

**АКАДЕМИЯ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ
«ACADEMY OF NATURAL HISTORY»**

**МЕЖДУНАРОДНЫЙ
ЖУРНАЛ ПРИКЛАДНЫХ
И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

**INTERNATIONAL
JOURNAL OF APPLIED
AND FUNDAMENTAL
RESEARCH**

Журнал основан в 2007 году
The journal is based in 2007
ISSN 1996-3955

Двухлетний импакт-фактор
РИНЦ = 0,593

Пятилетний импакт-фактор
РИНЦ = 0,299

№ 9 2024

Научный журнал
Scientific journal

Журнал International Journal of Applied and Fundamental Research (Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований) зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций. Свидетельство ПИ № ФС 77-60735.

Электронная версия размещается на сайте www.rae.ru
The electronic version takes places on a site www.rae.ru

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР
к.м.н. *Н.Ю. Стукова*
Ответственный секретарь
к.м.н. *М.Н. Бизенкова*

EDITOR
Natalia Stukova
Senior Director and Publisher
Maria Bizenkova

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

д.б.н., проф. Абдуллаев А. (Душанбе); к.б.н. Алиева К.Г. (Махачкала); д.х.н., к.ф.-м.н., проф. Алоев В.З. (Чегем-2); д.б.н., проф. Андреева А.В. (Уфа); к.географ.н., доцент Аничкина Н.В. (Липецк); к.ф.-м.н. Барановский Н.В. (Томск); д.б.н., доцент Белых О.А. (Иркутск); д.т.н., проф. Бурмистрова О.Н. (Ухта); д.т.н., доцент Быстров В.А. (Новокузнецк); д.м.н., проф. Гарбуз И.Ф. (Тирасполь); д.ф.-м.н., проф. Геворкян Э.А. (Москва); д.х.н., проф. Гурбанов Г.Р. (Баку); д.ветеринар.н., доцент Ермолина С.А. (Киров); к.т.н. Есенаманова М.С. (Атырау); к.ф.-м.н., д.п.н., проф. Ефремова Н.Ф. (Ростов-на-Дону); д.м.н. Жураковский И.П. (Новосибирск); д.т.н., доцент Ибраев И.К. (Темиртау); к.т.н., доцент Исмаилов З.И. (Баку); д.б.н., с.н.с. Кавцевич Н.Н. (Североморск); д.т.н., проф. Калмыков И.А. (Ставрополь); д.б.н. Кокорева И.И. (Алматы); д.г.-м.н., доцент Копылов И.С. (Пермь); к.б.н., доцент Коротченко И.С. (Красноярск); к.с.-х.н., доцент Кряжева В.Л. (Нижний Новгород); д.ф.-м.н., доцент Кульков В.Г. (Волжский); д.б.н. Ларионов М.В. (Балашов); д.б.н., к.с.-х.н., доцент Леонтьев Д.Ф. (Иркутск); д.географ.н., к.б.н., проф. Луговской А.М. (Москва); д.г.-м.н., с.н.с. Мельников А.И. (Иркутск); д.т.н., проф. Несветаев Г.В. (Ростов-на-Дону); д.с.-х.н. Никитин С.Н. (п. Тимирязевский); д.фарм.н., доцент Олешко О.А. (Пермь); д.с.-х.н., с.н.с., проф. Партоев К. (Душанбе); к.п.н., доцент Попова И.Н. (Москва); д.т.н., проф. Рогачев А.Ф. (Волгоград); д.м.н., с.н.с., доцент Розыходжаева Г.А. (Ташкент); д.г.-м.н. Сакиев К.С. (Бишкек); д.т.н., проф. Сугак Е.В. (Красноярск); д.ветеринар.н., проф. Трефилов Б.Б. (Санкт-Петербург); к.т.н., доцент Хайдаров А.Г. (Санкт-Петербург); д.м.н., проф. Чарышкин А.Л. (Ульяновск); д.географ.н., проф. Чодураев Т.М. (Бишкек); д.б.н., проф. Шалпыков К.Т. (Бишкек); к.х.н. Шарифуллина Л.Р. (Москва); д.п.н., проф. Щирин Д.В. (Санкт-Петербург)

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ЖУРНАЛ ПРИКЛАДНЫХ
И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

INTERNATIONAL JOURNAL OF APPLIED
AND FUNDAMENTAL RESEARCH

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ.

Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals directory» в целях информирования мировой научной общественности.

Журнал представлен в ведущих библиотеках страны и является рецензируемым.

Журнал представлен в НАУЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ БИБЛИОТЕКЕ (НЭБ) –
головном исполнителе проекта по созданию Российского индекса научного
цитирования (РИНЦ) и имеет импакт-фактор Российского индекса научного
цитирования (ИФ РИНЦ).

Двухлетний импакт-фактор РИНЦ = 0,593.

Пятилетний импакт-фактор РИНЦ = 0,299.

Учредитель, издатель и редакция:
ООО НИЦ «Академия Естествознания»

Почтовый адрес: 105037, г. Москва, а/я 47
Адрес редакции и издателя: 410056, г. Саратов, ул. им. Чапаева В.И., д. 56

ISSN 1996-3955

Тел. редакции – 8-(499)-704-13-41
Факс (845-2)-47-76-77

E-mail: edition@rae.ru

Зав. редакцией Т.В. Шнуровозова
Техническое редактирование и верстка Е.Н. Доронкина
Корректор Е.С. Галенкина, Н.А. Дудкина

Подписано в печать – 30.09.2024
Дата выхода номера – 31.10.2024

Формат 60x90 1/8
Типография
ООО НИЦ «Академия Естествознания»
410035, г. Саратов, ул. Мамонтовой, д. 5

Распространяется по свободной цене

Усл. печ. л. 4,75
Тираж 500 экз.
Заказ МЖПиФИ 2024/9

© ООО НИЦ «Академия Естествознания»

СОДЕРЖАНИЕ

БИОЛОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

СТАТЬИ

- МИКРОЭЛЕМЕНТЫ В ПОЧВЕННО-РАСТИТЕЛЬНОМ ПОКРОВЕ
ВОСТОЧНОЙ ЧАСТИ ИССЫК-КУЛЬСКОЙ ОБЛАСТИ
Калдыбаев Б.К., Арбаев Т.К., Арбаев К.А. 5
- ВЛИЯНИЕ КРОН СОСНЫ И БЕРЕЗЫ НА НАКОПЛЕНИЕ
МИКРОЭЛЕМЕНТОВ В ЛИШАЙНИКЕ PSEUDEVERNIA
FURFURACEA (ЮЖНАЯ ЧАСТЬ ЛАДОЖСКО-ОНЕЖСКОГО
ПЕРЕШЕЙКА, СРЕДНЯЯ ТАЙГА)
Катаева М.Н., Беляева А.И. 10
- ВЫДЕЛЕНИЕ И ОТБОР МИКРООРГАНИЗМОВ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ
ДЛЯ БИОРЕМЕДИАЦИИ НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ ЭКОСИСТЕМ
В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ
*Файзулина Э.Р., Татаркина Л.Г., Спанкулова Г.А., Баймаханова Г.Б.,
Айткельдиева С.А., Смирнова И.Э., Уразова Ж.К.* 16

МЕДИЦИНСКИЕ НАУКИ

СТАТЬЯ

- ИЗМЕНЕНИЕ ТРАНСКРИПЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ ГЕНОВ
АНТИОКСИДАНТНОЙ ЗАЩИТЫ В ПЕЧЕНИ КРЫС В ОТВЕТ
НА ОСТРОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ВЫСОКИХ ДОЗ АКРИЛАМИДА
*Репина Э.Ф., Рябова Ю.В., Якупова Т.Г., Хуснутдинова Н.Ю.,
Хмель А.О., Ахмадеев А.Р.* 21

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

СТАТЬЯ

- ОБОСНОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО
ПРИМЕНЕНИЯ ЛИСТЬЕВ В СМЕСИ С УГЛЕМ
Есин К.С., Мисюкова А.Д., Берикболов А.К., Янковская Н.С., Янковский С.А. 26

ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЕ НАУКИ

СТАТЬЯ

- КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ПОИСКЕ МОДЕЛИ
«СТРУКТУРА – ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ»
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ АК_QSAR В РЯДУ
АМИДОВ И ГИДРАЗИДОВ N-2-ФУРАНОИЛ ЗАМЕЩЕННЫХ
АНТРАНИЛОВЫХ КИСЛОТ
Андрюков К.В. 32

CONTENTS

BIOLOGICAL SCIENCES

ARTICLES

MICROELEMENTS IN SOILS AND PLANTS OF THE EASTERN
PART OF ISSYK-KUL REGION

Kaldybaev B.K., Arbaev T.K., Arbaev K.A. 5

INFLUENCE OF PINE AND BIRCH CROWNS ON ACCUMULATION
OF MICROELEMENTS IN LICHEN PSEUDEVERNIA FURFURACEA
(SOUTH PART OF THE LADOGA-ONEGA ISTHMUS, THE MIDDLE TAIGA)

Kataeva M.N., Belyaeva A.I. 10

ISOLATION AND SELECTION OF MICROORGANISMS
PROMISING FOR BIOREMEDIATION OF OIL-POLLUTED
ECOSYSTEMS IN EXTREME CONDITIONS

*Faizulina E.R., Tatarkina L.G., Spankulova G.A., Baimakhanova B.G.,
Aitkeldiyeva S.A., Smirnova I.E., Urazova Zh.K.* 16

MEDICAL SCIENCES

ARTICLE

CHANGES IN TRANSCRIPTIONAL ACTIVITY OF ANTIOXIDANT
PROTECTION GENES IN THE LIVER OF RAT IN RESPONSE
TO ACUTE EXPOSURE TO HIGH DOSES OF ACRYLAMIDE

*Repina E.F., Ryabova Yu.V., Yakupova T.G., Khusnutdinova N.Yu.,
Khmel A.O., Akhmadeev A.R.* 21

TECHNICAL SCIENCES

ARTICLE

JUSTIFICATION OF THE POSSIBILITY OF ENERGY USE
OF LEAVES MIXED WITH COAL

Esin K.S., Misyukova A.D., Berikbolov A.K., Yankovskaya N.S., Yankovskiy S.A. 26

PHARMACEUTICAL SCIENCES

ARTICLE

QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS IN SEARCH
OF THE “STRUCTURE – ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY”
MODEL USING THE AK_QSAR PROGRAM IN A SERIES
OF AMIDES AND HYDRAZIDES OF N- 2-FURANOYL
SUBSTITUTED ANTHRANILIC ACIDS

Andryukov K.V. 32

СТАТЬИ

УДК 550.47(575.2)

**МИКРОЭЛЕМЕНТЫ В ПОЧВЕННО-РАСТИТЕЛЬНОМ ПОКРОВЕ
ВОСТОЧНОЙ ЧАСТИ ИССЫК-КУЛЬСКОЙ ОБЛАСТИ**

Калдыбаев Б.К., Арбаев Т.К., Арбаев К.А.

*Иссык-Кульский государственный университет им. К. Тыныстанова, Каракол,
e-mail: kbakyt387@gmail.com, arbaetologon@mail.ru, arbaevkalys00@mail.ru*

Цель исследования заключалась в оценке уровней накопления олова и других микроэлементов в почвенно-растительном покрове восточной части Иссык-Кульской области. Пробы почв и растений были отобраны в долининной, предгорной и высокогорной зонах региона. Всего было проанализировано 36 проб почв и 24 пробы растений. Содержание микроэлементов в почвах и растениях определяли методом эмиссионного спектрального анализа, статистическую обработку данных выполняли с использованием программы StataMP-64. Результаты исследования показали, что концентрации олова в почвах и растительности долининной и предгорной зон варьируют в пределах естественных показателей. Содержание других микроэлементов, таких как Cu, Zn, Pb, Cd, также соответствует фоновым значениям и не представляет угрозы для сельскохозяйственной продукции. Особый интерес представляет высокогорная зона региона, где находится ряд месторождений олова, триоксида вольфрама, полиметаллов. Оловянные жилы здесь встречаются редко, их мощность составляет от нескольких до несколько десятков сантиметров, а концентрации олова в почвах относительно низкие, не установлено ярко выраженной биогенной миграции микроэлемента в растениях. С экологической точки зрения данный регион представляет интерес в связи с уникальной ассоциацией редких химических элементов в природных объектах.

Ключевые слова: содержание, олово, микроэлементы, тяжелые металлы, почва, растение, олово-вольфрамовое месторождение

**MICROELEMENTS IN SOILS AND PLANTS
OF THE EASTERN PART OF ISSYK-KUL REGION**

Kaldybaev B.K., Arbaev T.K., Arbaev K.A.

*K. Tynystanov Issyk-Kul State University, Karakol,
e-mail: kbakyt387@gmail.com, arbaetologon@mail.ru, arbaevkalys00@mail.ru*

The aim of the research was to investigate the accumulation levels of tin and other microelements in soils and plants in the eastern Issyk-Kul region. Soil and plant samples were collected in the valley, foothill and highland zones of the study region. A total of 36 soil samples and 24 plant samples were analyzed. Microelements in soil and plant samples were determined by emission spectral analysis; statistical processing of the results was carried out using the StataMP-64 application program. According to the research results, it was established that the tin content in the soil and plant cover of the valley and foothill zones varies within the natural indicators. The content of other microelements (Cu, Zn, Pb, Cd) in the soil varies within the background values and does not pose a danger to plant products. Of particular interest is the highland zone of the region, where a number of deposits of tin, tungsten trioxide, and polymetals are located. Tin veins are rare here, their thickness ranges from several to several tens of centimeters, and tin concentrations in soils are relatively low, no pronounced biogenic migration of the microelement in plants has been established. From an ecological point of view, this region is of interest due to the unique association of rare chemical elements in natural objects.

Keywords: content, tin, microelements, heavy metals, soil, plant, tin-tungsten deposit

Введение

Тяжелые металлы являются одним из загрязнителей, оказывающих значительное влияние на природные экосистемы. Несмотря на то что многие из них необходимы для жизнедеятельности организмов как микроэлементы, их накопление в окружающей среде и загрязнение биосферы ведут к негативным последствиям для природных экосистем [1, с. 39]. За последние годы было опубликовано множество исследований, посвященных распространению тяжелых металлов, их миграции, накоплению и влиянию на живые организмы [2, 3, 4]. Среди них олово представляет

особый интерес, его широкое использование в промышленности приводит к постоянному увеличению объемов добычи и вместе с тем к загрязнению в окружающей среды [5, 6].

Целью исследования явилось изучение уровней накопления олова и других микроэлементов в почвенно-растительном покрове природно-техногенных экосистем восточной части Иссык-Кульской области.

Материал и методы исследования

Для исследования содержания олова и других микроэлементов были отобраны образцы почвы и растительности иссле-

дуюемого региона. Отбор почвенных проб проводился в соответствии с нормативами ГОСТ 17.4.4.02-84 [7]. Растительные образцы были взяты с тех же участков, что и почвенные. Всего было проанализировано 36 почвенных и 24 растительные пробы. Содержание микроэлементов в почвах и растениях определяли методом эмиссионного спектрального анализа в центральной лаборатории Министерства природных ресурсов, экологии и технического надзора Кыргызской Республики. Статистическую обработку данных проводили с использованием программы StataMP-64.

Результаты исследования и их обсуждение

Сведения о распределении олова в земной коре показывают его высокие концентрации в глинистых отложениях (6–10 мг/кг) и низкие – в ультраосновных и известковых породах (0,35–0,50 мг/кг). Олово образует лишь ограниченное количество собственных минералов, основным из которых является касситерит, обладающий

высокой устойчивостью к процессам выветривания. Хотя главным источником олова в почвах считаются материнские породы, его концентрация в верхних слоях почвы практически не отличается. В стандартных почвенных образцах уровень олова составляет около 4,5 мг/кг, в то время как, согласно данным А.П. Виноградова (1957), кларк олова оценивается в 10 мг/кг [8, с. 217]. Результаты исследований показали, что содержание олова в прибрежных почвах восточной части Прииссыккуля варьирует в пределах 1–2 мг/кг. В почвах города Каракол и других населенных пунктов региона содержание олова составляет 2–4 мг/кг. Существенных различий уровней накопления олова по типам почв не установлено. В укосах дикорастущих растений содержатся незначительные концентрации олова, преимущественно данный микроэлемент обнаруживается в корневой системе растений (табл. 1). Средние содержания других микроэлементов в почвах прибрежной зоны восточного Прииссыккуля представлены в таблице 2.

Таблица 1

Статистические характеристики содержания олова в почвах и растениях прибрежной зоны восточного Прииссыккуля

| Вид образца | $\bar{x} \pm m$ (мг/кг) | D | σ | $V, \%$ | Предел колебаний (мг/кг) |
|-----------------------------|----------------------------|-------|----------|---------|-----------------------------|
| Почва | 1,44±0,17 | 0,076 | 0,29 | 20,1 | 1,0–2,0 |
| Растения (надземная часть) | 0,12±0,03 | 0,003 | 0,05 | 41,6 | 0,07–0,21 |
| Растения (корневая система) | 0,20±0,03 | 0,003 | 0,05 | 25 | 0,16–0,31 |

Таблица 2

Средние содержания микроэлементов в почвах прибрежной зоны восточного Прииссыккуля

| Микроэлемент | $\bar{x} \pm m$ (мг/кг) | D | σ | $V, \%$ | Предел колебаний (мг/кг) |
|--------------|----------------------------|----------|----------|---------|-----------------------------|
| Mn | 460±88,4 | 13777,7 | 123,6 | 26,7 | 300–700 |
| Ni | 7,4±2,1 | 8,4 | 2,9 | 28,6 | 3–12 |
| Co | 4,7±1,06 | 2,01 | 18,1 | 1,5 | 3–7 |
| Ti | 4700±799,8 | 112222,2 | 1118,0 | 17,0 | 3000–7000 |
| V | 72,0±11,9 | 306,6 | 16,6 | 16,5 | 50–90 |
| Cr | 61,0±14,7 | 387,7 | 20,6 | 24,2 | 40–90 |
| Zr | 81,0±14,7 | 1076,6 | 9690,0 | 32,8 | 50–150 |
| Cu | 20,4±6,5 | 75,1 | 9,2 | 32,2 | 12–30 |
| Pb | 24,4±7,6 | 103,8 | 10,7 | 31,3 | 12–40 |
| Zn | 69,0±33,7 | 2165,5 | 47,2 | 48,8 | 30–120 |

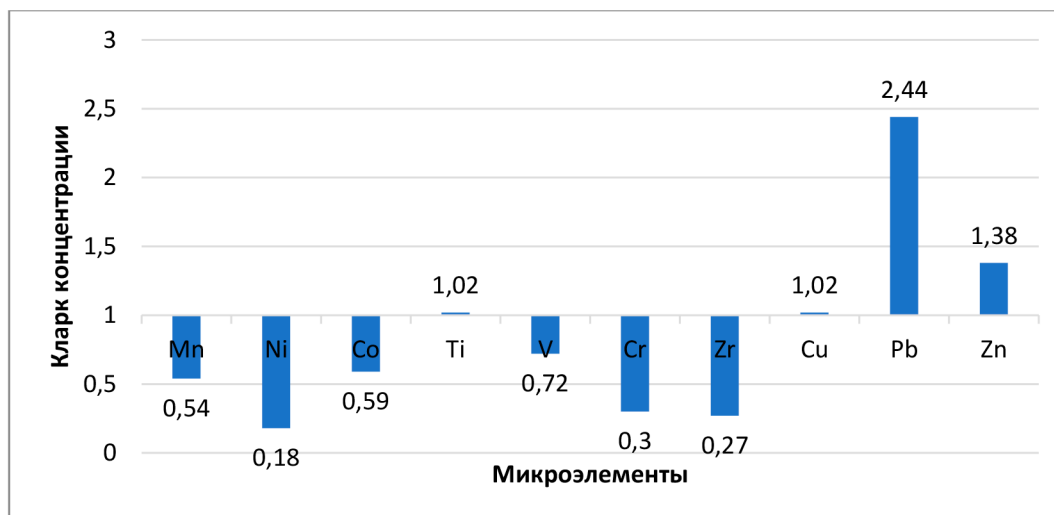


Рис. 1. Кларк концентрации микроэлементов для почв прибрежной зоны восточного Прииссыккуля

Согласно полученным результатам, содержание микроэлементов в почвах региона удовлетворяет существующим биогеохимическим критериям по отношению к кларковым значениям по А.П. Виноградову (1957). Так, например, содержание марганца, никеля, кобальта, ванадия, хрома, циркония, титана, меди, цинка варьирует в пределах показателей кларка, а свинца – выше 2,4 раз, но не превышает ПДК (32 мг/кг) в почве (рис. 1).

В последние годы было проведено множество исследований, направленных на изучение накопления микроэлементов в почвах и растительности региона. Так, Т.Э. Токтоева (2018) установила, что концентрации тяжелых металлов (Pb, Cd, Cu, Zn) в почвах агроэкосистем Прииссыккуля соответствуют фоновым значениям [9]. Результаты А.В. Кенжебаевой (2021) показали, что почвы восточного Прииссыккуля обладают высокой, повышенной и средней устойчивостью к загрязнению Cu, Pb, Cd. Содержание данных тяжелых металлов в почве не представляет опасности для растениеводческой продукции [10].

С давних времен высокогорный регион бассейна реки Сары-Джаз являлся перспективным центром горнорудной деятельности, где находятся ряд месторождений олова, вольфрама, полиметаллов, а также редких и рассеянных элементов. Одним из крупнейших является олово-вольфрамовое месторождение «Трудовое», находящееся в высокогорной зоне восточной части Иссык-Кульской области. Вулканогенно-терригенно-карбонатные породы прорваны массивами гранитов, вмещающих 23 руд-

ные зоны, включающие 191 жильное рудное тело. Здесь преобладают рудные тела кварц-турмалинового состава, главными рудными минералами являются касситерит, шеелит, вольфрамит. Содержание олова колеблется от 0,1 до 1,0%, триоксида вольфрама – 0,1–0,76%, флюорита – до 12,7%. Отдельные участки оловянных руд месторождения частично разрабатываются малыми предприятиями [11, с. 198]. Согласно литературным данным, в почвах в районах с оловорудной минерализацией возможно содержание микроэлементов в количестве на порядок выше по отношению к фоновым показателям [5]. Результаты исследований показали, что содержание олова в верхнем слое почвы (0–10 см) на территории олово-вольфрамового месторождения «Трудовое» колеблется от 4 до 13 мг/кг, а на некоторых участках, где складываются горные породы, концентрация олова в почве достигает 200 мг/кг [12]. Предполагается, что в результате эрозионных процессов происходит частичное перемещение мелкообломочного материала горных пород с территории месторождения на более низкие участки рельефа, где в отдельных пробах почвы наблюдается увеличение содержания олова, а также других микроэлементов: никеля, кобальта, меди, свинца и висмута. Важно отметить, что содержание олова и свинца в почве тесно коррелирует ($r=0,96$), что указывает на взаимосвязь концентраций данных элементов. В растениях, произрастающих на территории месторождения, концентрация олова в наземной части варьирует в пределах 3–8 мг/кг, а в корневой системе – от 5 до 20 мг/кг (табл. 3).

Таблица 3

Статистические характеристики содержания олова
в почвах и растениях олово-вольфрамового месторождения «Трудовое»

| Вид образца | $\bar{x} \pm m$ (мг/кг) | D | σ | $V, \%$ | Предел колебаний (мг/кг) |
|-----------------------------|----------------------------|------|----------|---------|-----------------------------|
| Почва | 7,6±4,6 | 14,3 | 3,7 | 48,6 | 4–13 |
| Растения (укос) | 4,6±2,8 | 5,3 | 2,3 | 50 | 3–8 |
| Растения (корневая система) | 10,8±8,8 | 50,7 | 7,1 | 65,7 | 5–20 |

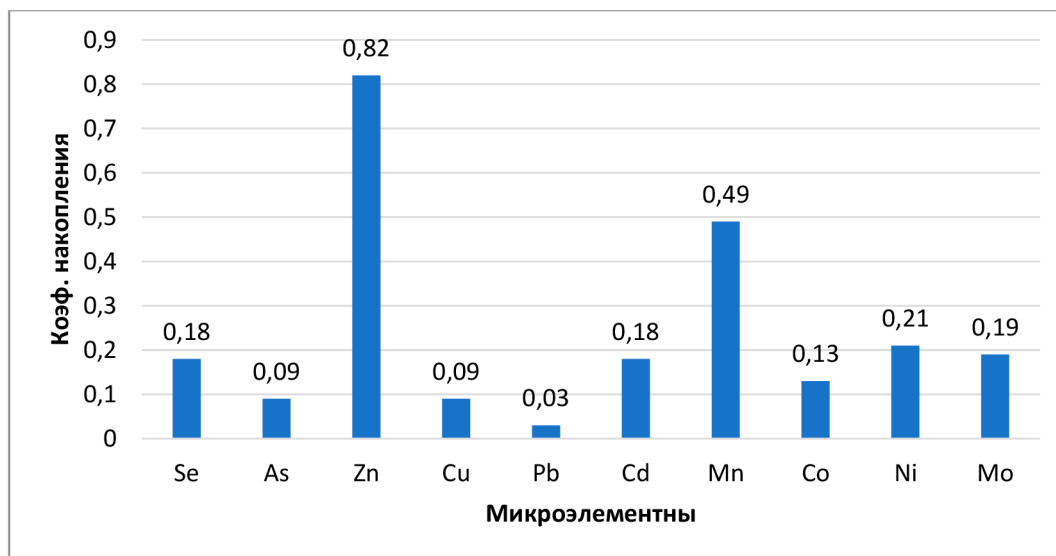


Рис. 2. Коэффициенты накопления микроэлементов
в укосах растений бассейна реки Сары-Джаз

Результаты исследований показали, что апробированные виды растений накапливают микроэлементы в различных концентрациях. Необходимо отметить, что олово накапливается в основном в корневой системе растений относительно их надземной части. Согласно рассчитанному критерию Стьюдента (t), среднее содержание олова в растениях, произрастающих на территории месторождения, статистически достоверно превышает содержание олова в растениях прибрежной зоны восточного Прииссыккуля: для корневой системы $t=3,64$ ($p<0,05$), для надземной части $t=4,3$ ($p<0,05$). В растительных образцах, помимо олова, присутствуют такие микроэлементы, как Be, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Ag, Pb. Уровни накопления данных элементов в растениях соответствуют установленным биогеохимическим критериям. По данным исследований Б.М. Дженбаева (2019), докембрийские углистые сланцы в бассейне реки Сары-Джаз имеют высокую концентрацию селена (10–30 мг/кг), в отдельных случаях

в почвах также фиксируются повышенные концентрации мышьяка, свинца и никеля. Для сланцев и лиддитов характерно обогащение селеном, медью и молибденом. Однако, несмотря на высокое содержание данных микроэлементов в сланцах, их участие в биогеохимическом цикле ограничено, о чем свидетельствуют низкие коэффициенты накопления микроэлементов растениями, значения которых не превышают 1 (рис. 2). По результатам нейтронно-активационного анализа, почвы данного региона обогащены цирконием, сурьмой, ураном, лантаном, неодимом и рядом других редких и рассеянных элементов [13].

Специалисты лаборатории биогеохимии Института биологии НАН КР провели исследование по изучению микроэлементного состава разных видов растений, собранных на Сары-Джазских сыртах. Результаты исследования показали, что уровень накопления микроэлементов в доминантных видах растений региона изменяется в зависимости от условий их произрастания. В горно-

луговых условиях все изученные растения отличались повышенным содержанием меди (Cu) и низким содержанием кобальта (Co) и молибдена (Mo). Уровни содержания микроэлементов (Cu, Co, Mo, Ni, Pb, Zn) также различаются в экологически разнородных группах растений. Микроэлементный состав растений и почв горных склонов различается в зависимости от абсолютной высоты и экспозиции [14, с. 246].

Заключение

Результаты исследований показали, что уровень накопления олова и других микроэлементов в почвах и растительности восточной части Иссык-Кульской области соответствует естественным показателям. Особое внимание привлекает высокогорная зона данного региона, где находятся ряд месторождений олова, триоксида вольфрама, полиметаллов. Оловянные жилы мощностью до несколько десятков сантиметров и раздувы здесь редки, а содержание в почвах олова относительно невысокое. В условиях олово-вольфрамового месторождения «Трудовое» не установлено ярко выраженной биогенной миграции олова в почвенно-растительном покрове. С экологической точки зрения данный высокогорный регион представляет интерес в связи с уникальной ассоциацией редких химических элементов в природных объектах.

Список литературы

1. Абрамов Б.Н. Закономерности распределения токсичных элементов в почвах населенных пунктов горнорудных территорий Восточного Забайкалья // Геоэкология. Инженерная геология, гидрогеология, геохронология. 2022. № 5. С. 39-48. DOI: 10.31857/S0869780922050022.
2. Qin M., Jin Y., Peng T., Zhao B., Hou D. Heavy metal pollution in Mongolian-Manchurian grassland soil and effect of long-range dust transport by wind. *Environment International*. 2023. Vol. 177. No. 108019. DOI: 10.1016/j.envint.2023.108019.
3. Feng J., Ai H., Chen Q., Li H., Wang W., Xue Z. Evaluation and Migration Path Analysis of Soil Heavy Metal Pollution in a Metal Mining Area of Qinling Mountain // *Rock and Mineral Analysis*. 2023. Vol. 42. No. 6. P. 1189-1202. DOI: 10.15898/j.ykcs.202302170021.
4. Manyiwa T., Ultra V.U., Rantong G. Heavy metals in soil, plants, and associated risk on grazing ruminants in the vicinity of Cu-Ni mine in Selebi-Phikwe, Botswana // *Environmental Geochemistry and Health*. 2022. Vol. 44. No. 5. P. 1633-1648. DOI: 10.1007/s10653-021-00918-x.
5. Ивашов П. В. Биогеохимическая провинция олова в южной части Дальнего Востока России // *Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук*. 2021. № 2(216). С. 55-62. DOI: 10.37102/0869-7698_2021_216_02_06.
6. Арбаев Т.К., Калдыбаев Б.К., Арбаев К.А., Касымбеков Р.К. Содержание олова в горных экосистемах Иссык-Кульской области // *Вестник Международного университета Кыргызстана*. 2021. № 2(43). С. 40-44.
7. ГОСТ 17.4.4.02-2017 «Межгосударственный стандарт. Охрана природы. Почвы. Методы отбора и подготовки проб для химического, бактериологического, гельминтологического анализа. 2018, 10 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://fsvps.gov.ru/files/gost-17-4-4-02-2017-mezhgosudarstvennyj-standart/> (дата обращения: 08.08.2024).
8. Виноградов А.П. Геохимия редких и рассеянных химических элементов в почвах. М.: АН СССР, 1957. 219 с.
9. Токтоева Т.Э. Эколого-радиобиогеохимическая оценка почвенно-растительного комплекса агроэкосистем Прииссыккуля: автореф. дис. ... канд. биол. наук. Бишкек, 2018. 25 с.
10. Кенжебаева А.В. Эколого-биогеохимическая оценка почвенно-растительного покрова прибрежной зоны восточного Прииссыккуля: автореф. дис. ... канд. биол. наук. Бишкек, 2022. 21 с.
11. Никаноров В.В. Рудные месторождения Кыргызстана. Бишкек, 2009. 482 с.
12. Арбаев Т.К., Калдыбаев Б.К. Биогенная миграция микроэлементов в почвенно-растительном покрове г. Каракол // *Исследование живой природы Кыргызстана*. 2021. № 1. С. 49-52.
13. Дженбаев Б.М., Ермаков В.В., Дыйканов К., Иматалы к.К. Биогеохимические особенности селена в природно-техногенных ландшафтах (Кыргызстан) // *Доклады Национальной академии наук Кыргызской Республики*. 2019. № 1. С. 45-49.
14. Дженбаев Б.М. Биогеохимия горных экосистем Кыргызстана // *Современные тенденции развития биогеохимии. Труды Биогеохимической лаборатории*. Т. 25. М.: ГЕОХИ РАН, 2016. С. 237-250.

**ВЛИЯНИЕ КРОН СОСНЫ И БЕРЕЗЫ
НА НАКОПЛЕНИЕ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ В ЛИШАЙНИКЕ
PSEUDEVERNIA FURFURACEA (ЮЖНАЯ ЧАСТЬ
ЛАДОЖСКО-ОНЕЖСКОГО ПЕРЕШЕЙКА, СРЕДНЯЯ ТАЙГА)**

Катаева М.Н., Беляева А.И.

*Ботанический институт им. В.Л. Комарова РАН, Санкт-Петербург,
e-mail: mkmarikat@gmail.com*

Проведено определение микроэлементного состава эпифитного лишайника *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf (Parmeliaceae). Самые низкие концентрации были обнаружены в лишайнике, собранном со стволов сосны в более сухих условиях местообитаний. Талломы лишайника в верхней части кроны сосны обычно накапливают более высокие концентрации Cd, Pb, Fe, что связано с поступлением осадков. Крона можжевельника способствует более высокому накоплению металлов в лишайнике (Ni, Cd, Pb). Выявлено возрастание концентраций Mn и Zn в лишайнике в разных экологических условиях сообществ на стволах березы. В осоково-кустарничково-сфагновом болоте микроэлементный состав лишайника на стволах березы пушистой отличается содержанием Mn и Zn по сравнению с концентрациями в кроне сосны. Дана оценка биомассы лишайника. Лишайник показал более высокую аккумулирующую способность по отношению к металлам, чем хвоя и листья. Талломы лишайника накапливают тяжелые металлы интенсивнее по сравнению с хвоей можжевельника и сосны: Cd в 2,0–4,9 раза, Pb в 2,4–4,9 раза, Fe в 3,4–14 раз. В лишайнике на березе выше концентрации Cd в 1,5–3,9 раза, Pb в 3,7–5,6 раза, Fe, чем в корке ствола.

Ключевые слова: средняя тайга, микроэлементы, *Pseudevernia furfuracea*, сосна, береза

Работа выполнена по плановой теме НИР № 121032500047-1 «Растительность европейской части России и северной Азии: разнообразие, динамика и принципы организации».

**INFLUENCE OF PINE AND BIRCH CROWNS ON ACCUMULATION
OF MICROELEMENTS IN LICHEN PSEUDEVERNIA FURFURACEA
(SOUTH PART OF THE LADOGA-ONEGA ISTHMUS, THE MIDDLE TAIGA)**

Kataeva M.N., Belyaeva A.I.

Komarov Botanical Institute RAS, Sankt-Petersburg, e-mail: mkmarikat@gmail.com

Determination of microelemental composition of epiphytic lichen thalli *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf (Parmeliaceae) was performed. The lowest concentrations of heavy metals were found in sampled lichens from pine trunks in drier conditions of habitats. Lichen thalli located in the upper part of Scots pine crown accumulate higher concentrations of Cd, Pb, Fe, which is associated with precipitation. The juniper crown promotes the higher accumulation of metals (Ni, Cd and Pb) in lichen thalli. The increase of concentration of Mn and Zn in lichen on birch trunks in different communities was revealed. The microelement composition of the lichen on downy birch trunks in the sedge-dwarf shrub-sphagnum mire community differ from the pine trunks and branches by concentrations of Mn and Zn. An assessment of biomass of lichen is given. Lichen demonstrated more efficient accumulative ability of metals than needles and leaves. Lichen thalli accumulate metals intensively in comparison with needles of juniper and pine, Cd (2.0–4.9 fold), Pb (2.4–4.9 fold), Fe (3.4–14 fold). In lichen growing on birch concentrations of metals were higher than in outer bark of trunks, Cd (1.5–3.9 fold), Pb (3.7–5.6 fold), and Fe.

Keywords: middle taiga, microelements, *Pseudevernia furfuracea*, Scots pine, birch

The work was carried out according to the planned research topic No. 121032500047-1 “Vegetation of the European part of Russia and northern Asia: diversity, dynamics and principles of organization”.

Введение

Сохранение биоразнообразия является основной целью в рациональном взаимодействии общества и окружающей среды. Возрастающее промышленное развитие связано с вовлечением в природную среду химических элементов. В промышленных выбросах тяжелые металлы могут распространяться на значительные расстояния и длительное время накапливаться в лесных сообществах. Загрязнение воздуха и почвы тяжелыми металлами около горно-металлургических предприятий ведет к много-

кратному превышению фоновых концентраций в листьях растений.

Эпифитные лишайники используются при оценке воздушной среды в биоиндикации. Широкий диапазон устойчивости позволяет лишайникам заселять самые малоблагоприятные местообитания, сухие, холодные, малопригодные для других растений. Представляет интерес выявить влияние на лишайники эколого-ценотических условий для оценки фоновых значений микроэлементов. Ряд микроэлементов лишайники аккумулируют интенсивнее по сравнению с однолетними органами растений.

В экологической классификации используется понятие «тяжелые металлы», также применяется название «потенциально токсичные элементы».

Местонахождения редких и охраняемых видов лишайников на северо-востоке Ленинградской области связаны с малонарушенными и старовозрастными лесами, специфичными биотопами [1, 2]. Малонарушенные сообщества, которые также представляют важные точки миграции птиц в регионе, сохранились в лесных и прибрежных районах Ладожского озера. Хвоя сосны, листья и почки березы, ивы – корм для растительноядных птиц, глухарей и куропаток. При загрязнении изменяется качество кормов в рационе птиц. В зимнем корме куропатки – в побегах ивы шерстистой, *Salix lanata* L. – накапливается Cd, что вызвано концентрирующей способностью [3]. Содержание этого элемента в листьях и хвое в этом регионе мало изучено. Лишайники, главным образом напочвенные виды, представляют корм для популяций дикого северного оленя, среди кормовых видов лишайников оленя карибу есть и виды эпифиты [4]. Птицы часто используют лишайники в качестве строительного материала для гнезд.

Известно, что в кронах леса состав атмосферных осадков обогащается органическими веществами и подвижными элементами, в кронах изменяется их растворимость. Биологические особенности хвойных пород – сосны, ели, можжевельника – могут влиять на биоаккумуляцию тяжелых металлов в лишайниках.

Вид *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf предпочитает освещенные местообитания, встречается на коре стволов и ветвей разных видов деревьев довольно часто. На стволах сосны этот вид обычный. *P. furfuracea* относится к группе умеренно устойчивых лишайников. У этого вида встречаются разные формы.

Цель исследования: определить содержание тяжелых металлов (Ni, Cu, Cd, Pb, Fe, Mn, Zn) в виде *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf, сем. Parmeliaceae, при различной локализации местообитаний в кронах и стволах сосны по сравнению с березой; также оценить влияние на лишайник эколого-ценотических условий в среднетаежной подзоне.

Материал и методы исследования

Образцы корки стволов и талломов лишайника *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf собирали на сосне *Pinus sylvestris* L. и березе *Betula pendula* Roth. на высоте 1,3 м (сосняк кустарничково-зеленомошный), также

в кронах сосняка – 4,2–5 м. При сильных штормовых порывах ветров в 2021 г. местами произошли летние вывалы деревьев в сосняках вблизи побережья Ладоги. Лишайник собран в верхних и средних частях крон свежих ветровальных деревьев сосны и березы на ветвях (сосняк лишайниково-зеленомошный). В неповрежденном ветровале сосняка вид собран на стволах сосны и березы (до 30 см в диаметре), в кроне кустов можжевельника в подлеске [5]. В ветровале лишайник был собран на ветвях в кронах березы, при его большей встречаемости.

Местообитания лишайника на краю болота приурочены к кронам сосны, ели и березы, вид встречается на сухостойных деревьях сосны. В условиях болота осоково-кустарничково-сфагнового лишайник собирали на стволах и ветвях сосны в кронах, на корке тонких стволов березы. Деревья на болоте низкорослые, высота деревьев березы пушистой *Betula pubescens* Ehrh. не более 2,5–4 м, сосен, с шишками – до 4 м; на болоте также есть сухостойные деревья. Возраст березы на болоте до 35 лет. Диаметр основания ствола березы – 5,5–6,0 см, ствола сосны – 8 см, на высоте таксационного диаметра 1,3 м – 5,7 см. Ветви сосны в кроне тонкие. Признаков пожарных повреждений в сообществах (таких как угли в подстилке, повреждения стволов деревьев) не выявлено. Образцы вида лишайника также собирали в ельнике.

Образцы лишайника *Pseudevernia furfuracea* (талломы 4–7 см, с берез 4–8 см) собраны в июле–августе 2018–2019 гг. и в 2023 г. на юге Ладожско-Онежского перешейка, бассейн р. Свирь, северо-восток Ленинградской области, Лодейнопольский р-н [5, 6].

Хвою ветвей сосны разделяли на приросты по годам формирования. В хвое сосны содержание микроэлементов определяли по годам: в хвое 1 года (2017), хвое текущего года формирования (2018). Анализировали также средний образец хвои сосны. Прирост веточек сосны текущего года на болоте составил 2,2–3,2 см, длина хвои сосны – 3 см. В сосняке длина хвои сосны 2018 г. – 5 см. Хвою можжевельника анализировали в средних смешанных образцах, с преобладанием хвои текущего года и однолетней. Повторность сбора образцов лишайника на форофитах 3–6 экземпляров.

Пробы лишайников, корки стволов, листья березы, хвою сосны и можжевельника из местообитаний высушивали в термостате. В пробах концентрации химических элементов определяли на атомно-абсорбционном спектрофотометре (ААС) Квант-АФА,

Россия, после озоления в муфеле (450°C), их растворения при нагреве в 2N HCl и фильтрации через фильтр «синяя лента» [6]. Анализ проведен в двух повторностях. Использовали ГСО. Результаты измерений обрабатывали в стандартном пакете программы Microsoft Excel 2010.

Результаты исследования и их обсуждение

Сомкнутый полог леса создает градиент температуры, влажности, освещенности по вертикали и образует различные условия местообитаний лишайников. Под пологом леса создается благоприятный режим питания и роста эпифитных лишайников: сглаживается амплитуда температур воздуха и почвы, уменьшается интенсивность испарения. Под кронами более влажный микроклимат. Степень развития кроны (ее сквозистость) влияет на световой и гидро-термический режимы под пологом леса. Лишайники на древесном субстрате болот растут в микроклимате с контрастным режимом температур, при высокой влажности воздуха, в условиях повышенной солнечной инсоляции при слабом развитии и влиянии кроны.

Сопоставляли содержание микроэлементов в лишайнике *P. furfuracea* в различных экологических условиях местообитаний. Анализ показал, что в кроне свежих ветровальных деревьев в лишайнике содержание микроэлементов выше, чем в сосняке на стволах (табл. 1).

По сравнению с атмосферными осадками на состав осадков под кронами влия-

ет древесная растительность. Как известно, осадки представляют источник питания лишайников. С осадками из кроны вымываются биогенные и потенциально токсичные элементы. Стволовые осадки более концентрированные.

В местообитаниях на стволах березы содержание Zn, Mn, Cd в талломах *P. furfuracea* выше относительно стволов сосны. Содержание цинка (Zn) выше в 1,9 и 2,2 раза в лишайнике на ветвях и стволах березы соответственно. Концентрация Cd на стволах березы в лишайнике в 1,6 раза выше, чем на ветвях березы, что согласуется с ранее полученными данными [5, 6].

В хвое сосны текущего года в дренированном сообществе содержатся менее высокие концентрации Mn относительно березы и можжевельника (табл. 2).

В зависимости от почвенных условий, региона и вида Mn в листьях березы содержится от 520 до 1500 мг/кг [7–9]. В лишайнике в 3,4–5,8 раза меньшие концентрации Mn относительно листьев березы – 736–1930 мг/кг (табл. 1, 2).

В листьях березы также сильнее накапливается Zn [7, 8]. Для березы обычен сток осадков по гладкой корке ствола. Под кронами березы в осадках выше концентрации водорастворимых форм элементов – Zn и Mn. По сравнению с хвоей сосны и можжевельника в листьях березы Zn накапливается интенсивнее. Помимо листьев березы, Zn содержат и накапливают другие части кроны [9]. Хвоя сосны текущего года менее интенсивно накапливает Zn – в 3,9–4,2 раза меньше, чем листья березы.

Таблица 1

Средние концентрации микроэлементов в *Pseudevernia furfuracea*, мг/кг сухой массы

| Субстрат | Ni | Cu | Cd | Pb | Fe | Mn | Zn |
|---|-----------|----------|------------|----------|--------|--------|-------|
| Сосняк кустарничково-зеленомошный, высота 1,3 м | | | | | | | |
| Сосна, на стволе | 0,47±0,04 | 2,1±0,3 | 0,129±0,01 | 1,3±0,16 | 117±9 | 100±10 | 43±5 |
| Стволы, ветви можжевельника | 0,91±0,33 | 2,3±0,26 | 0,160±0,02 | 1,9±0,31 | 174±28 | 136±13 | 38±2 |
| Стволы березы повислой | 0,80±0,12 | 2,1±0,08 | 0,182±0,02 | 2,7±0,80 | 126±24 | 565±99 | 80±7 |
| Сосняк лишайниково-зеленомошный, ветровал, высота 4,2–5 м | | | | | | | |
| Ветви сосны, крона | 1,24±0,24 | 3,3±0,33 | 0,164±0,01 | 2,8±0,02 | 460±90 | 55±3 | 39±5 |
| Ветви березы повислой, крона | 0,63±0,06 | 2,1±0,07 | 0,111±0,01 | 2,2±0,01 | 172±24 | 127±17 | 85±8 |
| Болото осоково-кустарничково-сфагновое, высота 1,3 м | | | | | | | |
| Крона сосны, ствол и ветви | 1,14±0,5 | 3,6±0,6 | 0,217±0,10 | 4,1±0,33 | 340±11 | 29±15 | 39±5 |
| Стволы березы пушистой | 0,99±0,34 | 2,2±0,3 | 0,126±0,02 | 2,7±1,0 | 274±72 | 79±14 | 60±12 |
| Ельник кустарничково-зеленомошный, высота 1,3 м | | | | | | | |
| Сухие ветви ели без коры | 0,80±0,03 | 2,3±0,03 | 0,106±0,01 | 2,5±0,18 | 172±9 | 212±90 | 49±4 |
| Ветви ели, вблизи ручья | 1,1±0,01 | 2,4±0,01 | 0,127±0,01 | 2,9±0,02 | 196±5 | 263±4 | 64±5 |

Таблица 2

Концентрации металлов в хвое сосны и листьях березы, корке стволов в различных сообществах, мг/кг сухой массы

| Образец | Ni | Cu | Cd | Pb | Fe | Mn | Zn |
|--|-----------|----------|------------|-----------|--------|----------|--------|
| Сосняк кустарничково-зеленомошный, 1,3 м | | | | | | | |
| Сосна, в корке ствола | 0,33±0,05 | 2,5±0,01 | 0,340±0,02 | 2,4±0,06 | 74±8 | 100±1 | 15±1 |
| Хвоя сосны текущий год (2018) | 1,4±0,06 | 2,6±0,4 | 0,050±0,01 | < | 24±4 | 606±136 | 37±2 |
| Хвоя сосны 1 год (2017) | 0,7±0,1 | 2,1±0,4 | 0,066±0,01 | < | 34±8 | 1160±370 | 41±1 |
| Хвоя можжевельника | 3,7±0,5 | 1,8±0,2 | 0,033±0,01 | 1,2±0,2 | 38±7 | 2820±670 | 16±1 |
| Листья березы | 4,0±0,07 | 3,9±0,06 | 0,26±0,02 | < | 32±2 | 1930±42 | 154±2 |
| Сосняк лишайниково-зеленомошный, ветровал, кроны сосны и березы, 4,2–5 м | | | | | | | |
| Корка ветвей сосны 6–7 мм | < | 3,9±0,1 | 0,314±0,01 | 0,99±0,1 | 74±0,2 | 186±5 | 33±1 |
| Хвоя сосны текущий год | 0,40±0,01 | 1,6±0,01 | 0,074±0,0 | 0,40±0,1 | 30±0,4 | 390±10 | 39±1 |
| Хвоя сосны, 1 год | < | 1,4±0,02 | 0,089±0,01 | 0,72±0,01 | 35±1 | 674±22 | 49±1 |
| Листья березы | 1,2±0,09 | 3,9±0,05 | 0,100±0,01 | 0,69±0,2 | 44±0,5 | 736±69 | 155±11 |
| Корка ствола березы, 1,3–4 м | 0,18±0,01 | 3,2±0,02 | 0,028±0,01 | 0,40±0,01 | 12±5 | 143±52 | 47±13 |
| Ельник кустарничково-зеленомошный | | | | | | | |
| Хвоя текущего года и 1–2 лет | 0,98±0,4 | 1,3±0,2 | 0,020±0,01 | 0,33±0,2 | 15±0,3 | 1165±450 | 33±0,5 |
| Ветви сухие | 0,21±0,01 | 0,86±0,1 | 0,050±0,01 | 2,3±0,1 | 17±0,5 | 65±4 | 9±0,8 |

В листьях березы содержание Zn в 1,83–1,94 раза выше содержания элемента в талломах лишайника на ветвях и стволах (табл. 1–3), что было показано для вида *Hypogymnia physodes* [5]. В лишайнике *P.furfuracea* на березе накопление Zn выше концентраций, характерных для состава на сосне.

Особенности химического состава листьев березы влияют через осадки на состав лишайника, определяют содержание в нем более высоких концентраций Zn, Mn, и Cd. Анализ показал, что в хвое сосны относительно листьев березы концентрация Cd гораздо ниже – от 1,35 до 3,9–5,2 раза (до 5,3 раза на болоте). Прирост побега сосны на болоте накапливает Cd также гораздо слабее – 0,084 мг/кг (табл. 3). В фоновых условиях листья берез способны накапливать Cd интенсивнее – до 0,29–0,67 мг/кг [7, 9]. Кадмий в хвое ели и можжевельника накапливается еще в меньшем количестве, чем в хвое сосен (табл. 2). Концентрирующая способность березы по отношению к Cd и Zn выше.

В талломах лишайника Cd накапливается интенсивнее, чем в хвое сосны, можжевельника и ели. Свинец содержится в несколько большем количестве в ветвях

ели, корке стволов сосны – 1,0–2,4 мг/кг (табл. 2–3). Более высокое накопление Fe – в лишайнике в кроне сосны на болоте. Цинк в большей степени накапливает *P.furfuracea* относительно корки сосны – в 1,2–2,8 раза.

Хвойные породы – ель, можжевельник – образуют развитую крону со значительной массой хвои. В кроне ели при влиянии большой поверхности хвои осадки задерживаются. Сток осадков по стволам взрослых деревьев ели незначительный, на стволах образуются довольно сухие условия. В нижней части крон ели на ветвях в большей степени благоприятные условия влажности для роста лишайников, чем на стволах. Кроме этого, сухие ветви ели влагоемкие, по краю ветвей кроны ели поступает больше осадков. По-видимому, этот тип местообитания, на ветвях ели около ручья, более влажный. Вверху кроны сосны в лишайнике содержание Pb и Fe выше, чем на ели и на можжевельнике.

Меньшее количество Mn содержит лишайник на болотной сосне по сравнению с другими форофитами. Кадмий, Fe и Pb в талломах лишайника *P.furfuracea* в кроне сосны на высоте 4,2–5 м и в кроне болотной сосны накапливаются больше относительно лишайника на стволе сосны.

Таблица 3

Концентрации тяжелых металлов в местообитаниях лишайника на болоте,
мг/кг, сухой массы

| Образец | Ni | Cu | Cd | Pb | Fe | Mn | Zn |
|--|-----------|-----------|------------|-----------|--------|---------|--------|
| Болото осоково-кустарничково-сфагновое, 1,3 м, на сосне | | | | | | | |
| Хвоя текущий год, 2018 | 0,33±0,01 | 2,1±0,01 | 0,035±0,01 | 0,64±0,3 | 13±3 | 95±9 | 32±0,6 |
| Хвоя 1 год, 2017 | < | 1,81±0,01 | 0,049±0,01 | 0,95±0,02 | 37±1 | 180±5 | 59±1 |
| Хвоя 1–2 лет, смесь | < | 1,7±0,1 | 0,039±0,01 | 0,97±0,08 | 42±4 | 160±7 | 54±4 |
| Прирост 2,2–3 см | < | 2,5±0,1 | 0,084±0,01 | 0,65±0,1 | 16±1 | 37±1 | 20±1 |
| Корка ствола | < | 1,2±0,05 | 0,186±0,01 | 1,2±0,1 | 29±1 | 28±0,7 | 25±1 |
| Корка ветвей | < | 2,1±0,01 | 0,145±0,02 | 1,1±0,2 | 52±1 | 25±0,8 | 20±1 |
| Болото осоково-кустарничково-сфагновое, 1,3 м, на молодой березе | | | | | | | |
| Листья крона | 0,66±0,3 | 1,4±0,08 | 0,25±0,09 | 0,53±0,08 | 54±12 | 517±170 | 130±23 |
| Корка ствола | < | 3,2±0,02 | 0,08±0,01 | 0,73±0,02 | 10±0,5 | 120±15 | 48±5 |

На болоте прирост сосны лимитируется неблагоприятными условиями минерального питания, низкой температурой корнеобитаемого слоя. При неблагоприятных условиях роста в хвое болотной сосны довольно низкие концентрации Mn, Zn, Cd (табл. 3).

Менее интенсивный и менее продолжительный прирост древесины приводит к снижению радиального прироста ствола сосны, приросту в высоту. Для сосны на болоте характерны снижение жизненного состояния и слабый рост хвои. Содержание биогенных микроэлементов в хвое сосны на болоте также ниже [10]. На сосне Mn и Zn в *P. furfuracea* содержатся в меньшем количестве, чем на березе пушистой (табл. 1).

Содержание свинца выше в талломах лишайника, чем в листьях березы, Pb (выше в 3,2–5,4 и 5,1 раза на болоте), Fe (выше 3,8–3,9 и 5 раз). Превышение относительно корки березы в талломах лишайника: по Cd – в 1,5–3,9 раза, Pb – в 5,6–3,7 раза, Fe – до 14–30 раз. Лишайник накапливает тяжелые металлы в большей степени, чем хвоя можжевельника и сосны: Cd – в 2,0–4,9 раза, Pb – в 2,4–4,9 раза, Fe – в 3,4–14 раз.

Содержание свинца в лишайнике в кроне сосны выше Pb, (в 2,1 раза), Fe, (в 3,9 раз), также Cd (в 1,2 раза) по сравнению со стволами сосны. Это связано, очевидно, с распределением осадков и их более умеренным поступлением на стволы сосны, чем на ветви кроны. Показано, что основная часть биомассы *P. furfuracea* приурочена именно к кроне сосны [11]. Лишайник *P. furfuracea* – выносливый вид в освещенных условиях местообитаний болота, этот лишайник разрастается на стволах березы при влажном микроклимате болота, стоке на стволе. Крона березы способствует не-

которому затенению его местообитаний и росту лишайника под ней. Биомасса всех лишайников на стволах молодых деревьев березы пушистой достигает до ¼ сухой массы листьев кроны [12].

При почвенном питании сообществ и в условиях гидроморфного питания на болоте состав лишайника различается, существенно влияние на лишайник видов форофитов, березы и сосны. На сосне лишайник содержит Mn меньше в 2,72 раза, Zn в 1,54 раза. В сосняке на стволах березы эти различия еще больше: Mn в 5,65 раза, Zn в 1,86 раза, что согласуется с *Hypogymnia physodes* [5]. В *P. furfuracea* на болотной сосне Cd содержится в более высоком количестве, чем на березе, возрастает содержание Pb и Fe.

Накопление Cd в листьях березы слабее по сравнению с ивой [3]. В листьях березы концентрации Cd ниже по сравнению со средними концентрациями в листьях трех разных видов ивы: *Salix lanata*, *S. saxatilis*, *S. reticulata*, Cd – 2,94 мг/кг, меньше различия по Zn – 103 мг/кг и до 214 мг/кг [3].

Пигмент меланин в талломах *P. furfuracea* имеет защитную функцию от действия интенсивного света, он может образовывать комплексы с металлами и таким способом влиять на их накопление в лишайнике в более освещенных условиях местообитаний болота. Под пологом соснового леса в осадках смещается pH, они становятся более кислыми. В хвое сосны концентрации Cd низкие, ниже, чем в листьях березы, и более вероятно, что на талломах лишайника в кроне сосны влияет поступление осадков, в частности снеговых осадков, пыли.

Следует отметить, что аккумулирующая способность вида *P. furfuracea* по разным элементам до 1,5–2,5 раз ниже по сравне-

нию с *Hypogymnia physodes*; необходимо учитывать возраст талломов лишайников, особенности структуры сообществ.

Содержание потенциально токсичных элементов, определенных в лишайнике, не превышает фоновых значений для лишайников на северо-востоке России: Cd – 0,7 мг/кг [13], *P. furfuracea* в Европе – 0,145 мг/кг [14], в видах лишайников фоновых территорий на северо-востоке Канады – 0,240 мг/кг [15]. По другим элементам превышения фоновых значений также не обнаружено.

В биогеохимической пищевой цепи в организмах птиц при питании таким кормом, как почки и листья березы, может возрастать содержание Cd и Zn.

Заключение

В талломах лишайника *Pseudevernia furfuracea* (L.) Zopf, растущего в верхней части кроны сосны дренированного сосняка, как и в кроне болотной сосны, выше содержание Cd, Fe и Pb. Более высокая аккумуляция Mn, Zn отмечается в сосняке Cd в лишайнике на стволах берез. В местообитаниях на стволах сосны лишайник слабее накапливает ТМ.

Список литературы

1. Сорокина И.А., Степанчикова И.С., Гимельбрант Д.Е., Ликсакова Н.С., Спиринов В.А., Кушневская Е.В., Гагарина Л.В., Ефимов П.Г. Краткие очерки трех планируемых ООПТ востока Ленинградской области // Ботанический журнал. 2017. Т. 102, № 9. С. 1270–1289.
2. Ликсакова Н.С., Сорокина И.А. Редкие растительные сообщества на проектируемых для охраны территориях на востоке Ленинградской области // Ботанический журнал. 2017. Т. 102, № 2. С. 232–248.
3. Ермолов Ю.В., Лебедева М.А., Бондарь М.Г., Колпашиков Л.А., Черевко А.С., Смоленцев Н.Б. Особенности аккумуляции химических элементов в биогеохимической пищевой цепи северной части Норильского плато // Геохимия. 2020. Т. 65, № 5. С. 499–510.
4. Goward T., Coxson D., Gauslaa Y. The Manna-effect – a review of factors influencing hair lichen abundance for Canada's endangered deep snow mountain caribou (*Rangifer arcticus montanus*) // Lichenologist. 2024. P. 1–15. DOI: 10.1017/S0024282924000161.
5. Катаева М.Н., Беляева А.И. Содержание тяжелых металлов в эпифитном лишайнике *Hypogymnia physodes* в среднетаежном сосняке // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2023. № 5. С. 11–17. DOI: 10.17513/mjpf.13536.
6. Катаева М.Н., Беляева А.И. Накопление тяжелых металлов в эпифитных лишайниках в различных микрореституциях на ели европейской в подзоне средней тайги // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2022. № 8. С. 7–14. DOI: 10.17513/mjpf.13419.
7. Nordlokken M., Berg T., Flaten T.P., Steinnes E. Essential and non-essential elements in natural vegetation of southern Norway: contribution from different sources // The Science of the Total Environment. 2015. № 502. P. 391–399.
8. Сухарева Т.А. Особенности накопления химических элементов древесными растениями северотаежных лесов на фоновых и техногенно нарушенных территориях // Труды Фермановской научной сессии ГИ КНЦ РАН. 2017. № 14. С. 438–441.
9. Кузнецова Т.Ю., Ветчинникова Л.В., Титов А.Ф. Аккумуляция тяжелых металлов в различных органах и тканях березы в зависимости от условий произрастания // Труды Карельского научного центра РАН. 2015. № 1. С. 86–94.
10. Пьявченко И.И. Биологическая продуктивность и круговорот веществ в болотных лесах Западной Сибири // Лесоведение. 1967. № 3. С. 32–43.
11. Liu C., Ilvesniemi H., Westman C. J. Biomass of arboreal lichens and its vertical distribution in a boreal coniferous forest in Central Finland // Lichenologist. 2000. № 32(5). P. 495–504.
12. Катаева М.Н., Беляева А.И. Содержание тяжелых металлов в эпифитных лишайниках и оценка их биомассы в лесных и болотных фитоценозах средней тайги // Сборник всероссийской конференции с международным участием «Продуктивность лесов в условиях меняющегося климата, посвященная 100-летию Н.И. Казимирова». Петрозаводск: КНЦ РАН, 2024. С. 47.
13. Табаленкова Г.Н., Далькэ И.В., Головки Т.К. Элементный состав биомассы некоторых видов лишайников бореальной зоны на Европейском Северо-Востоке // Известия Самарского НЦ РАН. 2016. Т. 18. № 2. С. 221–225.
14. Cecconi E., Incerti G., Capozzi F., Adamo P., Bargagli R., Benesperi R., Carniel F., Favero-Longo S.E., Giordano S., Puntillo D., Ravera S., Spagnuolo V., Tretiach M. Background element content of the lichen *Pseudevernia furfuracea*: A supra-national state of art implemented by novel field data from Italy // The Science of the Total Environment. 2018. Vol. 622–623. P. 282–292.
15. Darnajoux R., Lutzoni F., Miadlikowska J., J.-P. Belanger Determination of elemental baseline using peltigeralean lichen from Northeastern Canada (Quebec): Initial data collection for long-term monitoring of the impact of global climatic change on boreal and subarctic area in Canada // The Science of the Total Environment. 2015. Vol. 533. P. 1–7.

ВЫДЕЛЕНИЕ И ОТБОР МИКРООРГАНИЗМОВ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ БИОРЕМЕДИАЦИИ НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ ЭКОСИСТЕМ В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Файзулина Э.Р., Татаркина Л.Г., Спанкулова Г.А., Баймаханова Г.Б.,
Айткельдиева С.А., Смирнова И.Э., Уразова Ж.К.

*Научно-производственный центр микробиологии и вирусологии, Алматы,
e-mail: elmira_f@mail.ru*

Для очистки окружающей среды от органических токсичных загрязнителей в чрезвычайно суровых условиях перспективными с биотехнологической точки зрения являются экстремофильные микроорганизмы из-за способности к адаптации к экстремальным условиям и уникальных защитных механизмов. Целью данного исследования были выделение и отбор экстремофильных микроорганизмов, способных эффективно разлагать углеводороды нефти. Из экстремальных экосистем Казахстана было выделено 496 изолятов. Проведен скрининг по способности выделенных микроорганизмов расти в условиях высокой засоленности среды и при повышенных значениях pH и температуры. Установлено, что большинство изолятов росли на среде с 5% NaCl. С увеличением солености до 10–25% количество изолятов, выдерживающих такие концентрации, снижалось. Практически все солетолерантные изоляты были адаптированы к щелочным условиям (pH8), однако более высокие значения pH выдерживало меньшее количество культур. Более половины солетолерантных культур показали способность к росту при 40°C. При повышении температуры до 50°C рост наблюдался только у 30 изолятов, а до 60°C – у 5 изолятов. Изучена способность солетолерантных и алкалофильных культур расти на нефти как единственном источнике углерода и энергии. В результате было отобрано 13 микроорганизмов с высокой нефтеокисляющей активностью, перспективных для биоремедиации нефтезагрязненных экосистем в экстремальных условиях.

Ключевые слова: экстремальные экосистемы, нефтеокисляющие микроорганизмы, деградация нефти, соленость, pH среды, температура

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант AP19677718).

ISOLATION AND SELECTION OF MICROORGANISMS PROMISING FOR BIOREMEDIATION OF OIL-POLLUTED ECOSYSTEMS IN EXTREME CONDITIONS

Faizulina E.R., Tatarkina L.G., Spankulova G.A., Baimakhanova B.G.,
Aitkeldiyeva S.A., Smirnova I.E., Urazova Zh.K.

*Research and Production Center for Microbiology and Virology, Almaty,
e-mail: elmira_f@mail.ru*

Extremophilic microorganisms are promising from a biotechnological point of view for the purification of the environment from organic toxic pollutants in extremely harsh conditions, due to their ability to adapt to extreme conditions and unique defense mechanisms. The aim of this study was to isolate and select extremophilic microorganisms capable of effectively degrading petroleum hydrocarbons. 496 isolates were isolated from extreme ecosystems of Kazakhstan. Screening was carried out for the ability of the isolated microorganisms to grow in conditions of high salinity and elevated pH values and temperature. It was found that most isolates grew on a medium with 5% NaCl. With an increase in salinity to 10–25%, the number of isolates withstanding such concentrations decreased. Almost all salt-tolerant isolates were adapted to alkaline conditions (pH8) but fewer cultures could withstand higher pH values. More than half of the salt-tolerant cultures showed the ability to grow at 40°C. When the temperature increased to 50°C, growth was observed only in 30 isolates, and at 60°C – in 5 isolates. The ability of salt-tolerant and alkaliphilic cultures to grow on oil as the only source of carbon and energy was studied. As a result, 13 microorganisms with high oil-oxidizing activity were selected, promising for bioremediation of oil-polluted ecosystems in extreme conditions.

Keywords: extreme ecosystems, oil-oxidizing microorganisms, oil degradation, salinity, pH of environment, temperature

The study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant AP19677718).

Введение

Загрязнение окружающей среды углеводородами природного и антропогенного происхождения является серьезной экологической проблемой. Особенно остро

данная проблема стоит перед странами, добывающими, транспортирующими и перерабатывающими нефть [1]. В настоящее время большое внимание уделяется разработке экологически безопасных техноло-

гий реабилитации природных сред, загрязненных сырой нефтью и нефтепродуктами. Большое внимание привлекает микробная биоремедиация как перспективная технология, которая может преодолеть недостатки используемых в настоящее время физико-химических методов. Она представляет собой универсальную технологию с высокой стабильностью, экономичностью и экологичностью [2, 3].

До последнего времени загрязнению и биоразложению нефтяных углеводородов в экстремальных условиях уделялось очень мало внимания. Однако многие загрязненные экосистемы характеризуются высокими или низкими температурами, экстремально кислым или щелочным рН, высоким давлением или высокой соленостью.

Как и все природные экосистемы на нашей планете, гиперсоленые среды подвержены экологическому загрязнению. Часто они загрязнены большим количеством нефтяных углеводородов. Нефтяная промышленность образует огромное количество нефтесодержащих и соленых остаточных вод (нефтесодержащие рассолы, производственные воды) с минерализацией до 10% и более после отделения сырой нефти от пластовой воды [4].

Применение микробных технологий для обработки загрязненной среды с высокой соленостью или колеблющейся соленостью ограничено из-за пагубного воздействия соли на микробную жизнь, включая разрушение клеточной мембраны, денатурацию ферментов, низкую растворимость кислорода, низкую растворимость углеводородов и высыхание [5]. Поэтому биоремедиация соленых сред без дорогостоящего разбавления соленой почвы и воды требует галофильных или галотолерантных организмов, которые переносят высокие концентрации солей. Эти микроорганизмы относятся к бактериям, актиномицетам и археям и способны утилизировать алифатические и (или) ароматические углеводороды [6, 7].

рН среды также является одним из факторов, влияющих на биоремедиацию нефтезагрязненных экосистем. Кислотность окружающей среды влияет на такие процессы, как транспорт через клеточную мембрану и баланс каталитических реакций, а также на активность ферментов. Уровень рН может сильно варьировать, и его необходимо учитывать при совершенствовании методов биологической очистки [8].

Из-за способности к адаптации к экстремальным условиям и уникальных защитных механизмов экстремофильным микроорганизмам уделяется все больше внимания. Они обладают надежными ферментатив-

ными и биокаталитическими системами, что делает их подходящими для эффективного удаления загрязняющих веществ из окружающей среды в чрезвычайно суровых условиях. Однако в настоящее время они все еще являются менее изученными группами, которые обладают большим биотехнологическим потенциалом [9].

Целью данного исследования были выделение и отбор экстремофильных микроорганизмов, способных эффективно разлагать углеводороды нефти.

Материалы и методы исследований

Объектами исследований служили микроорганизмы, выделенные из почвенных образцов экстремальных экосистем Казахстана. Отбор почвенных образцов выполняли в соответствии с ГОСТ-17.4.4.02-2017 [10] с соблюдением правил асептики.

Выделение микроорганизмов проводили путем посева из накопительных культур на питательный агар с 1% NaCl. Выросшие морфологически различные колонии проверялись на чистоту истощающим посевом и затем отсеивались на скошенный питательный агар. Изучение роста выделенных изолятов при разной засоленности среды проводили на питательном агаре, содержащем 50–250 г/л NaCl. Изучение роста выделенных изолятов при разных значениях рН проводили на питательном агаре. Для получения рН 8–10 среду подщелачивали 10%-ным раствором NaHCO₃. Чашки инкубировали в термостате при температуре 30°C в течение 3–5 суток.

Способность изолятов деградировать нефть изучали в жидкой модифицированной минеральной среде ВД следующего состава, г/л: NH₄NO₃ – 1,0, K₂HPO₄ – 1,0, KH₂PO₄ – 1,0, MgSO₄ – 0,2, CaCl₂×6H₂O – 0,02, FeCl₃ – следы, NaCl – 10,0, рН = 7,0–7,2. В колбы со 100 мл среды вносили по 5 мл суспензии клеток каждой исследуемой культуры и добавляли по 1 мл нефти месторождения Кумколь. Колбы инкубировали в термостатируемых шейкерах при температуре 30°C в течение 14 суток. Количественное определение остаточного содержания нефти в среде проводили гравиметрическим методом.

Статистическую обработку результатов исследований проводили по общепринятым критериям вариационно-статистического анализа с вычислением средних величин (М), ошибки средней арифметической (m) с помощью пакета компьютерных программ Microsoft Excel, 2010. Оценку статистической значимости различий средних величин проводили по стандартной методике [11]. Статистически значимыми считали различия при p<0,05.

Результаты исследований и их обсуждение

Соленость является одним из основных факторов, определяющим состав и функции микробного сообщества. При изменении солености наблюдается общий сдвиг как микробной структуры, так и метаболической активности [12]. Из экстремальных экосистем Казахстана в Атырауской, Мангистауской и Павлодарской областей было отобрано 15 образцов почвы. Из отобранных почвенных образцов на питательном агаре было выделено 496 изолятов. Изучен их рост на питательной среде с разным содержанием соли (5–25%). Результаты исследования показали, что большинство полученных изолятов были солетолерантными, на среде с 5% NaCl росло 384 культуры (рис. 1). С увеличением солености их

количество значительно уменьшилось. Так, при 10%-ном содержании соли рост показала половина выделенных культур, при 15%-ном – 20,4%, при 20%-ном – 13,9% выделенных изолятов. При концентрации NaCl 25% росли только 7 изолятов.

Одним из факторов, влияющих на микробную активность, является pH среды. Как правило, оптимальный уровень pH для роста бактерий составляет от 6 до 8 [8]. Авторами был изучен рост выделенных изолятов в щелочных условиях (pH 8, 9, 10). Для эксперимента были отобраны культуры, выдерживающие 5% NaCl.

Как видно из рисунка 2, при pH 8 из 384 изолятов росли практически все. Более высокие значения pH выдерживало меньшее количество культур. Так, при pH 9 рост показали 243 изолята, а при pH 10 – 158.

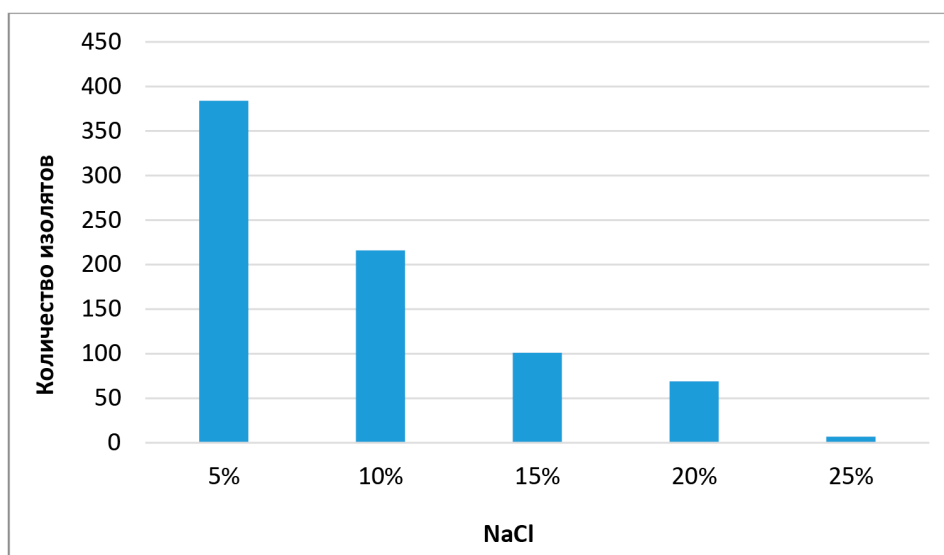


Рис. 1. Рост выделенных изолятов при разной солености среды

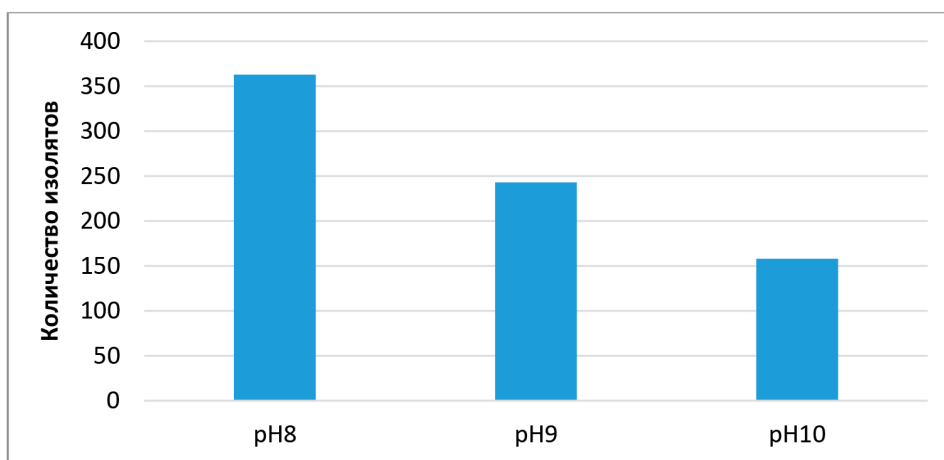


Рис. 2. Рост выделенных изолятов при разных значениях pH среды

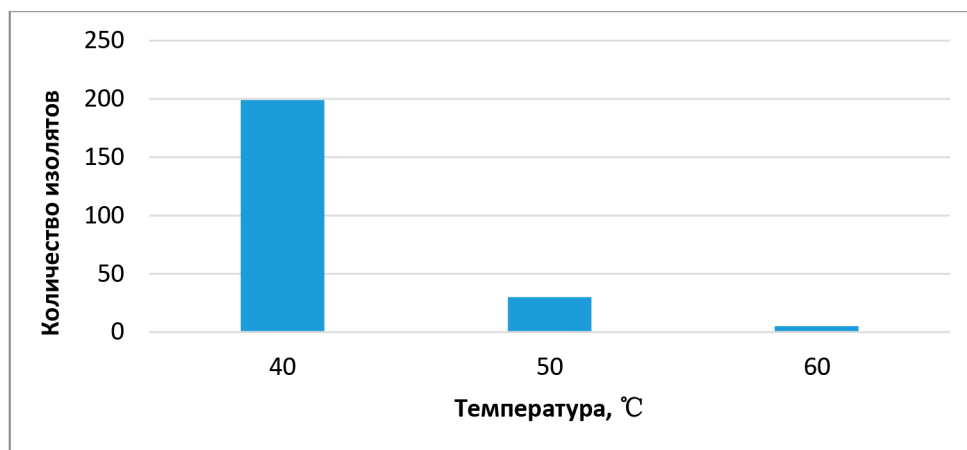


Рис. 3. Рост выделенных изолятов при повышенной температуре культивирования

Среди выделенных культур, растущих при pH 10, 106 изолятов выдерживали концентрацию NaCl 10%, 44 изолята – 15% и 22 изолята – 20%. Среди культур, выдерживающих 25%-ную концентрацию соли, 2 изолята росли при pH 8 и 9, остальные – в нейтральных условиях.

Изучен рост выделенных культур при повышенных температурах (40°C, 50°C и 60°C). Результаты исследования показали, что при 40°C росло 199 изолятов (рис. 3). С увеличением температуры количество термотолерантных микроорганизмов значительно снизилось. Так, при 50°C рост наблюдался только у 30 изолятов, а при 60°C – у 5 изолятов. Следует отметить, что большинство термотолерантных микроорганизмов выдерживали концентрацию NaCl 100 г/л и pH 10. Пять изолятов рос-

ли при 15%-ном содержании NaCl в среде и два изолята – при 20% NaCl.

На следующем этапе была изучена способность выделенных изолятов расти на нефти как единственном источнике углерода и энергии. С этой целью отобранные изоляты культивировали на минеральной среде с 1% нефтью месторождения Кумколь. Результаты исследования показали, что не все микроорганизмы-экстремофилы способны расти в минеральной среде с нефтью как единственным источником углерода и энергии. Только 45 изолятов в разной степени утилизировали углеводороды нефти. При их культивировании нефть видоизменялась: структура становилась мелкодисперсной или образовывалась эмульсия (рис. 4). В ряде случаев на поверхности среды оставалась тонкая нефтяная пленка.

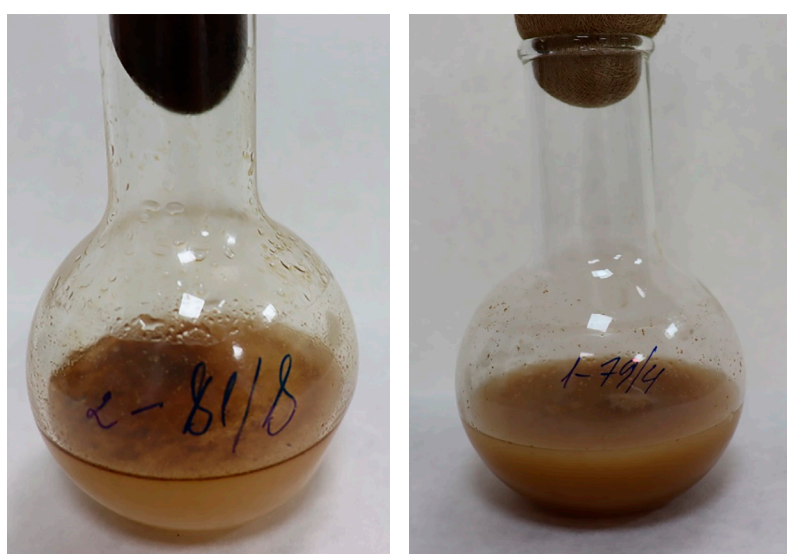


Рис. 4. Рост выделенных изолятов на минеральной среде с 1% нефтью месторождения Кумколь

Деструкция нефти м. Кумколь отобранными культурами
экстремофильных микроорганизмов

| Изолят | Степень деструкции нефти, % | Изолят | Степень деструкции нефти, % |
|--------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| 1-54/3 | 43,2 | 2-81/7 | 70,3 |
| 1-67/4 | 42,6 | 2-81/8 | 69,2 |
| 1-73/3 | 58,3 | 2-82/4 | 43,8 |
| 1-79/4 | 65,1 | 3-56/3 | 67,6 |
| 1-80/1 | 68,6 | 3-37/2 | 57,7 |
| 2-81/5 | 72,5 | 3-38/1 | 58,4 |
| 2-81/6 | 66,9 | Контроль | 12,1 |

Гравиметрический анализ показал, что наиболее активные изоляты деградировали 42,6–72,5% нефти (таблица). У остальных изолятов степень деструкции нефти составила менее 40%.

Все изоляты, показавшие высокую нефтеокисляющую активность, были устойчивы к высокой засоленности среды – свыше 100 г/л NaCl. Из них культуры 1-54/3, 1-73/3, 2-81/6 и 3-56/3 росли в среде с 20% NaCl, а культура 1-67/4 – с 25% NaCl. Также большинство отобранных изолятов показали хороший рост при pH 10, за исключением четырех культур, для которых оптимальной была нейтральная среда.

Заключение

Из экстремальных экосистем Казахстана было выделено 496 изолятов. Проведен скрининг по способности выделенных микроорганизмов расти в условиях высокой засоленности среды и при повышенных значениях pH. Установлено, что большинство изолятов были солетолерантными и росли на среде с 5% NaCl. С увеличением солёности до 10–25% количество изолятов, выдерживающих такие концентрации, значительно снизилось. Изучение влияния pH среды на рост выделенных культур показало, что практически все солетолерантные изоляты были адаптированы к щелочным условиям (pH 8). Более высокие значения pH выдерживало меньшее количество культур. 52% солетолерантных культур показали способность к росту при 40°C. При повышении температуры до 50°C рост наблюдался только у 30 изолятов, а до 60°C – у 5 изолятов.

Изучена способность выделенных культур расти на нефти как единственном источнике углерода и энергии. В результате было отобрано 13 культур, при культивировании которых деструкция нефти составила 42,6–72,5%. Все эти культуры были солеустойчивы, а также росли в условиях повышенных pH. Таким образом, были отобраны микроорганизмы, перспективные для био-

ремедиации нефтезагрязненных экосистем в экстремальных условиях.

Список литературы

1. Чернявская М.И. Сравнительная характеристика углеводородокисляющих бактерий различных климатических зон: автореф. дис. ... канд. биол. наук. Минск, 2016. 26 с.
2. Sun-Wook J., Yong J.C. Extremophilic Microorganisms for the Treatment of Toxic Pollutants in the Environment // *Molecules*. 2020. Vol. 25. P. 4916-4932. DOI: 10.3390/molecules25214916.
3. Kour D., Khan S.S., Kour H., Kaur T., Devi R., Rai P.K., Judy C., McQuestion C., Bianchi A., Spells S., Mohan R., Rai A.K., Yadav A.N. Microbe-mediated bioremediation: Current research and future challenges // *J. Of Appl. Biology & Biotechnology*. 2022. Vol. 10 (Suppl 2). P. 6-24. DOI: 10.7324/JABB.2022.10s202.
4. Le Borgne S., Paniagua D., Vazquez-Duhalt R. Biodegradation of Organic Pollutants by Halophilic Bacteria and Archaea // *J. Mol. Microbiol. Biotechnol.* 2008. Vol. 15. P. 74–92. DOI: 10.1159/00012132.
5. Pernetti M., Di Palma L. Experimental evaluation of inhibition effects of saline wastewater on activated sludge // *Environ. Technol.* 2005. Vol. 26. P. 695–703. DOI: 10.1080/09593330.2001.9619509.
6. Al-Mailem D.M., Eliyas M., Khanafer M., Radwan S.S., Culture-dependent and culture-independent analysis of hydrocarbonoclastic microorganisms indigenous to hypersaline environments in Kuwait // *Microb. Ecol.* 2014. Vol. 67. P. 857-865. DOI: 10.1007/s00248-014-0386-5.
7. Khemili-Talbi S., Kebbouche-Gana S., AkmoussiToumi S., Angar Y., Gana M.L., Isolation of an extremely halophilic archaeon *Natrialba* sp. C21 able to degrade aromatic compounds and to produce stable biosurfactant at high salinity // *Extremophiles*. 2015. Vol. 19. No. 6. P. 1109-1120. DOI: 10.1007/s00792-015-0783-9.
8. Al-Hawash A.B., Dragh M.A., Li S., Alhujaily A., Abbood H.A., Zhang X., Fuying M. Principles of microbial degradation of petroleum hydrocarbons in the environment // *The Egyptian Journal of Aquatic Research*. 2018. Vol. 44. No. 2. P. 71-76. DOI: 10.1016/j.ejar.2018.06.001.
9. Shukla A.K., Singh A.K. Exploitation of Potential Extremophiles for Bioremediation of Xenobiotics Compounds: A Biotechnological Approach // *Current Genomics*. 2020. Vol. 21. P. 161-167. DOI: 10.2174/1389202921999200422122253.
10. ГОСТ 17.4.4.02-2017. Охрана Природы. Почвы. Методы отбора и подготовки проб для химического, бактериологического, гельминтологического анализа. М.: Стандартинформ, 2018. 18 с.
11. Гланц С. Медико-биологическая статистика / пер. с англ. М.: Практика, 1998. 459 с.
12. Vincent S.G.T., Jennerjahn T., Ramasamy K., Chapter 3 - Environmental variables and factors regulating microbial structure and functions. Microbial Communities in Coastal Sediments // Elsevier, 2021. P. 79-117. DOI: 10.1016/B978-0-12-815165-5.00003-0.

СТАТЬЯ

УДК 611.36:575.113:547.391.1:57.084

**ИЗМЕНЕНИЕ ТРАНСКРИПЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ ГЕНОВ
АНТИОКСИДАНТНОЙ ЗАЩИТЫ В ПЕЧЕНИ КРЫС В ОТВЕТ
НА ОСТРОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ВЫСОКИХ ДОЗ АКРИЛАМИДА**

**Репина Э.Ф., Рябова Ю.В., Якупова Т.Г.,
Хуснутдинова Н.Ю., Хмель А.О., Ахмадеев А.Р.**

*ФБУН «Уфимский научно-исследовательский институт медицины труда и экологии человека»,
Уфа, e-mail: e.f.repina@bk.ru*

Целью исследования являлось изучение транскрипционной активности генов *Sod1*, *Nqo1* и *Nfe2l2* в ткани печени крыс при остром воздействии высоких доз акриламида и на фоне профилактической коррекции. В эксперименте использованы аутбредные крысы женского пола. Проведен анализ изменений транскрипционной активности генов, принимающих непосредственное участие в антиоксидантной защите организма, через 24 ч после однократного внутрижелудочного введения акриламида в дозе 150 мг/кг массы тела, а также на фоне профилактического внутрижелудочного введения комплексных соединений оксиметилурацила с аскорбиновой кислотой, сукцинатом натрия и ацетилцистеином. Проведенные исследования показали, что доза 150 мг/кг массы тела акриламида при однократном поступлении для крыс-самок находится на уровне ниже среднесмертельной. Изменение транскрипционной активности генов *Sod1* и *Nfe2l2* позволяет отнести их к маркерам наиболее раннего нарушения окислительно-восстановительного баланса в организме. Изменение экспрессии гена *Nqo1* в ранние сроки после токсического воздействия носило неоднозначный характер. Наибольший протекторный антиоксидантный эффект, по сравнению с другими комплексными соединениями, при воздействии высоких доз акриламида, проявило комплексное соединение оксиметилурацила с ацетилцистеином.

Ключевые слова: акриламид, острое воздействие, крысы, транскрипционная активность, гены, печень, коррекция, антиоксидантный эффект

**CHANGES IN TRANSCRIPTIONAL ACTIVITY OF ANTIOXIDANT
PROTECTION GENES IN THE LIVER OF RAT IN RESPONSE
TO ACUTE EXPOSURE TO HIGH DOSES OF ACRYLAMIDE**

**Repina E.F., Ryabova Yu.V., Yakupova T.G.,
Khusnutdinova N.Yu., Khmel A.O., Akhmadeev A.R.**

*Ufa Research Institute of Occupational Health and Human Ecology,
Ufa, e-mail: e.f.repina@bk.ru*

The aim of the present research was to study the transcriptional activity of the *Sod1*, *Nqo1* and *Nfe2l2* genes in the liver tissue of rats exposed to acute high doses of acrylamide and during prophylactic correction. Outbred female rats were used in the experiment. An analysis of changes in the transcriptional activity of genes directly involved in the antioxidant defense of the body was carried out 24 hours after a single intragastric administration of acrylamide at a dose of 150 mg/kg body weight, as well as during prophylactic intragastric administration of complex compounds of oxymethyluracil with ascorbic acid, sodium succinate and acetylcysteine. The studies showed that a single dose of 150 mg / kg body weight of acrylamide for female rats is below the median lethal level. Changes in the transcriptional activity of the *Sod1* and *Nfe2l2* genes allow us to classify them as markers of the earliest disturbance of the redox balance in the body. Changes in *Nqo1* gene expression in the early stages after toxic exposure were ambiguous. The greatest protective antioxidant effect, compared with other complex compounds, when exposed to high doses of acrylamide, was demonstrated by the complex compound of oxymethyluracil with acetylcysteine.

Keywords: acrylamide, acute exposure, rats, transcriptional activity, genes, liver, correction, antioxidant effect

Введение

Акриламид (АА) – производственный токсикант. Кроме того, он может поступать в организм с пищевыми продуктами, содержащими крахмал, которые подвергались термической обработке выше 120°C [1, 2]. Токсичность АА для различных систем организма достаточно детально изучена [3, 4]. Экспериментально доказана его гепатотоксичность [5, 6]. Показано, что длительное воздействие АА снижает активность ферментов печени и повышает уровень по-

казателей перекисного окисления липидов (ПОЛ) [7]. Некоторые авторы считают, что это связано с подавлением АА активности антиокислительных ферментов клетки [8].

Ядерный транскрипционный фактор *Nfe2l2* отвечает за поддержание клеточного окислительно-восстановительного баланса за счет регуляции экспрессии ключевых генов антиоксидантных и детоксикационных ферментов [9]. Связывание *Nfe2l2* с последовательностью ARE в регуляторной области генов-мишеней активирует каскад ре-

акций, которые обеспечивают защиту клеток от воздействия активных кислородных радикалов [10]. Ген *Nqo1* также оказывает защитное влияние на клетки от окислительного стресса [11, 12]. Ключевым компонентом антиоксидантной защиты организма, нейтрализующей постоянно образующиеся активные формы кислорода, являются супероксиддисмутаза (СОД). Ген *Sod1* кодирует фермент супероксиддисмутаза-1 (СОД1), принимающий непосредственное участие в антиоксидантном ответе клеток [13].

В литературе чаще описываются симптомы хронического воздействия АА, однако имеются сведения и об острых отравлениях, связанных с его пероральным приемом [14]. Поскольку вероятность контакта человека с данным токсикантом достаточно велика, особенно в быту, актуально дальнейшее проведение фундаментальных исследований по детализации механизмов его токсического действия и возможности медикаментозной коррекции последнего.

Цель исследования – изучить транскрипционную активность генов *Sod1*, *Nqo1* и *Nfe2l2* в ткани печени крыс при остром воздействии высоких доз акриламида и на фоне профилактической коррекции.

Материалы и методы исследования

Исследования проведены на 30 аутбредных крысах-самках с массой тела, равной 189–194 г в начале эксперимента. Животные были разделены на 5 групп: 1 – группа, которая не подвергалась какому-либо воздействию (К-, отрицательный контроль), 2 – группа, подвергшаяся воздействию АА (К+, положительный контроль), 3 – группа, подвергшаяся воздействию АА на фоне приема комплексного соединения оксиметилурацила с аскорбиновой кислотой (МГ-1) в дозе 50 мг/кг массы тела (АА+МГ1), 4 – группа, подвергшаяся воздействию АА на фоне приема комплексного соединения оксиметилурацила с сукцинатом натрия (МГ-2) в дозе 50 мг/кг массы тела (АА+МГ-2), 5 – группа, подвергшаяся воздействию АА на фоне приема комплексного соединения оксиметилурацила с ацетилцистеином (МГ-10) в дозе 500 мг/кг массы тела (АА+МГ-10).

Животные 3–5 групп внутрижелудочно получали комплексные соединения оксиметилурацила первые 5 дней эксперимента, животным 1 и 2 группы вводили аналогично эквивалентные объемы дистиллированной воды. Через 1 ч после последнего введения корректирующего препарата крысам 2–5 групп вводили внутрижелудочно АА в дозе 150 мг/кг массы тела.

Через 24 ч после введения токсиканта была оценена летальность животных и про-

ведена эвтаназия выживших. Образцы печени для генетических исследований замораживали в жидком азоте и заливали реагентом Extract RNA, затем проводили выделение суммарной РНК. Для синтеза кДНК использовали набор готовых реагентов («Евроген», Россия). Определение транскрипционной активности генов проводили в режиме реального времени методом ПЦР на амплификаторе Rotor-Gene Q («Qiagen», Германия).

Статистический анализ проводили с использованием программного обеспечения SPSS Statistics 21.0 (IBM, USA). Критерий Колмогорова – Смирнова использовали в качестве критерия нормальности распределения признаков по группам. Для оценки значимости различий между группами использовали однофакторный дисперсионный анализ (ANOVA) и апостериорные критерии Тьюки и Тамхейна. Различия считали статистически значимыми при $p < 0,05$.

Результаты исследования и их обсуждение

Данные по гибели животных по группам приведены в таблице.

Данные по летальности крыс, доза 150 мг/кг массы тела

| Группы животных | Количество животных в группе | Количество павших животных |
|-----------------|------------------------------|----------------------------|
| К - | 6 | 0 |
| К + | 6 | 1 |
| АА + МГ1 | 6 | 1 |
| АА + МГ2 | 6 | 2 |
| АА + МГ10 | 6 | 0 |

Из представленных данных видно, что доза 150 мг/кг массы тела при однократном поступлении оказалась практически ниже среднесмертельной для крыс-самок. Вместе с тем только в группе, получавшей в профилактическом режиме препарат МГ-10, все животные остались живы, как и в группе отрицательного контроля.

Полученные авторами результаты свидетельствуют об активации системы антиоксидантной защиты клеток печени после воздействия АА, что согласуется с данными литературы [7, 8]. Об этой активации судили по изменению уровня экспрессии гена *Nfe2l2*, который запускает каскад реакций, связанных с антиоксидантной защитой [10]. Проведенный анализ биостатистических данных выявил значимые диспаратности в средней интенсивности транскрипции гена *Nfe2l2* в тканях печени (рис. 1) между груп-

пами К- и АА+МГ1 ($F = 5,42$, $p = 0,0068$). Максимальный индекс экспрессии гена ($-0,14 \pm 0,14$) отмечен в контрольной группе К-. Минимальная экспрессия была зафиксирована в группе АА+МГ1 ($-1,07 \pm 0,40$). В экспериментальной группе К+ наблюдался показатель экспрессии $-0,74 \pm 0,29$, еще ниже он зафиксирован в группе АА+МГ-2 ($-1,07 \pm 0,40$). Ближе всего к данным группы отрицательного контроля находилась экспрессия гена *Nfe2l2* в группе АА+МГ10 ($-0,11 \pm 0,22$).

Уровень экспрессии гена *Sod1*, кодирующего фермент супероксиддисмутазу 1, который катализирует дисмутацию супероксид-анионов в перекись водорода и кислород [13], также продемонстрировал изменения. При анализе транскрипционной активности гена *Sod1* было установлено следующее: самый высокий уровень экспрессии наблюдался в контрольной группе К- ($0,09 \pm 0,25$), в группе положительного контроля К+ он был ниже ($-0,78 \pm 0,37$), еще ниже – в группах АА+МГ-1 ($-1,26 \pm 0,32$) и АА+МГ-2 ($-1,59 \pm 0,33$), и только в группе АА+МГ-10 экспрессия стала выше ($-0,47 \pm 0,35$), но различия не имели статистической значимости. Значимыми ($F = 7,71$, $p = 0,0013$) были лишь различия между экспрессией гена в группах АА+МГ-2 и К- (рис. 2).

Разница в средней интенсивности экспрессии гена *Nqo1* в печени, кодирующего фермент NAD(P)H: убихиноноксидоредуктазу 1, который также играет ключевую роль в защите клетки против окислительного стресса (рис. 3), между изучаемыми группами не достигла статистической значимости ($F = 0,89$, $p = 0,4617$). Самый низкий уровень экспрессии был зафиксирован в контрольной группе К- ($0,25 \pm 0,35$), в то время как самый высокий уровень наблюдался в группе АА+МГ10 ($1,07 \pm 0,21$). В группе К+ уровень экспрессии гена *Nqo1* ($0,30 \pm 0,51$) был слегка выше по сравнению с группой К-. В группе АА+МГ1 уровень экспрессии составил $0,83 \pm 0,29$, а в группе МГ2 – $0,8 \pm 0,45$. Экспрессия гена *Nqo1* в группе АА+МГ10 была самой высокой и составила $1,07 \pm 0,21$.

Молекулярные механизмы токсичности АА основаны на нескольких патогенетических путях, включая развитие окислительного стресса, индукцию апоптоза и воспалительную реакцию [15, с. 113696]. Некоторые химические агенты, обладая антиоксидантными свойствами и способностью модулировать внутриклеточные сигнальные пути, могут вмешиваться в эти процессы, тем самым снижая выраженность токсического воздействия АА.

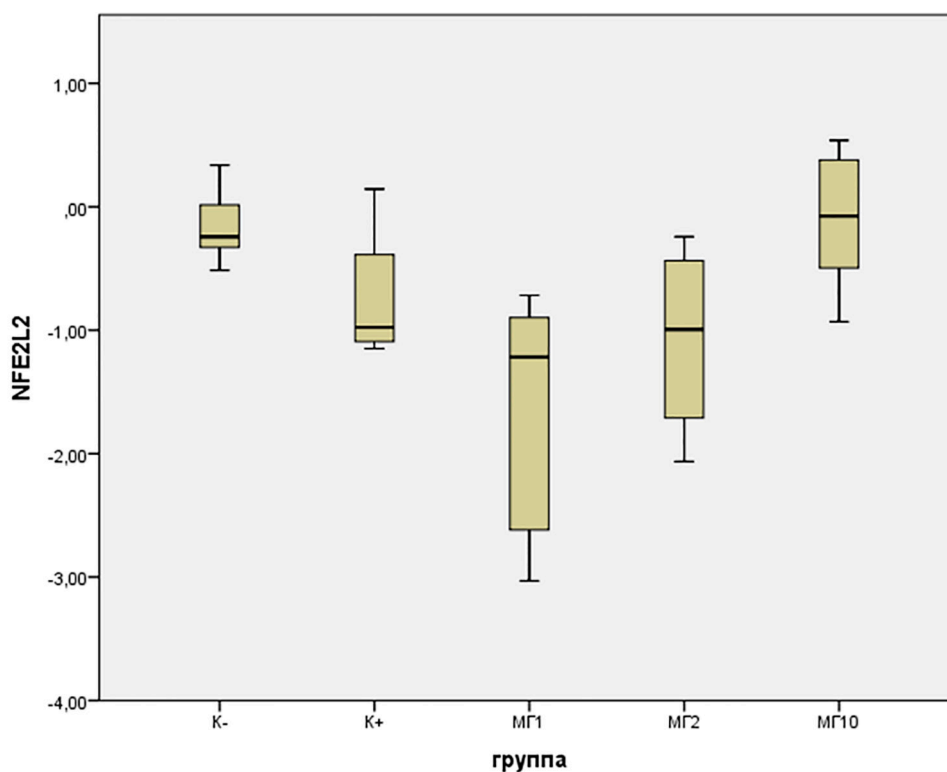


Рис. 1. Уровень экспрессии гена *Nfe2l2* в ткани печени крыс-самок при экстремальном воздействии акриламида и профилактической коррекции комплексными соединениями оксиметилурацила

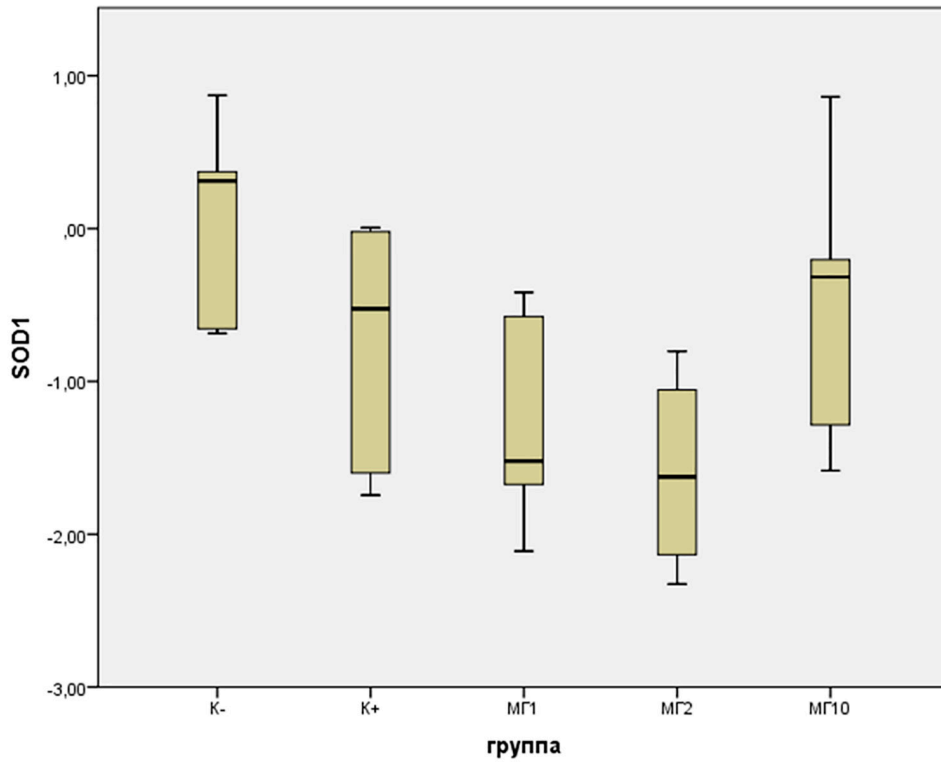


Рис. 2. Уровень экспрессии гена Sod1 в ткани печени крыс-самок при экстремальном воздействии акриламида и профилактической коррекции комплексными соединениями оксиметиурацила

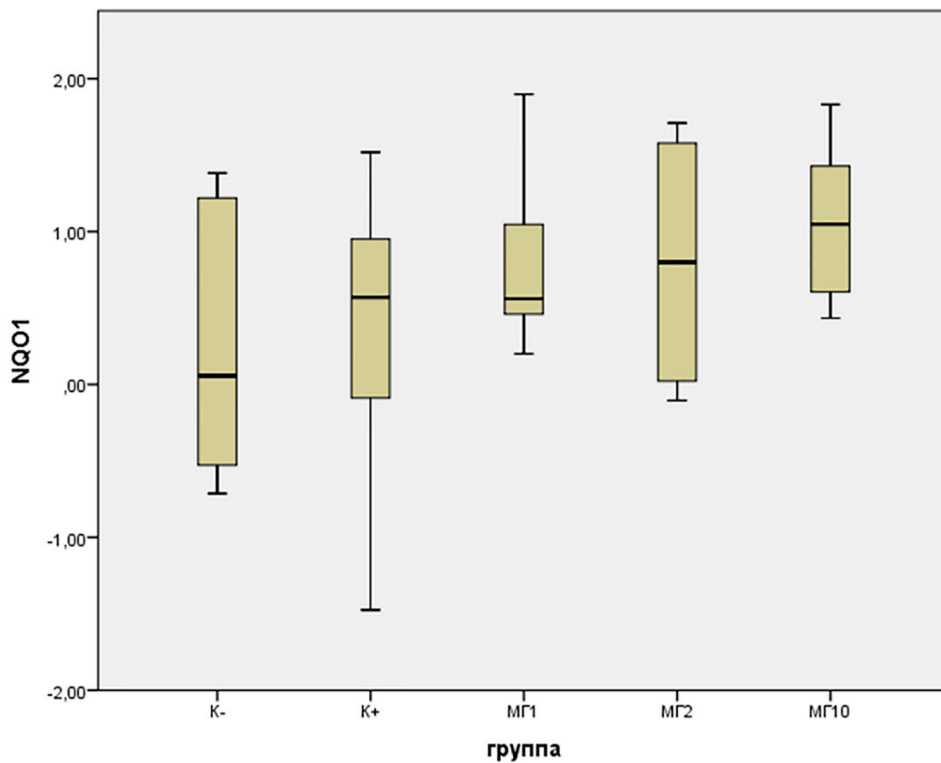


Рис. 3. Уровень экспрессии гена Nqo1 в ткани печени крыс-самок при экстремальном воздействии акриламида и профилактической коррекции комплексными соединениями оксиметиурацила

Согласно проведенным исследованиям, МГ-1, содержащий аскорбиновую кислоту, которая по неясным механизмам оказывает положительное влияние на состояние организма при воздействии АА [15], а также МГ-2, оказались менее эффективными в защите клеток от токсического действия АА по сравнению с МГ-10.

Предполагается, что выраженный протекторный эффект МГ-10 связан с его разнонаправленным защитным действием. Ацетилцистеин, входящий в состав МГ-10, с одной стороны, проявляет антиоксидантное действие за счет способности реактивных сульфгидрильных групп связываться с окислительными радикалами и нейтрализовать их. С другой стороны, он способствует синтезу глутатиона. Кроме того, ацетилцистеин известен своим защитным действием против воспалительных процессов, апоптоза и окислительного повреждения, индуцированного АА [15].

Заключение

Проведенные исследования показали, что при однократном поступлении доза 150 мг/кг массы тела акриламида для крыс-самок находится на уровне ниже средне-смертельной. По показателю летальности наиболее заметный защитный эффект проявил препарат МГ-10 – в данной группе все животные остались живы.

Транскрипционная активность гена *Sod1* под воздействием акриламида снизилась. Еще ниже она оказалась в группах, получавших препараты МГ-1 и МГ-2. Профилактическое введение препарата МГ-10 проявилось в меньшем снижении экспрессии гена по сравнению с группой отрицательного контроля. Изменение активности гена *Nfe2l2* по группам имело такую же направленность. Динамика активности гена *Nqo1* была иной: во всех группах крыс, получавших акриламид, она стала выше, чем в группе отрицательного контроля.

Таким образом, гены *Sod1* и *Nfe2l2* можно отнести к маркерам наиболее раннего нарушения окислительно-восстановительного баланса в организме.

Наибольший протекторный антиоксидантный эффект проявляет комплексное соединение оксиметилурацила с ацетилцистеином (МГ-10).

Список литературы

1. Wei T., Zhang D., Chen L. The kinetics study and reaction mechanism of acrylate grouting materials // *Bulg. Chem. Commun.* 2015. Is. 47. P. 89–92.
2. Kumar J., Das S., Teoh S.L. Dietary Acrylamide and the Risks of Developing Cancer: Facts to Ponder // *Front Nutr.* 2018. Vol. 28, Is. 5. P. 14.
3. Koszucka A., Nowak A., Nowak I., Motyl I. Acrylamide in human diet, its metabolism, toxicity, inactivation and the associated. European Union legal regulations in food industry // *Crit Rev Food Sci Nutr.* 2020. Vol. 60, Is. 10. P. 1677–1692.
4. Semla M., Goc Z., Martiniaková M., Omelka R., Formicki G. Acrylamide: a common food toxin related to physiological functions and health // *Physiol Res.* 2017. Vol. 66, Is. 2. P. 205–217.
5. Gedik S., Erdemli M.E., Gul M., Yigitcan B., Bag H.G., Aksungur Z., Altinoz E. Hepatoprotective effects of crocin on biochemical and histopathological alterations following acrylamide-induced liver injury in Wistar rats. *Biomed Pharmacother.* 2017. No. 95. P. 764–770.
6. Ghorbel I., Elwej A., Chaabene M., Boudawara O., Marakchi R., Jamoussi K., Boudawara T.S., Zeghal N. Effects of acrylamide graded doses on metallothioneins I and II induction and DNA fragmentation: Biochemical and histomorphological changes in the liver of adult rats // *Toxicol Ind Health.* 2017. Vol. 33, Is. 8. P. 611–622.
7. Kim S.M., Baek J.M., Lim S.M., Kim J.-Y., Kim J., Choi I., Cho K.-H. Modified lipoproteins by acrylamide showed more atherogenic properties and exposure of acrylamide induces acute hyperlipidemia and fatty liver changes in zebrafish // *Cardiovasc. Toxicol.* 2015. Vol. 15, Is. 4. P. 300–308.
8. Тарских М.М. Молекулярно-клеточные механизмы в патогенезе болезней, обусловленных воздействием акрилатов: автореф. дис. ... докт. мед. наук. Иркутск, 2014. 44 с.
9. Mitsuishi Y., Motohashi H., Yamamoto M. The Keap1–Nrf2 system in cancers: stress response and anabolic metabolism // *Frontiers in oncology.* 2012, Is. 2. P. 200.
10. Ma Q. Role of *Nrf2* in oxidative stress and toxicity // *Annual review of pharmacology and toxicology.* 2013. No. 53. P. 401–426.
11. Zhang X., Han K., Yuan D., Meng C. Overexpression of NAD (P) H: quinone oxidoreductase 1 inhibits hepatocellular carcinoma cell proliferation and induced apoptosis by activating AMPK/PGC-1 α pathway // *DNA and cell biology.* 2017. Vol. 36, Is. 4. P. 256–263.
12. Bona S., Moreira A.J., Rodrigues G.R., Cerski C.T., Da Silveira T.R., Marroni C.A., Marroni N.P. Diethylnitrosamine-induced cirrhosis in Wistar rats: an experimental feasibility study // *Protoplasma.* 2015. Vol. 252, Is. 3. P. 825–833.
13. Okado-Matsumoto A., Fridovich I. Subcellular distribution of superoxide dismutases (SOD) in rat liver: Cu, Zn-SOD in mitochondria // *J Biol Chem.* 2001. Vol. 276, Is. 42. P. 38388–38393.
14. Yamamoto R., Yasuoka T., Matsushima J., Tsubouchi Y., Kanazashi H., Sakurai K., Hanazawa T., Kamijo Y., Akieda K. Acute acrylamide poisoning with severe symptoms in a short time: a case report // *International Journal of Emergency Medicine.* 2023. Vol. 16, Is. 1. P. 41.
15. Yan F., Wang L., Zhao L., Wang C., Lu Q., Liu R. Acrylamide in food: Occurrence, metabolism, molecular toxicity mechanism and detoxification by phytochemicals // *Food Chem Toxicol.* 2023. Is. 175. P. 113696.

ОБОСНОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ ЛИСТЬЕВ В СМЕСИ С УГЛЕМ

¹Есин К.С., ^{1,2}Мисюкова А.Д., ¹Берикболов А.К.,
¹Янковская Н.С., ^{1,2}Янковский С.А.

¹ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»,
Томск, e-mail: kse2@tpu.ru;

²ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева»,
Кемерово, e-mail: jankovsky@tpu.ru

Исследованы теплотехнические характеристики смесевых топлив, сформированных на основе бурого угля месторождения Балахтинского района Красноярского края, и биомассы на основе древесных листьев, произрастающих в г. Томске. Выполнены исследования процессов воспламенения и горения таких композитных топлив с целью установления времени задержки зажигания. Установлено, что добавление доли листьев к углю существенно влияет на процессы начала воспламенения и горения смесевых топлив. При увеличении доли листьев в смеси до 10% время задержки зажигания сокращается на 5,7%. Замещение 25% угля в смеси с измельченными листьями приводит к сокращению времени задержки воспламенения на 26% по сравнению с однородным углем. Увеличение доли листьев в смеси до 50% существенно, на 54%, сокращает время задержки зажигания таких топливных композиций по сравнению с однородным углем. Выполненные исследования позволяют обосновать возможность применения высушенных опавших листьев как эффективную добавку к углю, которая способствует ускорению процессов воспламенения смесевых топлив при их сжигании в энергетических котлах малой и средней мощности и снижению временных затрат на разогрев подобных котельных агрегатов.

Ключевые слова: уголь, листва, биомасса, воспламенение, горение, смесевые топлива

Работа выполнена при поддержке гранта FSWW-2022-0018, реализуемого в рамках проекта создания новых молодежных лабораторий.

JUSTIFICATION OF THE POSSIBILITY OF ENERGY USE OF LEAVES MIXED WITH COAL

¹Esin K.S., ^{1,2}Misyukova A.D., ¹Berikbolov A.K.,
¹Yankovskaya N.S., ^{1,2}Yankovskiy S.A.

¹National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, e-mail: kse2@tpu.ru;

²T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, Kemerovo, e-mail: jankovsky@tpu.ru

Thermal characteristics of blended fuels formed on the basis of brown coal from the Balakhtha deposit of the Krasnoyarsk region and biomass on the basis of wood leaves growing in Tomsk have been studied. Studies of ignition and combustion processes of such composite fuels have been carried out in order to establish the ignition delay time. It was found that the addition of the share of leaves to coal significantly affects the processes of ignition initiation and combustion of blended fuels. When the proportion of leaves in the blend is increased to 10%, the ignition delay time is reduced by 5.7%. Substitution of 25% of the coal in the blend with crushed leaves results in a 26% reduction in ignition delay time compared to homogeneous coal. Increasing the share of leaves in the mixture up to 50% significantly, by 54%, reduces the ignition delay time of such fuel compositions compared to homogeneous coal. The performed studies allow to substantiate the possibility of using dried fallen leaves as an effective additive to coal, contributing to the acceleration of ignition processes of mixed fuels during their combustion in power boilers of small and medium capacity and reducing the time costs for heating of such boiler units.

Keywords: coal, foliage, biomass, ignition, combustion, mixed fuels

This work was supported by grant FSWW-2022-0018, implemented within the framework of the project to create new youth laboratories.

Введение

В современном мире наблюдается неуклонный рост потребления энергоресурсов, что связано с высокими темпами промышленного развития и ростом численности населения планеты. Процессы сжигания ископаемых видов топлив для промышленного производства, а также выработки тепловой и электрической энергии влечет за собой серьезные глобальные экологические сдвиги

за счет колоссальных антропогенных выбросов. Одним из вариантов сокращения вредных выбросов является частичная замена традиционных топлив, в том числе промышленных энергетических отходов (например, угольная и коксовая пыль), биомассой [1]. Биомасса обладает большим потенциалом, поскольку является возобновляемой, в отличие от ископаемого топлива. Совместное сжигание биомассы

с углем расширит возможность экологичного производства энергии. Выбор вида биомассы в качестве добавки к углю зависит от наличия отходов в каждом конкретном регионе мира, и этот список довольно широк: отходы лесопиления, жмых сахарного тростника, листья и др. [1]. За последние пять лет исследования в данном направлении увеличились в несколько десятков раз. Ниже приведены результаты некоторых исследований.

В работе авторов [1] рассматривались характеристики смесового топлива на основе угольной пыли с лузгой и листьями подсолнечника. Были проанализированы несколько составов брикетов в различных массовых концентрациях. Исследование показало, что полученные брикеты быстрее воспламеняются, более плотные и прочные. Время горения таких брикетов уменьшается с увеличением концентрации биомассы в составе смеси, при этом скорость горения таких брикетов кратно увеличивается.

Использование в энергетической отрасли топливных смесей, состоящих из угля и древесной биомассы, позволяет значительно повысить экологические характеристики энергетических систем, работающих на таком топливе. Это достигается за счет сокращения выбросов антропогенных газов до 90% по сравнению с угольными энергетическими установками, при этом потери энергетической ценности топлива не превышают 9% [2].

В работе [3] рассматривалось сжигание смесевых топлив на основе угля и биомассы в слое. Эксперименты показали, что увеличение доли древесной компоненты в смеси приводит к снижению времени задержки зажигания смесевых топлив и концентрации антропогенных газов в процессе сжигания.

Авторами [4] рассматривалось смесевое топливо на основе угольной пыли и навоза крупного рогатого скота. Результаты экспериментов показали, что физические свойства брикетов соответствуют предъявляемым требованиям, плотность брикетов больше или равна 1 г/см^3 . Брикет имеет низкий показатель разбиваемости (менее 0,5%), что делает его устойчивым к ударам при падении. В зависимости от добавленной биомассы можно уменьшить время задержки зажигания и количество продуктов сгорания до 68,68%. Выбросы газов от сжигания топлива в виде брикетов оказывают меньшее влияние на окружающую среду, поскольку значения концентраций CO и H_2S ниже пороговых значений.

Авторами [5] сравнивалось воздействие токсичности угля и сосновых пеллет

при их совместном сжигании в трубчатой печи на экологию и здоровье людей. Результаты исследований показали, что совместное сжигание угля и пеллет приводит к снижению экотоксичности и токсичности окружающей среды для человека [6].

Смесевое топливо обычно обладает меньшей плотностью и большим количеством летучих веществ, из-за чего его свойства воспламенения и горения заметно различаются по сравнению с однородным углем. Важным энергетическим параметром таких топлив является время задержки зажигания. Определение этого параметра важно для понимания химической кинетики воспламенения, что имеет большое значение для процесса горения, влияя на эффективность работы котла, энергетическую эффективность и уровень выбросов вредных веществ.

Несмотря на достаточно обширные исследования в процессах воспламенения и горения биомассы в смеси с углем, в литературных источниках практически отсутствуют результаты экспериментальных исследований по обоснованию возможности энергетического применения смесевых топлив, сформированных на основе листьев различных пород древесины совместно с углем, для сжигания в котлах средней и малой мощности. Не исследованы процессы воспламенения и горения таких топливных композиций, нет результатов определения их технических и энергетических характеристик. Для обоснования возможности энергетического применения таких композитных топлив необходим комплексный подход, что и подтверждает актуальность выполняемых исследований в данном направлении.

Целью исследования является обоснование возможности применения опавших листьев различных пород древесины как эффективной добавки биомассы к углю, способствующей без существенного снижения энергетических характеристик угля улучшить его качественные показатели, например снижение зольности и ускорение процессов воспламенения.

Материалы и методы исследования

Подробная методика приготовления смесевых топлив описана в работе [2].

В данной работе исследовались листовно-угольные композиции двух видов:

1. Композитное топливо, сформированное из бурого угля и листовенной смеси, состоящей из измельченных опавших листьев березы и тополя.
2. Композитное топливо, сформированное из бурого угля и измельченных листьев ивы.

Таблица 1

Результаты анализа теплотехнических характеристик
угля, листьев и смесей на их основе

| Исходные компоненты | Теплотехнический анализ, % | | |
|--------------------------------------|----------------------------|-------|-----------|
| | W^a | A^d | V^{daf} |
| 100 % Бурый уголь | 7,12 | 2,78 | 57,64 |
| 100 % Листья ивы | 6,10 | 7,31 | 85,58 |
| 100 % Смесь листьев (тополь, береза) | 7,31 | 14,55 | 87,54 |
| Уголь бурый / смесь листьев 90/10 % | 7,52 | 3,88 | 62,33 |
| Уголь бурый / смесь листьев 75/25 % | 7,61 | 6,28 | 67,09 |
| Уголь бурый / смесь листьев 50/50 % | 7,65 | 7,04 | 74,09 |
| Уголь бурый / листья ивы 90/10 % | 7,24 | 3,57 | 64,02 |
| Уголь бурый / листья ивы 75/25 % | 7,18 | 4,28 | 68,76 |
| Уголь бурый / листья ивы 50/50 % | 7,16 | 5,45 | 73,20 |

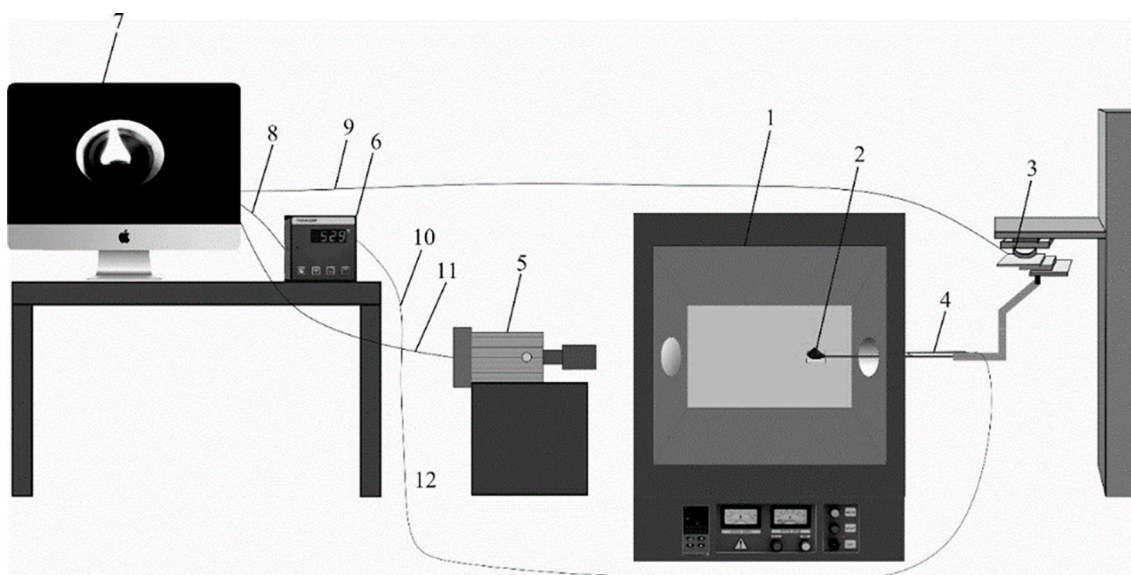


Рис. 1. Экспериментальный стенд для исследования воспламенения и горения смесевых топлив при термическом нагреве в слое. 1 – терморегулируемая муфельная печь; 2 – смесевое топливо массой 1 г; 3 – координатное устройство с приводом; 4 – платино-родиевая термопара; 5 – высокоскоростная видеокамера; 6 – преобразователь сигнала Термодат; 7 – персональный компьютер; 8, 9, 10, 11, 12 – каналы связи между оборудованием [3]

Уголь использовался бурый Балахтинского месторождения Красноярского края, листовая биомасса, прорастающая в г. Томске. Уголь и листья измельчались механическим способом, с помощью ножевой мельницы *Stegler-1000*, после чего компоненты смешивались в различных массовых концентрациях, %: 90/10, 75/25, 50/50.

Предварительно перед проведением исследований были определены теплотехнические характеристики исходных компонент в соответствии с государственными стандартами, описанными в ГОСТ 11022-

95, ГОСТ Р 52911-2020, ГОСТ Р 55660-2013. Результаты полученных теплотехнических характеристик, сформированных на основе бурого угля и листьев, приведены в табл. 1.

Результаты теплотехнических характеристик исходных топливных компонент и смесей, сформированных на их основе, показали, что смеси топливных компонентов уступают чистому углю по зольности и выходу летучих.

Экспериментальные исследования по определению времен задержки зажигания смесевых топлив выполнялись при их

термическом нагреве в муфельной печи модели ПМ-1400. Принципиальная схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Выполняемые исследования направлены на моделирование процесса слоевого сжигания смесевых топлив и установление степени влияния доли измельченных листьев на процессы воспламенения частиц угля, расположенных на минимальном расстоянии друг от друга в плотном слое.

Экспериментальные исследования выполнялись по следующей методике: навеска с топливом массой 1 г (2) помещалась на держатель координатного механизма (3). При поступлении сигнала с компьютера (7) координатный механизм приводился в действие и держатель вводился в отверстие муфельной печи (1). Фиксация начала процесса воспламенения и времени задержки зажигания осуществлялась при помощи высокоскоростной видеокамеры *Photron* (5). Временем задержки зажигания считалась разница между попаданием держателя с топливом в объектив видеокамеры и моментом начала свечения топливных частиц.

Результаты исследования и их обсуждение

Экспериментальные исследования по установлению времени задержки зажигания композитных топлив выполнялись в широком диапазоне температур (600, 700 и 800 °С).

Результаты экспериментальных исследований изменения времен задержки зажигания топливных смесей, сформированных на основе бурого угля и листьев, приведены в табл. 2.

Исследование процессов зажигания смесевых топлив при температуре 600°С показало, что при соотношении угля и листьев (%) 90/10 время задержки воспламенения уменьшается на 1,3 с по сравнению с чистым углем. При увеличении доли листьев до 25% время задержки воспламенения уменьшается на 3,14 с. При содержании листьев 50% время задержки воспламе-

ния уменьшается на 9,1 с, что существенно отличается от времени воспламенения чистого угля. При соотношении компонентов (%) 50/50 (уголь / листья ивы), время задержки воспламенения уменьшается на 4,5 с по сравнению с чистым углем, следовательно, вид листьев влияет на время задержки воспламенения смесевых топлив.

Задержка воспламенения смеси уголь/листья в процентном соотношении по массе 90/10 оказалась на 5,7 с меньше, чем у однородного угля, когда температура печи была увеличена до 700 °С. При тех же условиях задержка воспламенения угля и ивы была на 4,6 с меньше, чем у однородного угля. При добавлении к углю 25% смешанной лиственной биомассы время задержки воспламенения смеси сократилось на 7,16 с, а время задержки воспламенения древесного угля и ивы – на 6,11 с. При одинаковой концентрации компонентов (древесный уголь / листья) задержка воспламенения смеси была в 2,5 раза ниже по отношению к гомогенному углю. При той же концентрации компонентов (смесь угля и ивы) время задержки воспламенения оказалось в 3,3 раза меньше, чем у гомогенизированного древесного угля.

При установленной в печи температуре 800 °С были получены следующие результаты: время задержки зажигания при добавлении 10% смеси листьев в уголь уменьшилось на 5,06 с, а при добавлении 25% лиственной смеси – на 5,26 с, по сравнению со временем задержки зажигания однородного угля. При равной концентрации компонент время задержки зажигания меньше, чем у однородного угля, на 5,32 с. При соотношении угля и листьев ивы (%) 90/10 время задержки зажигания уменьшилось на 4,31 с по сравнению со временем задержки зажигания однородного угля. При добавлении 25% листьев ивы время задержки воспламенения композиционного топлива уменьшилось на 4,87 с, а при концентрации уголь / листья ивы (50/50) время задержки зажигания меньше, чем у однородного угля, на 5,44 с.

Таблица 2

Результаты анализа времени задержки зажигания угля и композитных топлив на их основе

| Исходные компоненты | 100% | 90/10% | 75/25% | 50/50% | 90/10% | 75/25% | 50/50% |
|---------------------|-------------|----------------------|----------------------|----------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| | бурый уголь | смесь угля и листьев | смесь угля и листьев | смесь угля и листьев | смесь угля и листьев ивы | смесь угля и листьев ивы | смесь угля и листьев ивы |
| Температура, °С | | | | | | | |
| 600 | 21,79 | 20,4 | 18,65 | 12,69 | 20,55 | 18,76 | 17,33 |
| 700 | 13,55 | 7,77 | 6,39 | 4,15 | 8,97 | 7,44 | 6,03 |
| 800 | 7,21 | 2,15 | 1,95 | 1,89 | 2,89 | 2,34 | 1,77 |

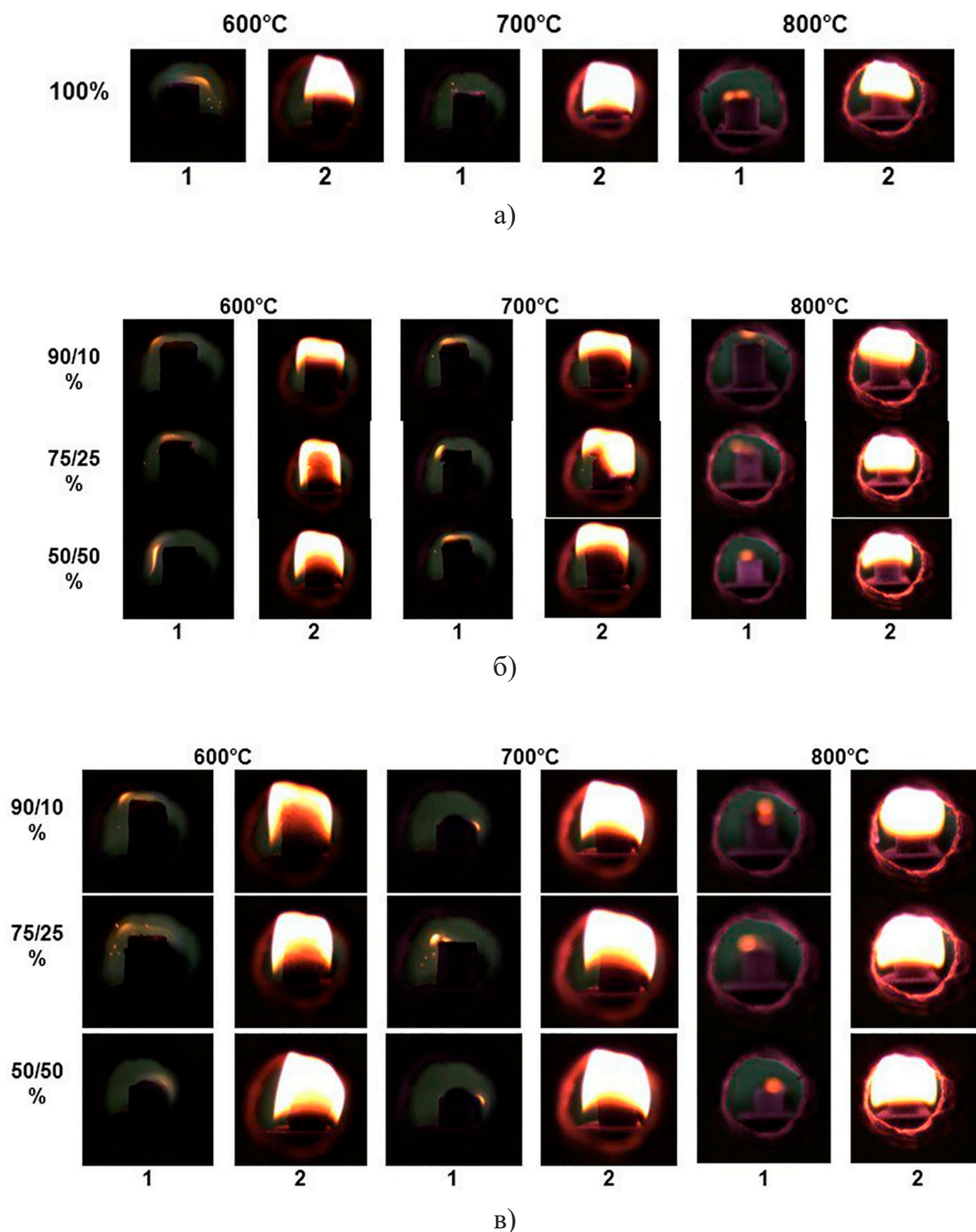


Рис. 2. Кадры моментов зажигания и горения образцов бурого угля, смеси бурого угля и листьев в разной массовой концентрации: 1 – момент зажигания; 2 – горение смеси: а – уголь бурый; б – смеси топлива на основе угля и листьев ивы в разных массовых концентрациях; в – смеси топлива на основе смеси листьев и угля в разных массовых концентрациях

Результаты исследований показали, что увеличение доли листьев в угле до 50% способствует значительному уменьшению времен задержки зажигания.

На рис. 2 приведены типичные кадры процессов воспламенения смесевых топлив исследуемых навесок в широком диапазоне температур.

Заключение

Выполненные экспериментальные исследования позволяют обосновать перспективность применения листьев как эффективной добавки к углю, способствующей ускорению процессов воспламенения, эффект позволит в перспективном будущем снизить затраты на процессы разжигания

энергетических котлов средней и малой мощности.

Технический анализ показал, что зольность при добавлении листвы в бурый уголь увеличивается, что не является положительным эффектом, однако увеличение зольности компенсируется значительным уменьшением времени задержки зажигания смесевых топлив.

Экспериментальные исследования подтверждают перспективность применения комбинированных топлив на энергетических установках средней и малой мощности для выработки тепловой энергии.

Список литературы

1. Nikiforov A., Kinzhibekova A., Prikhodko E., Karmanov A., Nurkina S. Analysis of the Characteristics of Bio-Coal Briquettes from Agricultural and Coal Industry Waste // *Energies*. 2023. MDPI. Vol. 16 (8). P. 1–16. DOI: 10.3390/en16083527.
2. Yankovsky S.A., Kuznetsov G.V., Misyukova A.D. Justification of Reducing the Yield of Sulfur Oxides in the Pyrolysis of Coals with the Addition of Logging Waste // *Chemistry of solid fuel*. 2022. № 1. P. 57–65. DOI: 10.31857/S0023117722010108.
3. Kuznetsov G., Cherednik I., Galaktionova A., Yankovsky S. The influence of wood processing waste on the technical and energy characteristics of the Maikuben coal-based mixed fuels // *J. Phys. Conf Ser.* 2021. Vol. 2057, Is. 1. P. 012128. DOI: 10.1088/1742-6596/2057/1/012128.
4. Dyah M., Lenny M.E. Value Increasing of Reject Coal with Biomass Adding as Bio-coal Briquette // *Indonesian journal of urban and environmental technology*. 2020 Vol. 3, Is. 2. P. 123–135. DOI: 10.25105/urbanenvirotech.v3i2.5110.
5. Bai X., Lu G., Bennet T., Sarroza A., Eastwick C., Liu H., Yan Y. Combustion behavior profiling of single pulverized coal particles in a drop tube furnace through high-speed imaging and image analysis // *Exp. Therm. Fluid Sci.* Elsevier. 2017. Vol. 85. P. 322–330. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2017.03.018.
6. Mouton L., Trigaux D., Allacker K., Röck M. Low-tech passive solar design concepts and bio-based material solutions for reducing life cycle GHG emissions of buildings // *Energy Build.* Elsevier. 2023. Vol. 282. P. 112678. DOI: 10.1016/j.enbuild.2022.112678.

СТАТЬЯ

УДК 615.276:547.583.5:303.723.039.3:303.723.032.2

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ПОИСКЕ МОДЕЛИ
«СТРУКТУРА – ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ»
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ AK_QSAR В РЯДУ
АМИДОВ И ГИДРАЗИДОВ N– 2-ФУРАНОИЛ ЗАМЕЩЕННЫХ
АНТРАНИЛОВЫХ КИСЛОТ****Андрюков К.В.**

*ФГБОУ ВО «Пермская государственная фармацевтическая академия»
Министерства здравоохранения Российской Федерации, Пермь,
e-mail: k_andrukov@mail.ru*

Исследование посвящено изучению причинно-следственной взаимосвязи «структура – противовоспалительная активность», созданной на основе квантово-химических вычислений в ряду амидов и гидразидов N– 2-фураноил замещенных антралиловых кислот поиска зависимости, описывающей биологическую активность. Для построения причинно-следственной модели при описании структуры использовали квантово-химические вычисления (программа Gaussian 03), прогнозирование противовоспалительной активности (AK_QSAR (противовоспалительная активность)) и построение модели (Statistica 6). Научная публикация посвящена проведению исследования по изучению и оценке влияния структурных элементов анализируемых соединений на теоретически рассчитанные значения противовоспалительной активности. Одним из основных компонентов описываемого моделирования является его многоуровневость в сочетании с проведением корреляционного анализа. Теоретические значения противовоспалительной активности 25 соединений, определенные на модели «каррагенинового отека», рассчитаны программой AK_QSAR (противовоспалительная активность). Методом многоуровневого корреляционного анализа проведено построение условных трех зависимостей по объему выборки. Корреляционный анализ проводили действием с дескрипторами, а именно методом исключения. В дальнейшем был проведен отбор 6 моделей по признакам: регрессионный коэффициент (0,7 и более) и критерий Фишера (10 и более). Проведена проверка найденных причинно-следственных моделей «структура – противовоспалительная активность» на выборке содержащей экспериментальные результаты анализируемой биологической активности.

Ключевые слова: антралиловая кислота, AK_QSAR, корреляция, множественная регрессия, противовоспалительная активность

**QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS IN SEARCH
OF THE “STRUCTURE – ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY” MODEL
USING THE AK_QSAR PROGRAM IN A SERIES OF AMIDES
AND HYDRAZIDES OF N– 2-FURANOYL SUBSTITUTED ANTHRANILIC ACIDS****Andryukov K.V.**

Perm State Pharmaceutical Academy, Perm, e-mail: k_andrukov@mail.ru

The study is devoted to the study of the cause-and-effect relationship “structure- anti-inflammatory activity” created based on quantum chemical calculations in a series of amides and hydrazides of N- 2-furanyloxy substituted anthranilic acids to search for a relationship describing biological activity. To construct a causal model, quantum chemical calculations (Gaussian 03 program), prediction of anti-inflammatory activity (AK_QSAR (anti-inflammatory activity)) and model structure (Statistica 6) were used to describe the structure. The scientific publication is devoted to conducting research on the study and assessment of the influence of structural elements of the analyzed compounds on theoretically calculated values of anti-inflammatory activity. One of the main components of the described modeling is its multilevel nature in combination with correlation analysis. The theoretical values of the anti-inflammatory activity of 25 compounds, determined on the “carrageenan edema” model, were calculated by the AK_QSAR (anti-inflammatory activity) program. The method of multilevel correlation analysis was used to construct conditional three dependencies on the sample size. The implementation of the correlation analysis procedure was carried out by an action with descriptors, namely, by the exclusion method. Subsequently, 6 models were selected based on the following criteria: the regression coefficient (0,7 or more) and the Fisher criterion (10 or more). The verification of the found causal models of “structure- anti-inflammatory activity” was carried out on a sample containing experimental results of the analyzed biological activity.

Keywords: anthranilic acid, AK_QSAR, correlation, multiple regression, anti-inflammatory activity

Введение

Лекарства – это адаптивные молекулы. Они реализуют эту особенность, генерируя различные ансамбли прототропных форм и конформеров, которые зависят от окружа-

ющей среды. Среди впечатляющего количества доступных технологий вычислительного поиска и открытия лекарств количественные подходы к взаимосвязи структура – активность (QSAR), которые опираются

на вычислительные дескрипторы квантовой химии, являются наиболее подходящими для моделирования адаптивных лекарств [1]. Действительно, вычислительные дескрипторы квантовой химии способны учитывать вариации внутримолекулярных взаимодействий учебных соединений, которые отражают их адаптивные склонности к межмолекулярному взаимодействию. Это позволяет разрабатывать причинные, интерпретирующие и разумно предсказывающие количественные модели взаимосвязи структура – активность и, следовательно, надежную химическую информацию, доработанную для разработки и открытия лекарств. В разработке причинно-интерпретирующих зависимостей используются приемы статистического метода анализа: линейные и регрессионные [2]. По множественным оценкам к перспективным методам исследования параметров структуры относятся квантово-химические вычисления [3]. Поиск количественной зависимости биологической активности от строения веществ является перспективным. Одной из проблем построения моделей прогнозирования биологической активности является наличие результатов исследования биологической активности. Способов замены экспериментальных данных существует огромное количество, для их построения применяются различные способы обучения и построения.

Производные антралиловой кислоты относятся к перспективным производным, с различными видами фармакологического действия [4–6].

Цель исследования – изучение причинно-следственной взаимосвязи «структура – противовоспалительная активность», созданной на основе квантово-химических вычислений в ряду амидов и гидразидов N– 2-фураноил замещенных антралиловых кислот поиска зависимости, описывающей биологическую активность.

Материалы и методы исследования

Для построения причинно-следственной модели при описании структуры использовали квантово-химические вычисления (программа Gaussian 03), прогнозирование противовоспалительной активности (AK_QSAR (противовоспалительная активность) [7]) и построение модели (Statistica 6).

Результаты исследования и их обсуждение

Молекулярное моделирование исследуемых соединений – двадцати пяти гомологов (1–25) амидов и гидразидов N– 2-фураноил замещенных антралиловых кислот

проводили программой AK_QSAR (ПВА). Общая структура анализируемого объекта исследования приведена на рис. 1.

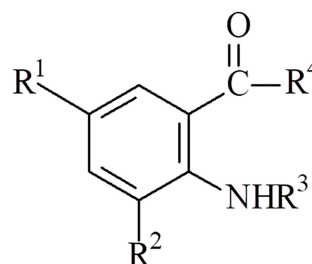


Рис. 1. Общая структура исследуемых соединений ряда с заместителями: R¹, R², R³, R⁴

Для проведения дизайна исследуемых соединений с помощью AK_QSAR (ПВА) осуществляли построение 25 структур (1–25) (рис. 2), общей химической структуры (рис. 1).

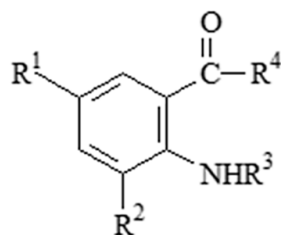
Результаты прогнозирования ПВА 25 соединений программой AK_QSAR (ПВА), определенной на модели «карагенинового отека» [7] и структурные (квантово-химические) параметры описания структуры, представлены в табл. 1.

С использованием табл. 1 проведена обработка полученных данных статистического анализа в оценке объема выборки по каждому описательному параметру структуры. В качестве структурных параметров использовали результаты квантово-химических расчетов: напряженность (E), потенциал (Pot) и заряд в модуле (|q|). Результаты проведенного статистического анализа, его обработки по критериям: коэффициент корреляции (R) и критерий Фишера (F) приведены в табл. 2 и 3.

Осуществлена обработка данных регрессионного исследования по значениям R (R > 0,500) и критерия Фишера (F > 6), результаты обработки приведены в табл. 4.

С использованием результатов отбора, приведенных в табл. 4, выбраны три набора дескрипторов в виде моделей (№ 1–3), основанные на объеме выборки со значениями R (R > 0,500) и F (F > 6): 1 модель (N = 15 соединений): $\sum C (E)$, $\sum H (pot)$, $\sum C (|q|)$, $\sum O (|q|)$, $\sum H (|q|)$; 2 модель (N = 20 соединений): $\sum C (E)$, $\sum O (|q|)$; 3 модель (N = 25 соединений): $\sum C (E)$, $\sum C (pot)$, $\sum C (|q|)$, $\sum O (|q|)$, $\sum H (|q|)$.

Регрессионное моделирование проводили методом пошагового исключения параметров по одному, количество структурных характеристик, равное двум, использовали в качестве минимального.



$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH_2$ (1);

$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_3$ (2);

$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (3);

$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_3$ (4);

$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (5);

$R^1 = H, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO 2-furyl}$ (6);

$R^1 = Br, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH_2$ (7);

$R^1 = Br, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_3$ (8);

$R^1 = Br, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (9);

$R^1 = Br, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO C}_6\text{H}_5$ (10);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NHNH_2$ (11);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_3$ (12);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ (13);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ C}_6\text{H}_{11}$ (cyclohexyl) (14);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (15);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (16);

$R^1 = I, R^2 = H, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO C}_6\text{H}_5$ (17);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NHNH_2$ (18);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH_2$ (19);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_3$ (20);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ C}_6\text{H}_{11}$ (cyclohexyl) (21);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (22);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_3$ (23);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (24);

$R^1 = Br, R^2 = Br, R^3 = CO \text{ 2-furyl}, R^4 = NH \text{ NHCO C}_6\text{H}_5$ (25)

Рис. 2. Структуры исследуемых соединений (1–25)

Таблица 1

Прогнозируемые значения ПВА (ПВА_{расч.})
и структурные параметры соединений 1–25

| № | ПВА _{расч.} , % | $\sum C$ (E) | $\sum O$ (E) | $\sum H$ (E) | $\sum C$ (Пот) | $\sum O$ (Пот) | $\sum H$ (Пот) | $\sum C$ (q) | $\sum O$ (q) | $\sum H$ (q) |
|---|--------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 1 | 44,22 | 7,386 | 2,426 | 10,470 | 159,508 | 39,716 | 71,794 | 1,677 | 0,921 | 1,236 |
| 2 | 24,70 | 7,517 | 2,582 | 13,037 | 168,687 | 44,254 | 91,080 | 1,800 | 0,937 | 1,317 |
| 3 | 74,01 | 11,146 | 2,615 | 15,615 | 251,801 | 45,104 | 172,600 | 2,189 | 0,927 | 1,684 |
| 4 | 7,23 | 7,871 | 3,196 | 13,275 | 181,130 | 56,808 | 102,272 | 1,775 | 1,108 | 1,306 |
| 5 | 56,54 | 11,500 | 3,229 | 15,854 | 264,244 | 57,658 | 183,792 | 2,164 | 1,099 | 1,673 |

Окончание табл. 1

| № | ПВА _{расст.} , % | ∑С (Е) | ∑О (Е) | ∑Н (Е) | ∑С (Пот) | ∑О (Пот) | ∑Н (Пот) | ∑С (q) | ∑О (q) | ∑Н (q) |
|----|---------------------------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 6 | 12,19 | 7,596 | 3,580 | 13,185 | 171,976 | 65,105 | 90,459 | 1,810 | 1,130 | 1,319 |
| 7 | 48,06 | 7,687 | 2,423 | 10,007 | 162,586 | 39,622 | 66,118 | 1,672 | 0,883 | 1,170 |
| 8 | 7,76 | 8,265 | 3,192 | 12,078 | 184,380 | 56,734 | 85,420 | 1,749 | 1,090 | 1,195 |
| 9 | 28,2 | 11,801 | 3,226 | 15,391 | 267,322 | 57,563 | 178,116 | 2,159 | 1,061 | 1,607 |
| 10 | 8,45 | 8,929 | 3,209 | 14,561 | 201,141 | 57,101 | 107,732 | 1,879 | 1,067 | 1,348 |
| 11 | 19,29 | 8,123 | 2,729 | 10,541 | 178,077 | 46,987 | 77,214 | 1,722 | 1,092 | 1,192 |
| 12 | 28,78 | 7,831 | 2,579 | 12,596 | 172,066 | 44,170 | 85,809 | 1,795 | 0,898 | 1,247 |
| 13 | 25,03 | 8,478 | 3,190 | 13,431 | 187,141 | 57,234 | 98,883 | 1,816 | 0,895 | 1,256 |
| 14 | 32,67 | 9,584 | 2,601 | 14,405 | 216,681 | 44,728 | 107,879 | 1,970 | 0,936 | 1,414 |
| 15 | 78,09 | 11,460 | 2,612 | 15,175 | 255,180 | 45,020 | 167,329 | 2,183 | 0,889 | 1,614 |
| 16 | 60,62 | 11,815 | 3,226 | 15,413 | 267,623 | 57,573 | 178,522 | 2,158 | 1,061 | 1,603 |
| 17 | 8,68 | 8,943 | 3,210 | 14,584 | 201,442 | 57,111 | 108,137 | 1,878 | 1,068 | 1,345 |
| 18 | 25,36 | 7,841 | 2,716 | 9,729 | 170,368 | 46,669 | 71,677 | 1,639 | 1,094 | 1,064 |
| 19 | 54,38 | 7,418 | 2,410 | 9,217 | 155,177 | 39,314 | 60,986 | 1,588 | 0,886 | 1,039 |
| 20 | 34,86 | 7,548 | 2,565 | 11,784 | 164,356 | 43,852 | 80,271 | 1,712 | 0,901 | 1,120 |
| 21 | 38,75 | 9,301 | 2,588 | 13,593 | 208,971 | 44,410 | 102,342 | 1,887 | 0,939 | 1,287 |
| 22 | 84,17 | 11,177 | 2,599 | 14,362 | 247,470 | 44,702 | 161,791 | 2,101 | 0,892 | 1,487 |
| 23 | 17,39 | 7,902 | 3,180 | 12,022 | 176,799 | 56,406 | 91,464 | 1,687 | 1,072 | 1,109 |
| 24 | 66,70 | 11,532 | 3,213 | 14,601 | 259,913 | 57,256 | 172,984 | 2,075 | 1,063 | 1,476 |
| 25 | 14,76 | 8,660 | 3,196 | 13,771 | 193,732 | 56,794 | 102,600 | 1,795 | 1,070 | 1,217 |

Таблица 2

Результаты статистического исследования зависимости «противовоспалительной активности (ПВА)» от суммарных структурных параметров по R и объему анализируемой выборки

| Число БАВ | Коэффициент корреляции (R) | | | | | | | | |
|-----------|----------------------------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | ∑С (Е) | ∑О (Е) | ∑Н (Е) | ∑С (Пот) | ∑О (Пот) | ∑Н (Пот) | ∑С (q) | ∑О (q) | ∑Н (q) |
| 10 | 0,488 | 0,581 | 0,159 | 0,439 | 0,569 | 0,459 | 0,481 | 0,608 | 0,550 |
| 15 | 0,604 | 0,529 | 0,314 | 0,557 | 0,517 | 0,571 | 0,610 | 0,565 | 0,637 |
| 20 | 0,538 | 0,466 | 0,181 | 0,482 | 0,459 | 0,496 | 0,486 | 0,524 | 0,474 |
| 25 | 0,632 | 0,437 | 0,250 | 0,579 | 0,426 | 0,588 | 0,579 | 0,520 | 0,535 |

Таблица 3

Результаты статистического исследования зависимости «противовоспалительной активности (ПВА)» от суммарных структурных параметров по F и объему анализируемой выборки

| Число БАВ | Критерий Фишера (F) | | | | | | | | |
|-----------|---------------------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | ∑С (Е) | ∑О (Е) | ∑Н (Е) | ∑С (Пот) | ∑О (Пот) | ∑Н (Пот) | ∑С (q) | ∑О (q) | ∑Н (q) |
| 10 | 2,512 | 4,088 | 0,209 | 1,917 | 3,851 | 2,141 | 2,421 | 4,708 | 3,480 |
| 15 | 7,503 | 5,076 | 1,431 | 5,877 | 4,763 | 6,333 | 7,750 | 6,137 | 8,958 |
| 20 | 7,371 | 5,021 | 0,612 | 5,487 | 4,825 | 5,911 | 5,613 | 6,833 | 5,232 |
| 25 | 15,352 | 5,450 | 1,548 | 11,657 | 5,145 | 12,182 | 11,655 | 8,562 | 9,269 |

Таблица 4

Результаты отбора итогов корреляционного анализа объем выборки, R, F

| № | Дескриптор | Объем выборки | R | F |
|----|-----------------------|---------------|-------|--------|
| 1 | $\sum C (E)$ | 15 | 0,604 | 7,503 |
| 2 | $\sum C (E)$ | 20 | 0,538 | 7,371 |
| 3 | $\sum C (E)$ | 25 | 0,632 | 15,352 |
| 4 | $\sum O (E)$ | 15 | 0,529 | 5,076 |
| 5 | $\sum C (\text{пот})$ | 15 | 0,557 | 5,877 |
| 6 | $\sum C (\text{пот})$ | 25 | 0,579 | 11,657 |
| 7 | $\sum H (\text{пот})$ | 15 | 0,571 | 6,333 |
| 8 | $\sum C (q)$ | 15 | 0,610 | 7,750 |
| 9 | $\sum C (q)$ | 25 | 0,579 | 11,655 |
| 10 | $\sum O (q)$ | 15 | 0,565 | 6,137 |
| 11 | $\sum O (q)$ | 20 | 0,524 | 6,833 |
| 12 | $\sum O (q)$ | 25 | 0,520 | 8,652 |
| 13 | $\sum H (q)$ | 15 | 0,637 | 8,958 |
| 14 | $\sum H (q)$ | 25 | 0,520 | 8,562 |

Таблица 5

Результаты проверки уравнений регрессии связи ПВА со структурой на выборке из 6 соединений (26–31)

| № | Уравнение регрессии | Оценка прогноза ПВА | |
|---|--|---------------------|---------------------|
| | | R _{прогн.} | S _{прогн.} |
| 1 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 1 = 155,194 + 17,052 \times \sum C (E) - 0,395 \times \sum H (\text{пот}) -$ $- 258,016 \times \sum C (q) - 143,603 \times \sum O (q) + 291,135 \times \sum H (q)$ (R = 0,917; F = 9,51; S = 11,37; N = 15) | 0,714 | 13,45 |
| 2 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 2 = 143,061 + 8,070 \times \sum C (E) - 180,296 \times \sum O (q)$ (R = 0,858; F = 9,85; S = 13,66; N = 10) | 0,426 | 24,71 |
| 3 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 3 = 66,059 + 69,621 \times \sum C (E) - 2,431 \times \sum C (\text{пот}) -$ $- 105,922 \times \sum C (q) - 94,481 \times \sum O (q) + 92,233 \times \sum H (q)$ (R = 0,897; F = 15,81; S = 11,65; N = 25) | 0,600 | 16,30 |
| 4 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 4 = - 42,788 + 71,456 \times \sum C (E) - 2,781 \times \sum C (\text{пот}) +$ $+ 36,339 \times \sum C (q) - 75,236 \times \sum O (q)$ (R = 0,887; F = 18,46; S = 11,91; N = 25) | 0,592 | 16,03 |
| 5 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 5 = - 209,418 + 106,599 \times \sum C (E) -$ $- 4,655 \times \sum C (\text{пот}) + 117,299 \times \sum C (q)$ (R = 0,872; F = 22,31; S = 12,30; N = 25) | 0,498 | 20,78 |
| 6 | $\text{ПВА}_{\text{расч.}} 6 = - 97,189 + 97,055 \times \sum C (E) - 3,696 \times \sum C (\text{пот})$ (R = 0,840; F = 26,55; S = 13,31; N = 25) | 0,537 | 17,41 |

По результатам регрессионного анализа проведен отбор значимых моделей с R: 0,700 и более, и значением F: 9 и более. Результаты обработки регрессионного анализа приведены в табл. 5.

Тестирование найденных моделей связи ПВА со структурой проводили на выборке

из 6 соединений (26–31) (рис. 3), содержащей результаты экспериментального исследования ПВА [7], общей химической структуры (рис. 1).

Дескрипторы, используемые при расчетах ПВА соединений 26–31, приведены в табл. 6.

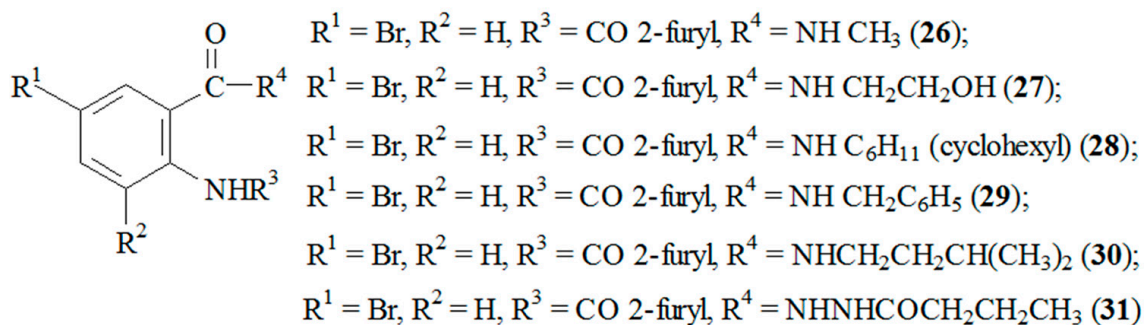


Рис. 3. Структуры исследуемых соединений, проверочная выборка 6 соединений (26–31)

Таблица 6

Структурные параметры 6 соединений (26–31)

| № | ΣC(E) | ΣO(E) | ΣC(пот) | ΣO(пот) | ΣH(пот) | ΣC(q) | ΣO(q) | ΣH(q) |
|----|-------|-------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 26 | 7,82 | 2,58 | 171,77 | 44,16 | 85,40 | 1,80 | 0,90 | 1,25 |
| 27 | 8,46 | 3,19 | 186,84 | 57,22 | 98,48 | 1,82 | 0,90 | 1,26 |
| 28 | 9,57 | 2,60 | 216,38 | 44,72 | 107,47 | 1,97 | 0,94 | 1,42 |
| 29 | 11,45 | 2,61 | 254,88 | 45,01 | 166,92 | 2,18 | 0,89 | 1,62 |
| 30 | 10,56 | 2,61 | 247,94 | 44,92 | 170,49 | 2,12 | 0,86 | 1,58 |
| 31 | 11,74 | 3,21 | 270,21 | 57,08 | 159,50 | 1,97 | 1,04 | 1,41 |

Таблица 7

Результаты прогноза противовоспалительной активности (ПВА_{расч.}) по уравнениям 1–6 и экспериментальные (ПВА_{эсп.}) соединений (26–31)

| № п.п | Ур-е 1 (ПВА _{расч.} 1) | Ур-е 2 (ПВА _{расч.} 2) | Ур-е 3 (ПВА _{расч.} 3) | Ур-е 4 (ПВА _{расч.} 4) | Ур-е 5 (ПВА _{расч.} 5) | Ур-е 6 (ПВА _{расч.} 6) | ПВА _{эсп.} , % |
|-------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|-------------------------|
| 26 | 26,47 | 44,17 | 32,82 | 35,66 | 34,81 | 26,61 | 19,55 |
| 27 | 29,77 | 49,97 | 40,05 | 40,99 | 36,11 | 33,71 | 21,15 |
| 28 | 45,86 | 51,50 | 39,76 | 40,33 | 34,45 | 31,88 | 63,65 |
| 29 | 64,13 | 75,10 | 76,96 | 78,60 | 80,28 | 71,65 | 60,25 |
| 30 | 55,19 | 72,42 | 37,30 | 34,21 | 10,87 | 11,34 | 31,65 |
| 31 | 44,41 | 49,67 | 48,99 | 37,31 | 14,48 | 43,34 | 35,65 |

Полученные результаты прогноза ПВА в сравнении с экспериментальными значениями (ПВА_{эсп.}), определенные на модели «карагенинового отека», представлены в табл. 7.

Заключение

В результате молекулярного дизайна 25 производных антралиловой кислоты получено 6 значимых моделей.

Уравнение 1 (пятипараметровое) по результатам проверки на независимой выборке имеет минимальное значение среднеквадратичной ошибки ($S_{\text{прогн.}} = 13,45$), прогноза

ПВА, среди полученных моделей, и максимальное $R_{\text{прогн.}}$ ($R_{\text{прогн.}} = 0,714$) (коэффициент корреляций теоретических значений биологической активности с экспериментальными), в сравнительной оценке по отношению к найденным моделям.

Список литературы

1. Keyvanpour M.R., Shirzad M.B. An analysis of QSAR research based on machine learning concepts // Current Drug Discovery Technologies. 2021. Vol. 18, Is. 1. P. 17–30.
2. Blakemore D.C., Castro L., Churcher I., Rees D.C., Thomas A.W., Wilson D.M., Wood A. Organic synthesis pro-

vides opportunities to transform drug discovery // *Nature chemistry*. 2018. Vol. 10, Is. 4. P. 383–394.

3. Bauer B., Bravyi S., Motta M., Chan G.K.L. Quantum algorithms for quantum chemistry and quantum materials science // *Chemical Reviews*. 2020. Vol. 120, Is. 22. P. 12685–12717.

4. Nasr T.M., Aboshanab A.M., Abouzid K.A.M., Zahary W.A. Hands-on synthetic approaches and biological activities of anthranilic acid derivatives: a mini-review // *Egyptian Journal of Chemistry*. 2023. Vol. 66, Is. 7. P. 329–343.

5. Atrushi K.S., Ameen D.M., Abdulrahman S.H., Abachi F.T. Density functional theory, ADME, and molecular docking of

some anthranilic acid derivatives as cyclooxygenase inhibitors // *J. Med. Chem. Sci.* 2023. Vol. 6. P. 1943–1952.

6. Kwon I.S., Kwak J.H., Pyo S., Lee H.W., Kim A., Schmitz F.J. Oscarellin, an anthranilic acid derivative from a Philippine sponge, *Oscarella stillans*, as an inhibitor of inflammatory cytokines in macrophages // *Journal of natural products*. 2017. Vol. 80, Is. 1. P. 149–155.

7. Андрюков К.В. Использование качественных и количественных соотношений «структура-активность» в целенаправленном синтезе биологически активных веществ производных антралиновой кислоты: автореф. дис. ... докт. фарм. наук. Пермь, 2020. 48 с.