерм сорбции/десорбции. На основе полученного распределения пор по размерам можно рассчитать общий объем пор в материале ($V_{БДХ}$).

Размер микрочастиц хитозанового аэрогеля может оказывать влияние на эффективность материала. Частицы меньшего размера обеспечивают большую площадь поверхности для контакта с кровью, что ускоряет свертывание. Кроме того, частицы небольшого размера хорошо проникают в рану, равномерно распределяются и минимизируют риск раздражения тканей [3]. Средний диаметр частиц рассчитывается через распределение частиц по размеру, полученное методом лазерной дифракции на дифрактометре Analysette 22 Nano Tec.

В таблице 3 представлены характеристики микрочастиц хитозанового аэрогеля.

Таблица 3. Структурные и физические характеристики микрочастиц хитозанового аэрогеля

№ образца	П, %	$S_{уд}$, м ² /г	$V_{БДХ}$, см ³ /г	$D_{пор}$, нм	$\bar{d}_{ср}$, мкм
P1	97.9	273	1.43	11	78.8
P2	96.0	267	1.58	21	47.6
P3	95.4	260	1.63	12	51.2
P4	93.5	235	1.03	16	30.2
M1	96.7	224	1.30	21	59.8
M2	97.3	187	0.90	21	89.0
M3	97.6	215	1.10	10	38.9
M4	98.5	337	1.80	22	58.6

Все полученные микрочастицы хитозановых аэрогелей обладают высокой удельной площадью поверхности (от 187 до 337 м²/г), малым диаметром пор (от 10 до 22 нм) и большим объемом пор (от 0.90 до 1.80 см³/г). Кроме того, все образцы хитозановых аэрогелей обладают высокой пористостью (> 93.5%), что является значительным преимуществом при использовании их в качестве местных гемостатических средств для остановки кровотечений различной степени тяжести, поскольку пористость материала напрямую связана с эффективностью остановки кровотечений. Более высокая пористость наблюдается у образцов, полученных масляно-эмульсионным методом. У микрочастиц, гелеобразованных сшивающим агентом с концентрацией 0.1М по сравнению с концентрацией 1М, наблюдается меньший диаметр пор и большая удельная площадь поверхности (за исключением образца М4). Также для 1% хитозана удельная площадь поверхности выше, чем для 2% хитозана (за исключением образца М4).

Заключение

На основании полученных экспериментальных данных было установлено, что частицы хитозанового аэрогеля, полученные методом распыления и масляно-эмульсионным методом имеют практически одинаково высокую пористость, высокую удельную площадь поверхности и малый размер пор. Наименьший диаметр пор в купе с наибольшей площадью поверхности наблюдается у образцов P1, P3, M3 (11, 12, 10 нм и 273, 260, 215 м²/г соответственно). Малый диаметр пор в совокупности с высокой удельной поверхностью создают значительные перспективы для использования аэрогелей из хитозана в качестве матриц-носителей для внедрения дополнительных активных субстанций в структуру с целью получения функциональных медицинских средств для купирования кровотечения с терапевтическим эффектом.

Малый диаметр пор будет способствовать адсорбции активных субстанций преимущественно в аморфном состоянии, которое обладает высокой скоростью высвобождения из пор аэрогеля по сравнению с кристаллической формой активных субстанций [6-9]. Благодаря этому свойству

повышается биодоступность активных субстанций и, как следствие, уменьшается время достижения терапевтического эффекта при применении таких медицинских изделий.

Список литературы

1. Menshutina N. et al. Chitosan Aerogel Particles as Nasal Drug Delivery Systems // Gels. – 2022. – Vol. 8. – №. 12. – P. 796-812.
2. S. Zhao, W. Malfait, N. Guerrero-Alburquerque, et al. Biopolymer Aerogels and Foams: Chemistry, Properties and Applications // Angewandte Chemie International Edition. – 2018. – Vol. 57. – P. 2–31
3. Lovskaya D. et al. Chitosan-based aerogel particles as highly effective local hemostatic agents. production process and in vivo evaluations // Polymers. – 2020. – Vol. 12. – №. 9. – P. 2055-2066.
4. L. Szymanski, K. Golaszewska, A. Wiatrowska, et al. ISO 10993 biological evaluation of novel hemostatic powder – 4SEAL // Biomaterials Research. – 2022. – Vol. 26. – № 1. – P. 12
5. Забежинский, М. М., Балашов, Л. Д., Пюрвеев, С. С., & Косова, А. Н. (2024). Патология системы гемостаза (лекция). Russian Biomedical Research (Российские биомедицинские исследования), 9(2), 96-108.
6. C. A. García-González, A. Sosnik, J. Kalmár, et al. Aerogels in drug delivery: From design to application // Journal of controlled release: official journal of the Controlled Release Society. – 2021. – Vol. 332. – P. 40–63
7. A. Jabbari-Gargari, J. Moghaddas, H. Hamishehkar, H. Jafarizadeh-Malmiri. Carboxylic acid decorated silica aerogel nanostructure as drug delivery carrier // Microporous and Mesoporous Materials. – 2021. – Vol. 323. – P. 111220.
8. D. Lovskaya, N. Menshutina. Alginate-Based Aerogel Particles as Drug Delivery Systems: Investigation of the Supercritical Adsorption and In Vitro Evaluations // Materials. – 2020. – Vol. 13. – № 2. – P. 329.
9. ОФС.1.1.0018.15 Кристалличность – Фармакоп.пф. – URL: <https://pharmacopoeia.ru/ofs-1-1-0018-15-kristallichnost/> (дата обращения: 25.11.2024).

УДК 658.5

Юркин М.Е., Аверина Ю.М., Юркина Е.В.

Ключевой сотрудник цифрового предприятия: роль человека в эпоху автоматизации производства

Юркин Максим Евгеньевич – аспирант 1 года кафедры Логистики и экономической информатики; iurkin.m.e@muctr.ru

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент, академик РИА, заведующий кафедры Логистики и экономической информатики;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Юркина Елена Владимировна – ИП Юркина Елена Владимировна;

В статье рассматривается роль человека как ключевого элемента цифрового предприятия. Анализируются барьеры цифровой трансформации: фрагментарность данных, сопротивление изменениям, нехватка компетенций. Подчеркивается важность обучения, развития цифрового мышления и умения работать со сложностью для достижения устойчивого технологического лидерства.

Ключевые слова: цифровая трансформация, автоматизация производства, компетенции персонала, стратегическое мышление

The Key Employee of a Digital Enterprise: The Role of the Human in the Era of Manufacturing Automation

Iurkin M.E.¹, Averina I.M.¹, Iurkina M.E.²

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

² Individual Entrepreneur

The article discusses the role of the individual as a key element of a digital enterprise. It analyzes barriers to digital transformation such as fragmented data, resistance to change, and lack of competencies. The importance of training, developing digital thinking, and the ability to manage complexity is emphasized for achieving sustainable technological leadership.

Key words: digital transformation, manufacturing automation, personnel competencies, strategic thinking.

Введение

Масштабные технологические сдвиги, связанные с цифровой трансформацией предприятий, радикально меняют не только облик производства, но и роль человека в этих процессах. Автоматизация, внедрение ИИ и развитие цифровых платформ создают среду, в которой классические модели управления, прогнозирования и взаимодействия теряют актуальность. Тем не менее, человек остаётся ключевым звеном — именно от уровня его компетенций, готовности к изменениям и способности к принятию решений зависит эффективность преобразований.

Цифровая трансформация — это не просто автоматизация процессов, а глубокая перестройка бизнес-моделей и логики функционирования организаций. Она приводит к кратному улучшению показателей, исчезновению устаревших подпроцессов, появлению новых качеств управления. Однако именно человеческий капитал всё чаще оказывается самым уязвимым звеном в этом процессе.

Сегодня эффективность и конкурентоспособность компаний всё чаще определяются не только уровнем автоматизации процессов, но и тем, насколько сотрудники готовы брать на себя ответственность, анализировать сложные данные и действовать в многомерной реальности. Классические модели планирования и линейного прогнозирования оказываются неэффективными. Вместо этого требуется способность к восприятию и моделированию сложных, нелинейных систем — а это прерогатива не алгоритма, а мыслящего человека.

Экспериментальная часть

Современное предприятие существует в условиях высокой скорости изменений, неопределённости и усложнения внешней и внутренней среды. Классические подходы к планированию и прогнозированию — будь то пятилетние планы или стратегические дорожные карты — не успевают за реальностью. Бизнес сталкивается с необходимостью принимать решения не «на всякий случай», а «прямо сейчас», полагаясь на гибкость и быструю адаптацию. Это требует совершенно новой модели мышления: многомерного, вероятностного, в ряде случаев — интуитивного. Компании, особенно в высокотехнологичных отраслях, нуждаются в сотрудниках, которые могут не просто интерпретировать данные, но и делать осознанные ставки в условиях неопределённости, работая на опережение.

Способность быстро принимать решения становится ключевым навыком цифровой эпохи. Эти решения должны быть не интуитивными, а глубоко подготовленными — на основе данных, которые предоставляет бизнес-аналитика, BI-системы и цифровые двойники. Чем выше уровень цифровой и управленческой зрелости предприятия, тем точнее и обоснованнее оказываются управленческие решения.

Даже при декларируемом переходе к цифровым решениям многие предприятия продолжают опираться на устаревшие инструменты работы с данными. Значительный объём информации по-прежнему фиксируется в Excel-таблицах и текстовых документах, зачастую без единого стандарта оформления. В результате данные оказываются фрагментарными, дублирующимися или

противоречивыми [1]. Это резко снижает их пригодность для анализа: чтобы извлечь из них значимую информацию, требуется чрезмерно много времени, ресурсов и ручной работы, а в ряде случаев анализ становится невозможным. Подобная ситуация оборачивается тем, что даже базовые управленческие решения принимаются на основании неполных или искажённых данных, что, в свою очередь, сказывается на всей стратегии компании — от маркетинга до операционного управления.

Сложность усугубляется тем, что наличие автоматизированной системы ещё не гарантирует её эффективного использования [2]. Компании сталкиваются с тем, что сотрудники не в состоянии полноценно задать параметры, корректно ввести данные или интерпретировать полученную информацию. Иногда дело доходит до открытого сопротивления — сотрудники отказываются переходить на цифровые сервисы, предпочитая привычные методы. Причины такого поведения могут быть разными: недостаток цифровых навыков, страх ошибок, неуверенность в себе, а иногда — элементарный саботаж, если система воспринимается как угроза (например, в случае автоматизации контроля результатов труда).

В условиях таких внутренних барьеров цифровая трансформация оказывается формальной — инструменты внедряются, но не работают. Построить на этих данных устойчивую бизнес-логику невозможно. Чтобы изменить ситуацию, необходимо не только повышать уровень цифровой грамотности сотрудников, но и грамотно управлять изменениями: объяснять цели и смысл новых процессов, демонстрировать конкретную пользу, вовлекать коллектив в обучение. Практика показывает, что особенно эффективны реальные кейсы — когда человек видит, как корректно введённые данные позволяют повысить качество прогноза или ускорить согласование решений. Дополнительно важно применять методы мотивации — от символического признания до финансового стимулирования.

Однако не всегда проблема заключается в людях [3]. В ряде случаев сами цифровые инструменты, предложенные руководством или интеграторами, оказываются неадаптированными к специфике конкретной организации. Отсюда — сопротивление, неудовлетворённость и формальный подход к использованию. В таких ситуациях нелишним становится внутренний аудит цифровых ресурсов: стоит задать себе вопрос, действительно ли внедрённое решение отвечает задачам компании. Может оказаться, что проблема вовсе не в сопротивлении сотрудников, а в некачественной постановке задачи или ошибке в выборе инструмента.

Однако цифровая трансформация требует качественно нового уровня подготовки персонала. По данным опроса KMDA, проведённого в 2020 году [4], основным барьером на пути цифровизации 53% российских компаний назвали нехватку компетенций. Также 41% отметили нехватку квалифицированных кадров. В большинстве случаев компании

инвестируют в инфраструктуру — в интернет, в ИТ-системы, в автоматизацию, но почти не вкладываются в развитие компетенций сотрудников.



Рис. 1. Ключевые препятствия цифровой трансформации (по мнению респондентов), %

Эта ситуация создаёт серьёзный риск: имея цифровую оболочку, предприятия теряют смысл трансформации без трансформации мышления. Необходимо выстраивать системную работу по развитию цифровых компетенций. В этом смысле перспективной является модель DigComp, выделяющая пять ключевых направлений цифровых умений: грамотность в работе с информацией и данными, коммуникация и коллаборация, создание контента, безопасность, а также решение проблем. Компетенции оцениваются по восьмиуровневой шкале, от базового до высокоспециализированного уровня, что позволяет адаптировать программы развития персонала под потребности конкретной организации.

На практике компании, стремящиеся к технологическому лидерству, всё чаще осознают: без системного подхода к обучению и развитию персонала невозможно обеспечить устойчивую цифровую трансформацию. Именно поэтому они создают внутренние образовательные экосистемы, интегрирующие обучение в повседневную рабочую среду. Речь идёт не только о разовых курсах повышения квалификации, но и о формировании целостной среды роста: от адаптационных программ до продвинутых треков подготовки лидеров цифровых изменений.

Так, в стратегии цифровой трансформации ПАО «Россети» до 2030 года заложено создание корпоративного университета как центра методологической и технологической экспертизы [5]. Предусмотрено развитие сети учебных центров в регионах, внедрение цифровых симуляторов, трансформация формата наставничества, а также создание индивидуальных карьерных треков с опорой на цифровые компетенции. Отдельное внимание уделяется партнёрству с вузами — в рамках него создаются совместные программы, лаборатории, проектные школы, что позволяет вовлекать будущих сотрудников в реальные кейсы ещё до трудоустройства.

Международный опыт подтверждает эффективность такого подхода. Например, корпорация Siemens в сотрудничестве с университетом DGUT (Китай) запустила широкую образовательную программу по цифровому производству [6]. Программа охватывает весь жизненный цикл продукта — от проектирования и виртуального моделирования до цифровой логистики и технического обслуживания. В учебный процесс включены симуляции, работа с цифровыми двойниками, использование промышленных IoT-платформ и ERP-систем. Это позволяет студентам не просто изучать технологии в теории, но и формировать тип мышления, необходимый для принятия решений в условиях цифровой среды.

Однако развитие компетенций — лишь часть уравнения. Не менее важна работа с ментальными моделями сотрудников. Цифровая трансформация — это не только внедрение новых инструментов, но и отказ от старых способов мышления, переосмысление ролей, отказ от контроля ради доверия и ответственности. Часто сотрудники воспринимают эти изменения болезненно: как угрозу привычной стабильности и снижению значимости их текущей роли. Возраст и опыт в этом контексте отступают на второй план. Ключевыми становятся такие качества, как обучаемость, гибкость, умение принимать решения в условиях неопределённости и готовность к саморазвитию [7].

В этой связи особую ценность приобретает способность работать со сложностью. Во всём мире развиваются исследовательские и образовательные центры, занимающиеся изучением комплексных адаптивных систем. Среди них — Santa Fe Institute (США), Complexity Institute (Сингапур), а в России — Институт проблем управления РАН. Осознание сложности не как барьера, а как источника роста позволяет компаниям развивать системное мышление у сотрудников, обучать их видеть взаимосвязи, моделировать последствия решений, управлять не только процессами, но и контекстом. Это становится частью новой стратегической компетенции цифровых предприятий.

Заключение

Таким образом, несмотря на рост уровня автоматизации и внедрение ИИ в ключевые процессы, именно человек остаётся главным элементом цифрового предприятия. Его компетенции, способность к адаптации и стратегическому мышлению определяют успех трансформации. Будущее формируется не только технологическими решениями, но и человеческим выбором — сделать ставку в нужный момент, принять ответственность, инициировать изменения.

Цифровая трансформация — это не только о технологиях, это прежде всего о людях. Компании, которые это осознают, создают себе устойчивое преимущество. А ключевой сотрудник цифрового предприятия — это не программист и не оператор, а лидер изменений, соединяющий в себе технологическую грамотность, предпринимательское мышление и человеческую интуицию. Именно такой специалист способен не только адаптироваться к цифровой реальности, но и формировать её.

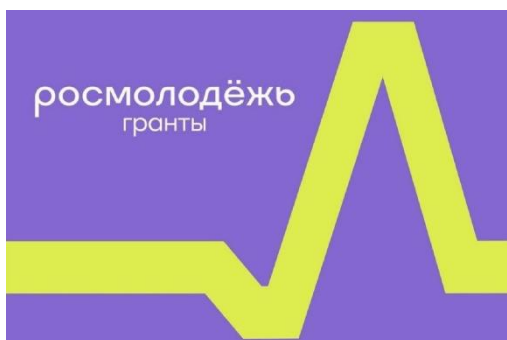
Список литературы

1. 42% предпринимателей не могут перейти к цифровой трансформации из-за проблем с Big Data. [Электронный ресурс] // сайт. — URL: https://corp.cnews.ru/news/line/2024-04-04_42_predprinimatelej_ne_mogut (дата обращения 21.05.2025)
2. Технологическо-организационный инжиниринг окрасочных производств. Болдырев В.С., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Кузнецов С.В., Колыбанов К.Ю. Теоретические основы химической технологии. 2020. Т. 54. № 3. С. 299-303.
3. Цифровые системы принятия решений по организации и мониторингу рационального природопользования. Мешалкин В.П., Челноков В.В., Дударева А.Е. в сборнике «Логистика и экономика ресурсоэнергосбережения в промышленности (МНПК «ЛЭРЭП-11-2017»)): Сборник научных трудов по материалам XI Международной научно-практической конференции ЛЭРЭП-11-17 15 - 16 ноября 2017 года, место издания Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А. Саратов, с. 90-94
4. Цифровая трансформация в России - 2020 [Электронный ресурс] // сайт. — URL: <https://sovman.ru/wp-content/uploads/2023/05/KMDA.-Цифровая-трансформация-в-России-2020-2.pdf> (дата обращения 20.05.2025).
5. Концепция цифровая трансформация 2030. [Электронный ресурс] // сайт. — URL: https://www.rosseti.ru/upload/iblock/582/rajp59pvuvjsx5ztr38jjz2q98o8rkbd/Kontseptsiya_Tsifrovaya_transformatsiya_2030.pdf (дата обращения 23.05.2025)
6. Empowering the next generation of smart manufacturing talent [Электронный ресурс] // сайт. — URL: <https://resources.sw.siemens.com/en-US/case-study-dongguan-university-of-technology/> (дата обращения 24.05.2025)
7. Н. А. Литвинова, А. Г. Изотова «Автоматизация производственных процессов и роль человека в индустрии 4.0» // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. 2021. №1-2.

**Российский химико-
технологический
университет
имени Д.И. Менделеева**



При поддержке



**Федерального агентства
по делам молодѣжи
(Росмолодѣжь)**

Научное издание

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXIX

№ 1 (292)

Компьютерная верстка: Верховосова А.И.
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Совет молодых ученых и специалистов (СМУС)

Адрес университета: 125047, г. Москва,

Миусская пл., д. 9