

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ ГРАДИЕНТНО-УПРОЧНЕННЫХ ЛИТЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ НУЖД РЕСУРСОДОБЫВАЮЩИХ ОТРАСЛЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Руководитель проекта – кандидат технических наук А.Н. Аникеев

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Выявление условий взаимодействия дисперсных частиц карбидов с расплавами различного состава с целью обеспечения необходимого уровня смачивания частиц расплавом и обеспечения получаемой продукции повышенными механическими свойствами.

ПУБЛИКАЦИИ

3 научных статьи

4 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

3 статьи в SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Проведение термодинамического моделирования взаимодействия дисперсных частиц с металлами различного состава в присутствии различных веществ, используемых при получении литых деталей.
- ➔ Проведение компьютерного моделирования заполнения моделей с целью выявления закономерностей уровня пропитки формируемого слоя с повышенными свойствами в зависимости от различных факторов: температуры расплава, толщины формируемого слоя, типа и дисперсности частиц.
- ➔ Выявление условий взаимодействия формируемого слоя частиц с металлическим расплавом в зависимости от типа атмосферы (восстановительная, окислительная, вакуум).
- ➔ Выявление закономерностей изменения микроструктур получаемых материалов в части определения толщин формируемого и переходного слоя.
- ➔ Выявление зависимостей получаемых свойств градиентных литых материалов от типа и дисперсности частиц, составов расплава, толщины получаемого слоя.
- ➔ Математическая обработка экспериментальных результатов с целью выявления уровня тесноты связей и уровня влияния различных типов частиц на свойства получаемых материалов различного состава.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- ➔ Результаты термодинамического моделирования взаимодействия дисперсных частиц и расплавов различного состава в присутствии различных веществ, используемых при получении литых деталей.
- ➔ Зависимости, закономерности, модельные параметры, полученные в результате компьютерного моделирования заполнения моделей с целью выявления закономерностей уровня пропитки формируемого слоя с повышенными свойствами в зависимости от различных факторов: температуры расплава, толщины слоя, типа и дисперсности частиц.
- ➔ Зависимости условий взаимодействия формируемого слоя частиц с металлическими расплавами в зависимости от типа атмосферы (восстановительная, окислительная, вакуум).
- ➔ Закономерности изменения микроструктур получаемых материалов (толщины формируемого и переходного слоев, изменения структуры металла основной отливки).
- ➔ Зависимости получаемых свойств градиентных литых материалов от типа и дисперсности частиц, составов расплава, толщины получаемого слоя.
- ➔ Результаты математической обработки экспериментальных результатов с целью выявления уровня тесноты связей и уровня влияния различных типов частиц на свойства получаемых материалов различного состава. Результатом работы станут новые данные, позволяющие разработать экономически эффективную технологию создания градиентных литых материалов.

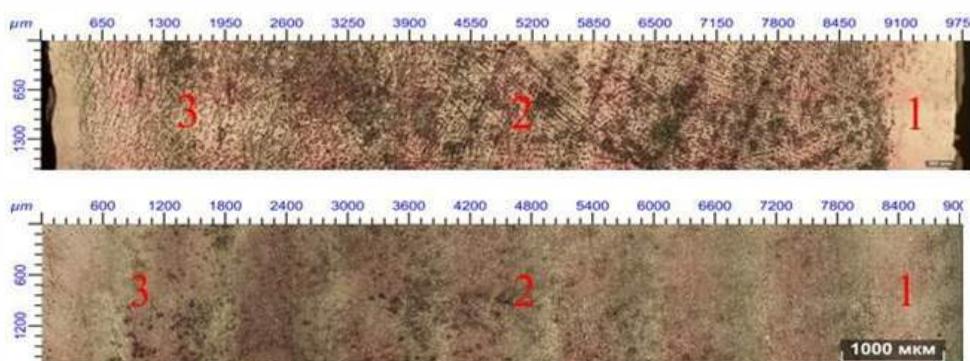
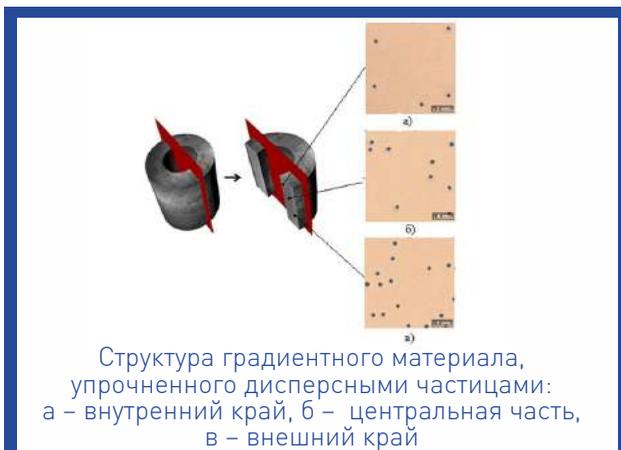
Данная технология позволит получать новые материалы с высокими механическими свойствами и повышенным ресурсом работы, предназначенные для нужд ресурсодобывающей отрасли, предприятий военно-промышленного комплекса. Производством материалов для данных отраслей промышленности занимается множество предприятий металлургической и машиностроительной отрасли, расположенных по всей стране, поэтому после завершения проекта и получения новых данных возможна будет интеграция технологии в практически каждое из этих предприятий.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

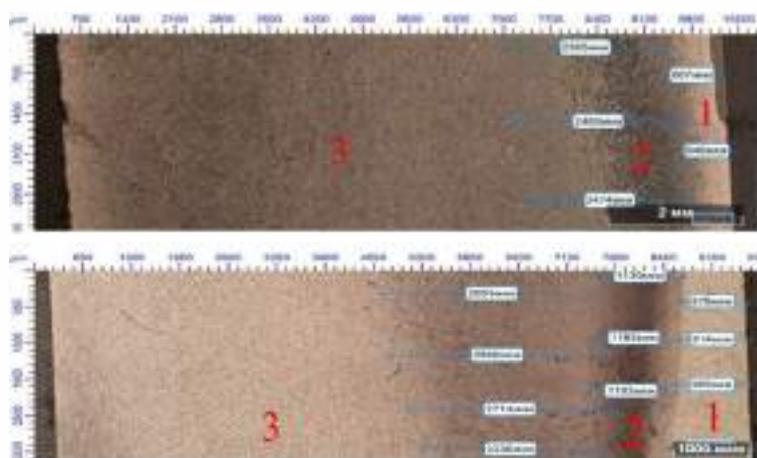
- ☑ Выявление зависимостей получаемых свойств градиентных литых материалов от типа и дисперсности частиц, составов расплава, толщины получаемого слоя.
- ☑ Математическая обработка экспериментальных результатов с целью выявления уровня тесноты связей и уровня влияния различных типов частиц на свойства получаемых материалов различного состава.
- ☑ Проверка полученных данных, корректировка, проведение дополнительных исследований.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты проекта будут возможны к применению во всех отраслях промышленности, где требуются повышенные механические, износостойкие, теплофизические и другие свойства. Полученные данные станут основой для технологии производства материалов с уникальными задаваемыми свойствами, востребованными различными отраслями промышленности. Полученные результаты будут востребованы данными предприятиями долгое время, поскольку предлагаемая технология сможет заметить значительную часть материалов, поставляемых из других стран.



Панорама образцов центробежнолитых заготовок после проведения обработки металла давлением и термической обработки, x20



Панорама образцов центробежнолитых заготовок после проведения обработки металла давлением, x20

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ИНЖИНИРИНГ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ОБРАБОТКИ ВЫСОКОТОЧНЫХ ИЗДЕЛИЙ МАШИНОСТРОЕНИЯ

Руководитель проекта – кандидат технических наук **Д. В. Ардашев**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Повышение эффективности технологических процессов изготовления высокоточных деталей путем совершенствования технологической подготовки производства операций абразивной и лезвийной обработки на основе комплекса математических моделей нового поколения, использующих преимущества суперкомпьютинга.

ПУБЛИКАЦИИ

8 научных статей

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

3 статьи в Scopus

2 статьи в Web of Science

3 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Разработка многофакторных математических моделей производительности и качества абразивной обработки высокоточных изделий, изготовленных из различных материалов.
- Разработка математической силовой модели, модели точности обработки и геометрических параметров зоны резания при контурном фрезеровании сложнопрофильных деталей.
- Разработка математических моделей мерных резьюобразующих инструментов, учитывающих технологические факторы: упругие и тепловые деформации элементов технологической системы, износ инструментов, погрешности формообразующего движения.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Многофакторные математические модели (точности, шероховатости, бесприжоговости, производительности процесса), решаемые имитационными методами, позволяющие управлять качеством и производительностью обработки для операций абразивной обработки.
- Математическая силовая модель, модель точности и геометрических параметров зоны резания для операций фрезерования сложнопрофильных поверхностей.

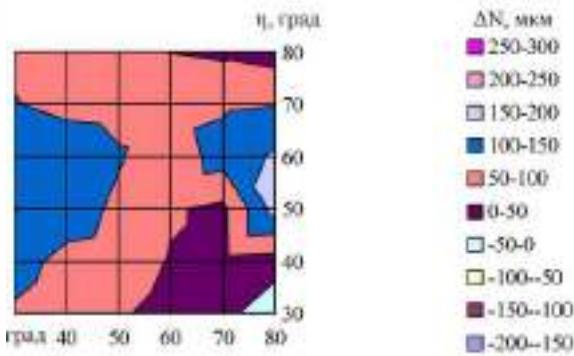
- Многофакторные математические модели мерных инструментов, необходимые для последующего управления качеством обработки для операций резьюобработки.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

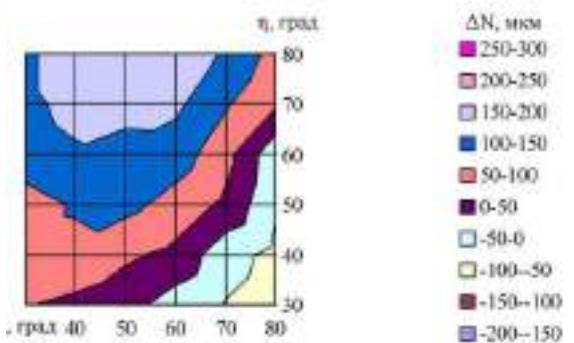
Создание рекомендаций в виде каталогов, справочников и др. нормативно-технической документации по режимно-инструментальному оснащению операций механической обработки. Повышение эффективности функционирования технологических служб предприятий за счет внедрения и использования САПР ТПП, содержащей САЕ-модуль.

ПОТРЕБИТЕЛИ ОЖИДАЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

- Машиностроительные предприятия космической и транспортной отрасли.
- Компании, занимающиеся разработкой и реализацией программных продуктов - САПР ТП.
- Высшие учебные заведения, средне-специальные учебные заведения, осуществляющие подготовку бакалавров и магистров по машиностроительному направлению.

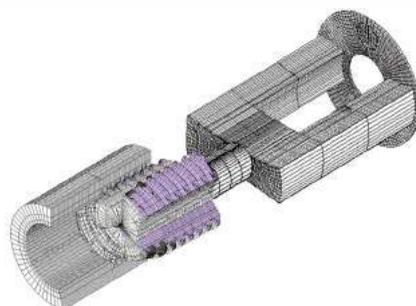


а)

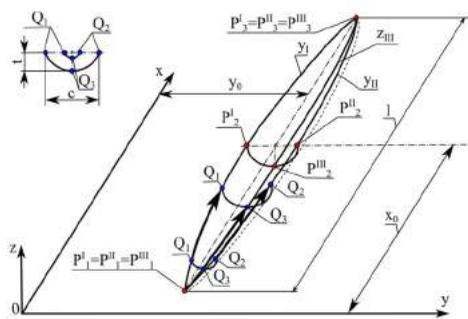


б)

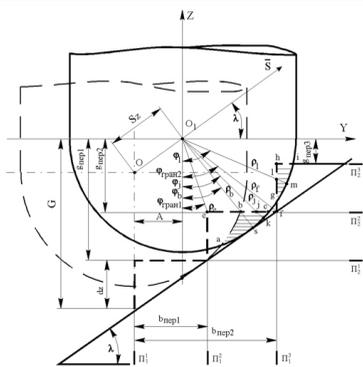
Контурные диаграммы погрешности размера динамической настройки в зависимости от углов наклона обрабатываемой поверхности и для разных условий фрезерования: а – «строка справа», $S_z=0,1$ мм/зуб, $d_z=1$ мм; б – «строка слева», $S_z=0,05$ мм/зуб, $d_z=2$ мм.



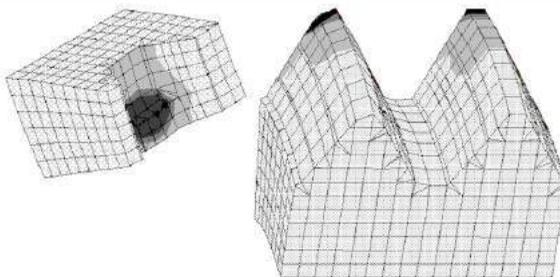
Модель обработки метчиком с использованием упругого компенсатора резьбонарезного патрона



Расчетная схема при описании единичной абразивной царапины сплайн функциями



Расчетная схема для определения толщины срезаемого слоя при фрезеровании поверхности со ступенчатым припуском



Распределение напряжений в заготовке и инструменте при резьбонарезании (фрагменты)

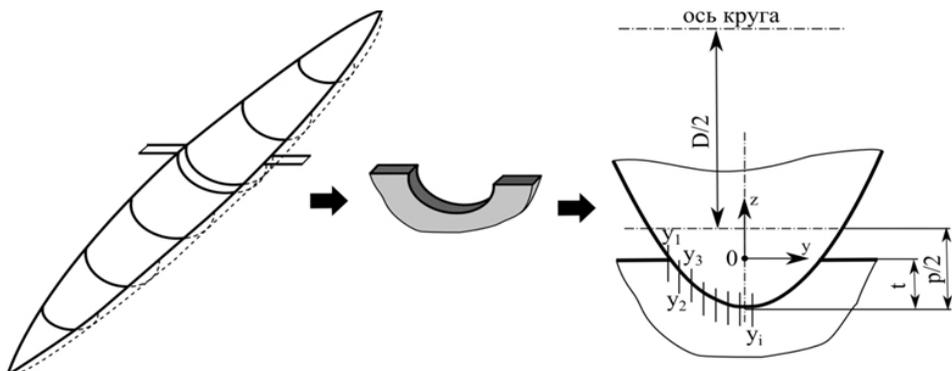


Схема к расчету профиля единичной риски

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТИПА НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ПРОВОДЯЩИЕ, УПРУГИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ

Руководитель проекта – доктор химических наук **Е.В. Барташевич**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка концепции, направленной на количественное описание, интерпретацию и прогноз таких физико-химических свойств молекулярных кристаллов, как проводимость и эластичность; формирование методологии многомасштабного моделирования структуры и свойств молекулярных кристаллов.

ПУБЛИКАЦИИ

5 научных статей

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

4 статьи в SCOPUS

1 статья в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Установление количественных закономерностей в изменениях свойств нековалентных взаимодействий разных типов и выявление их роли в формировании кристаллических структур с 1D организацией цепей, что является важнейшей структурной составляющей для формирования требуемых свойств, таких как проводимость и эластичность.
- ➔ Изучение влияния особенностей цепочечной организации в кристаллах гетероциклов на механизмы проводимости.
- ➔ Выявление влияния особенностей кристаллических упаковок и одномерных цепочечных мотивов на появление нелинейных оптических свойств.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- ➔ Проект направлен на разработку новой концепции использования перспективного субатомного уровня – уровня распределения электронной плотности – в количественном описании нековалентных взаимодействий и их роли в формировании структурной организации молекулярных кристаллов.
- ➔ Показана возможность использования исследуемых кристаллов: органических

полиiodидов с 1D организацией цепей, поддерживаемых водородными, галогенными, халькогенными связями, в качестве среды для переноса зарядов в ячейке Гретцеля.

- ➔ Для группы известных и новых соединений получен и проанализирован комплекс спектральных и проводящих свойств, определяющий возможность их применения в качестве сорбентов, катализаторов, твердофазных анизотропных проводящих элементов.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Разрабатываемые модели количественной взаимосвязи «структура кристалла – свойство» предназначаются для прогноза и априорной количественной оценки таких свойств, как проводимость и эластичность планируемых к синтезу кристаллических структур.

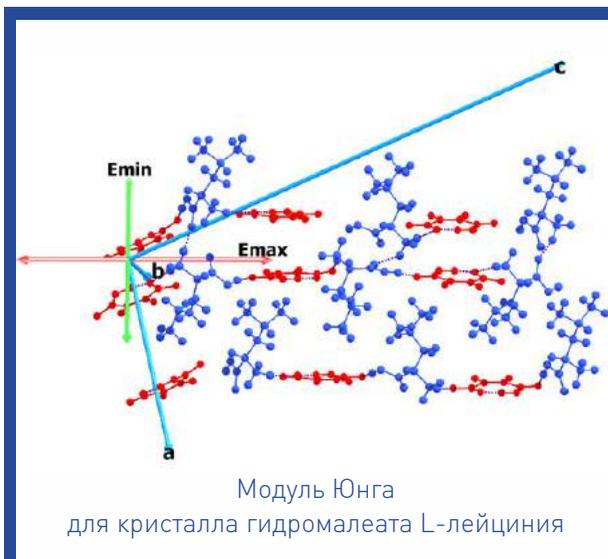
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- ☑ Показана взаимосвязь механических свойств кристаллов гидромалеатов аминокислот: L-изолейциния полуводно-го, L-лейциния и L-норвалиния/L-норвалина с особенностями их

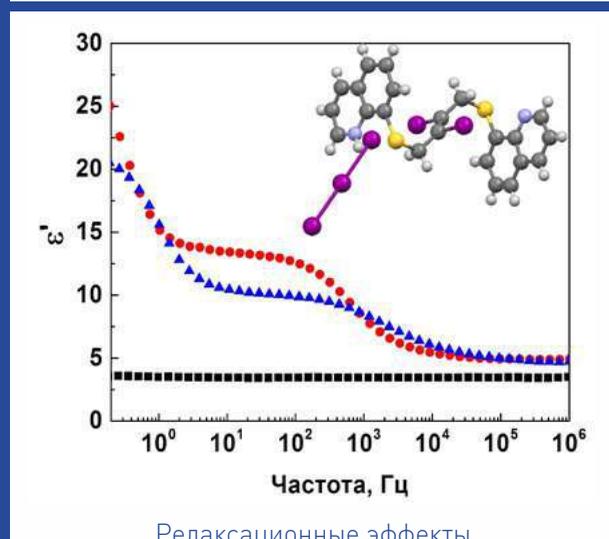
кристаллической структуры. Установлена ориентация направлений максимального и минимального сопротивления одноосному и гидростатическому сжатию, сопротивлению напряжению сдвига, а также анизотропия этих показателей.

- ☑ Величины минимальных и максимальных значений модуля Юнга определяются как силой (длиной) водородных связей, так и их расположением. Увеличенный разброс значений модуля Юнга для кристаллов гидромалеата L-лейциния вызван анизотропным, преимущественно в плоскости слоя, расположением большинства водородных связей. Более изотропная ориентация водородных связей в кристалле гидромалеата L-изолейциния отражается в росте минимального и снижении максимального значения модуля Юнга.
- ☑ Направления измерения минимальных значений модуля сдвига для исследованных кристаллов ориентированы вдоль молекулярных слоёв, сформированных водородными связями, при условии приложения напряжения сдвига ортогонально слоям. Максимальные значения модуля сдвига определены вдоль направлений, в которых ортогонально прилагаемое сдвиговое напряжение будет вызывать деформацию цепей и разрыв водородных связей.

- ☑ Все модули имеют наибольшую анизотропию для кристалла, проявляющего эластичность. Показано, что эластичные монокристаллы будут иметь отношение максимальной и минимальной величин трёх разных упругих модулей более пяти. То есть выявлена возможность прогнозирования эластичности молекулярных кристаллов расчётными методами, что полезно для поиска и прогноза кристаллических структур с заданными свойствами эластичности.
- ☑ Измерения спектров комплексной диэлектрической проницаемости и модуля образцов трийодида дийодобутенила-бис-тиохинолина и пентайодида тетраметиламмония в частотном диапазоне 0.1 Гц – 1 МГц показали, что данные материалы имеют два релаксационных механизма в области ультранизких частот (до 1 Гц) и в области средних частот (100 Гц – 1 кГц) при комнатной температуре. Поведение этих соединений, имеющих в составе полийодид-анионы различного состава и строения, существенно отличается от моноиодида хлорзамещенного оксазинохинолина, что позволяет связать наблюдаемые релаксационные явления с вкладом высокополяризуемых связей йода. Полученная диэлектрическая проницаемость моноиодида не зависит от приложенной частоты переменного тока и хорошо согласуется с расчетными данными.



Ячейка для проведения низкотемпературных измерений с помощью импедансной спектроскопии



Релаксационные эффекты в области ультранизких и средних частот при комнатной температуре

ИССЛЕДОВАНИЯ ДВИЖЕНИЙ УПРУГОГО ТРУБОПРОВОДА, ВЫЗВАННЫХ ТРАНСПОРТИРУЕМЫМ НЕОДНОРОДНЫМ ПОТОКОМ

Руководитель проекта – доктор технических наук В.П. Бескачко

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Оценка возможности и установление границ применимости расчетных подходов к моделированию поведения механической части трубопровода применением современных вычислительных средств прогнозирования взаимодействия деформируемого твердого тела и жидкости.

ПУБЛИКАЦИИ

1 научная
статья

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья
в SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Выполнение численных экспериментов и аналитических оценок для моделей системы «трубопровод-поток» для изучения влияния состава и режима двухфазного потока (в приближении гомогенной жидкости) на наблюдаемые параметры движения трубопровода
- ➔ Выполнение численных и аналитических расчетов движений системы «трубопровод - многофазный поток» за пределами приближения гомогенной среды: 1) потоки «жидкость-газ» при небольших объемах газа (индивидуальные пузырьки, ансамбли невзаимодействующих пузырьков), 2) потоки с обособленными жидкой и газовой фазой - в слоистом и снарядном режимах течения. Расчет усилий, оказываемых на стенку трубопровода существенно многофазным потоком.
- ➔ Разработка и апробация схемы решения обратной задачи динамики - восстановления параметров потока по наблюдаемым параметрам движения трубопровода. Выполнение натуральных экспериментов.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Связанная упруго-гидродинамическая модель расходомера, включающая в себя модель текущей двухфазной среды и позволяющая

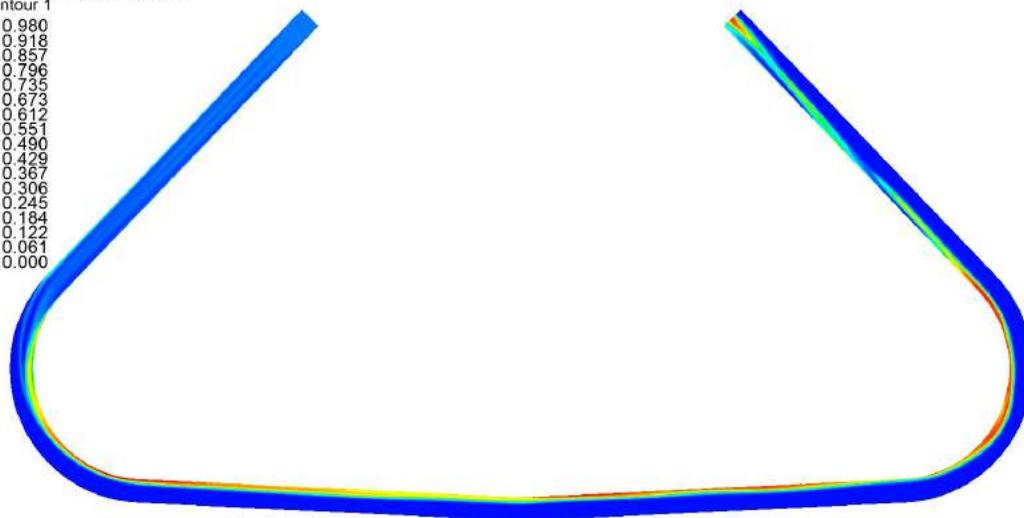
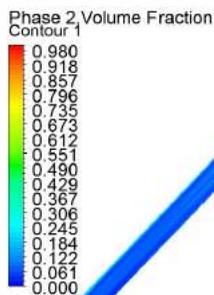
предсказывать ее отклик (разность фаз механических колебаний) при изменении параметров потока (давления, расхода, плотности, объемной доли газовой фазы).

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

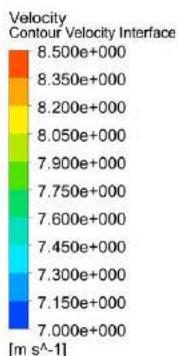
Появление новых методик и инструментов для совершенствования измерительной техники для определения расходов текучих сред, что позволит повысить конкурентоспособность отечественной продукции на рынках средств измерений.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

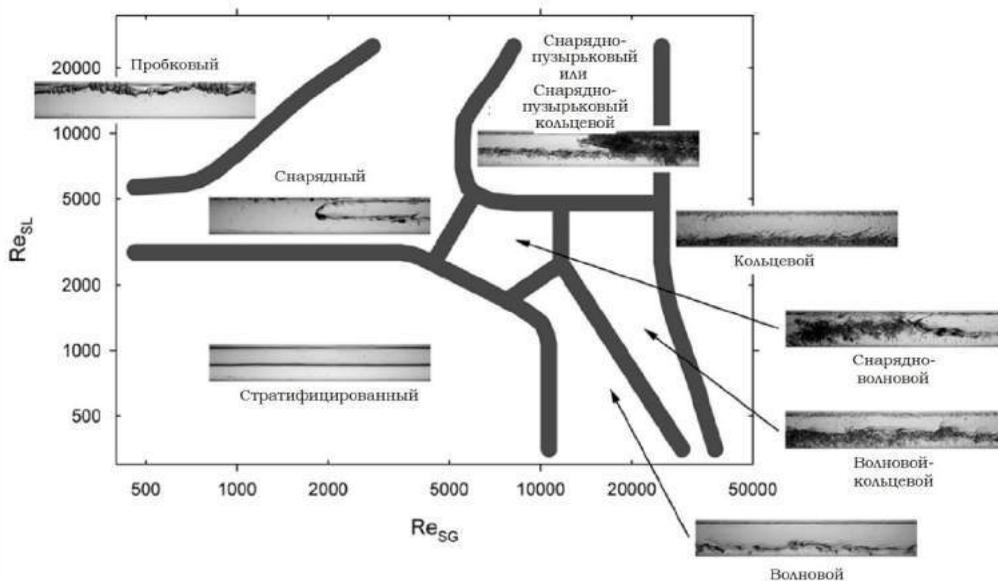
- Выполнен анализ литературных данных, касающихся построения компьютерных и аналитических моделей взаимодействия «поток-трубопровод», результатов экспериментальных исследований этих взаимодействий и методов их интерпретации.
- Выполнен обзор методов численного и аналитического решения граничных задач.
- Построены численные модели исследуемых систем: задана геометрия течения, выбраны параметры и условия потока.
- Выполнены предварительные численные эксперименты для упрощенных вариантов моделей с целью подбора параметров численной схемы, обеспечивающих точность и эффективность расчетов.



Распределение газовой фазы в потоке текущей двухфазной среды в криволинейном трубопроводе



Распределение скоростей в потоке текущей среды в различных сечениях трубопровода



Режимы течения в горизонтальных двухфазных потоках воздух-вода и их изображения

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА КОМПОЗИЦИОННЫХ МИНЕРАЛИЗАТОРОВ СОЛЕВЫХ РАСТВОРОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ И РАДИОНУКЛИДОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Работа направлена на исследование физико-химических закономерностей синтеза композиционного материала-минерализатора, обеспечивающего при взаимодействии с соевыми растворами тяжелых металлов образование общих структурных и фазовых составляющих в пределах материала матрицы. Проект позволит создать принципиально новые материалы и экологические технологии реабилитации водоемов и почв, загрязненных техногенными отходами.

Руководитель проекта – кандидат технических наук **Д.А. Винник**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Исследование физико-химических процессов синтеза композиционных минерализаторов солевых растворов тяжелых металлов и радионуклидов для создания новых экологических технологий.

ПУБЛИКАЦИИ

4 научные статьи

2 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в Scopus

1 статья в Web of Science

4 статьи в РИНЦ

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Результатом проекта будет являться синтез материалов-минерализаторов, исследование физико-химических процессов, обратных процессам выщелачивания, т.е. перевода катионов тяжелых металлов и радионуклидов, а также серо-, хлорсодержащих анионов в водонерастворимое состояние с последующей минерализацией. Такими свойствами обладают системы на основе смешанных оксидов кальция, кремния и алюминия, способные образовывать твердые растворы замещения при взаимодействии с соевыми растворами тяжелых металлов.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Техногенез в существующих масштабах разомкнул естественные природные циклические процессы. С последствиями техногенеза природа не в состоянии справиться, пределы саморегуляции биосферы исчерпаны. Существующие методы реабилитации водных объектов, почв, территорий в целом не решают

глобальных проблем, а служат способами переноса загрязнений с одного объекта на другие (обратимая сорбция, усваивание растениями, почвенными бактериями и др.). Современные природоохранные технологии ориентированы на использование природных и синтезированных материалов. Природные алюмосиликаты (глинистые минералы и цеолиты и др.) широко используются в технологических процессах и при ликвидации загрязнений на небольших ограниченных территориях, так как обладают низкой сорбционной ёмкостью. Практическое использование сорбентов связано с решением технологических проблем по их «зарядке» обменными катионами, своевременной замене при достижении максимальной обменной ёмкости и последующей утилизации.

Полученные результаты исследований будут являться основой для разработки новых технологий, позволяющих замкнуть цикл получения отходов-загрязнителей при производстве, и их иммобилизации композиционными минерализаторами по аналогии с природными процессами. Результаты проекта могут быть использованы предприятиями малого и среднего бизнеса для производства нового вида материалов. Так как техногенные загрязнения на территории России практически не подвергаются переработке и утилизации или эти процессы требуют больших затрат, использование нового материала-минерализатора будет востребовано в течение длительного времени.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

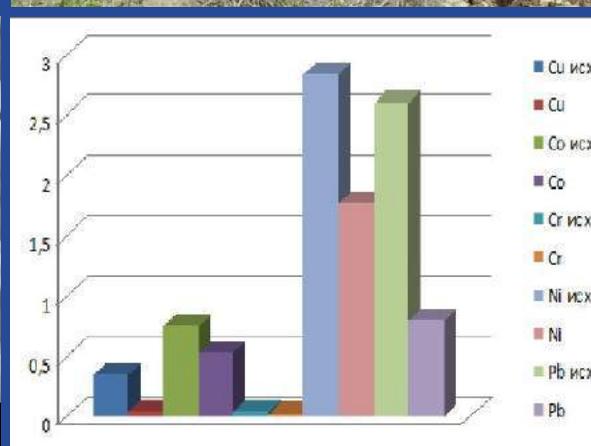
- ☑ Исследованы процессы взаимодействия и фазообразования в системах смешанных оксидов $MgO-CaO-Al_2O_3-SiO_2$, модифицированных металло-органическим модификатором.
- ☑ Исследована способность твердых растворов мелилита, окерманита и геленита к взаимодействию с солевыми растворами тяжелых металлов с образованием водонерастворимых соединений.
- ☑ Проведен анализ химических и фазового состава перспективных материалов для получения композиционного минерализатора, оптимизирован их фазовый состав. Наиболее перспективным является использование отходов комбината «Магнезит» со структурообразующим металлоорганическим модификатором.
- ☑ Исследован процесс формирования необходимых структурных и фазовых составляющих в процессе термообработки. Установлено, что термообработка исходных материалов должна проводиться в интервале температур 850–900 °С, который гарантирует получение геленита в качестве основной фазовой составляющей.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

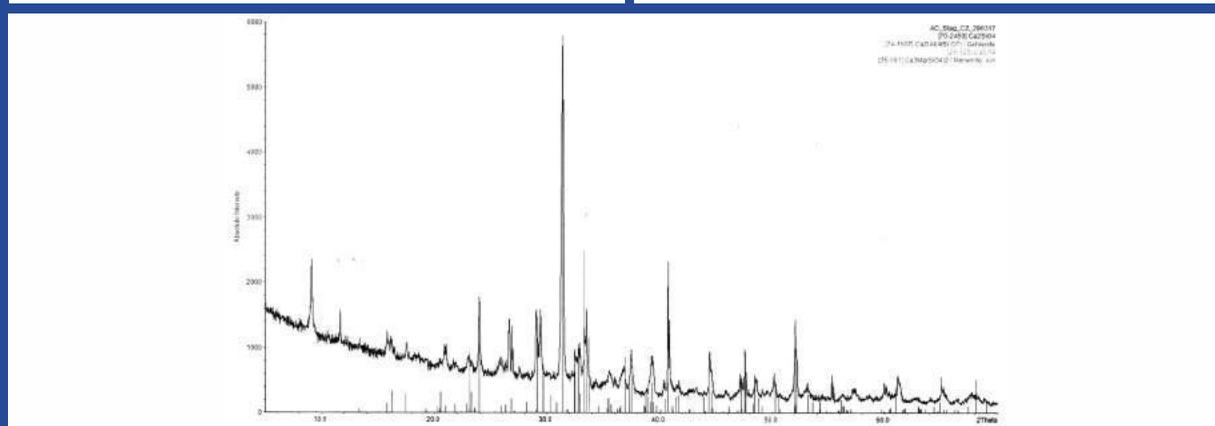
- ЗАО «Русская медная компания»;
- Группа «Магнезит».



Фрагменты новообразований тяжелых металлов на поверхности перспективных материалов-минерализаторов



Результаты анализа техногенных солевых растворов до и после взаимодействия с перспективным материалом-минерализатором



Дифрактограмма сырьевого материала, содержащего геленит

ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИЕ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ ДЛЯ ОБЪЕКТОВ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА (НА ПРИМЕРАХ ОБЪЕКТОВ РОСНЕФТЬ-БУРЕНИЕ, БКЕ, СГК-БУРЕНИЕ)

Руководитель проекта – доктор технических наук М.А. Григорьев

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Проект направлен на разработку энерго- и ресурсосберегающих надёжных электротехнических комплексов для объектов нефтегазового сектора.

ПУБЛИКАЦИИ

13 научных статей

20 свидетельств на программы ЭВМ

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

13 статей в Scopus

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Разработка вариантов схем силовых цепей многоуровневых полупроводниковых преобразователей на низкие уровни напряжения.
- Создание математических моделей многоуровневых полупроводниковых преобразователей.
- Разработка алгоритмов управления силовыми ключами.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Комплексные методы проектирования и производства объектов буровых установок, отличающиеся улучшенными массогабаритными показателями.

Сопоставление результатов с разработками мирового уровня. Ближайшие аналоги: многоуровневые полупроводниковые преобразователи частоты производства ведущих электротехнических фирм ABB, Siemens многоуровневого исполнения напряжением 3–6 кВ. Предлагаемые в проекте полупроводниковые преобразователи отличаются улучшенными энергетическими показателями на [1–3] %.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Технические решения могут использоваться при производстве регулируемых электроприводов переменного тока объектов буровых установок.

Возможные потребители технических результатов: инженеринговые компании, занимающиеся разработкой электрооборудования и систем автоматики для объектов буровых установок.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

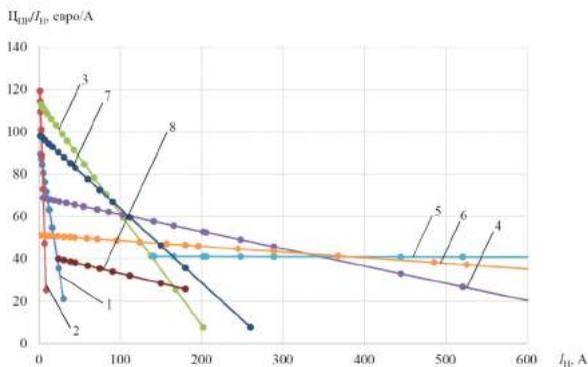
- Разработаны схемы силовых цепей многоуровневых преобразователей частоты.
- Предложено математическое описание объектов буровых установок.
- Опубликовано 13 статей в изданиях Scopus.
- Получено 20 свидетельств на программы для ЭВМ. Показано, что:
 - удельные показатели полупроводниковых преобразователей могут быть улучшены на [1–3] % за счет

отказа от рекомендуемых схем в пользу многоуровневых схем уровня напряжения 0,4 кВ;
 – поскольку число степеней свободы проектирования многомерной системы управления полупроводниковых преобразователей увеличено, оказывается целесообразным отказаться от стратегии векторного управления ШИМ в пользу системы управления, аналогичной скалярной с элементами релейно-векторного управления;

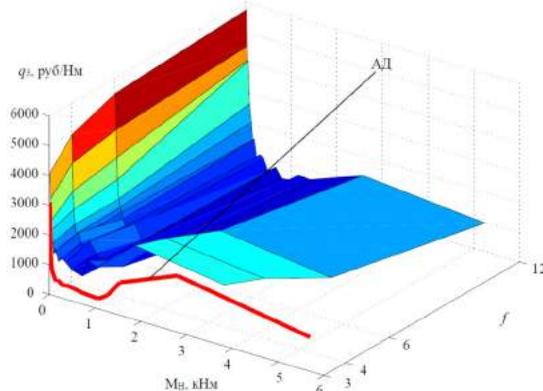
– переход к законам модального управления позволяет снизить амплитуду резонансного максимума в структурах многоконтурного управления полупроводниковым преобразователем.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

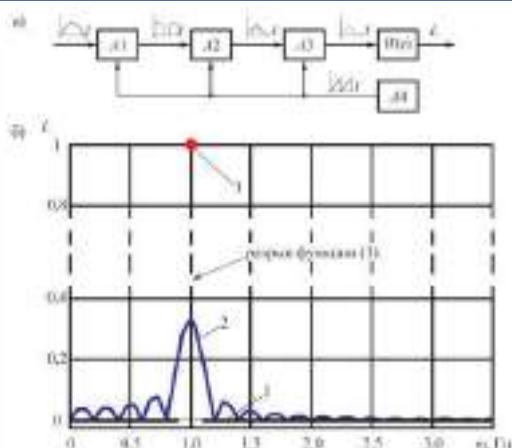
➔ ООО «Энергочел» (Челябинск).



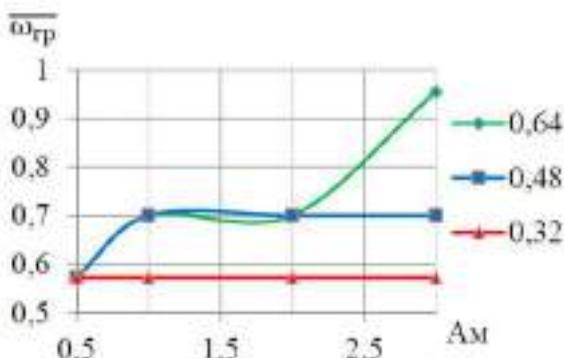
Сопоставление ценовых показателей полупроводниковых преобразователей различных фирм-производителей



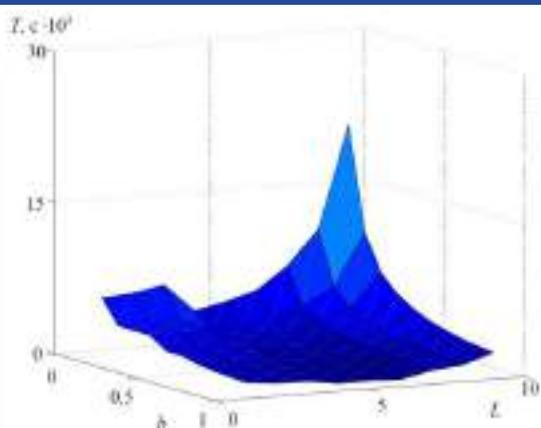
Удельные ценовые показатели многоуровневых преобразователей частоты



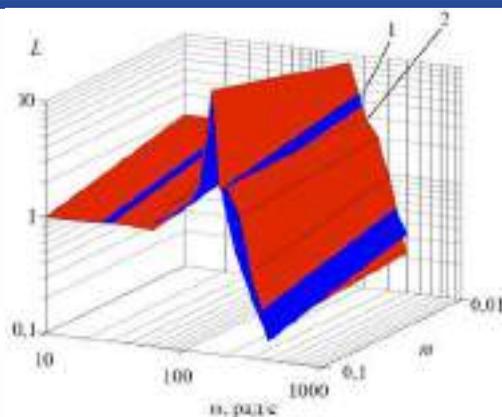
Принцип восстановления сигнала по его отсчетам:
 а) функциональная схема измерения;
 б) примеры частотных характеристик сигналов синусоидальной формы без ограничения во времени (1) и с ограничением во времени пятью периодами (2)



Зависимость граничной частоты от амплитуды резонансного максимума



Зависимость времени разбиения от числа процессоров L, генерирующих сетку, и коэффициента b, равного отношению ускорения S к числу процессоров L



Частотные характеристики системы, в которой линейризованная часть электропривода представлена звеном третьего порядка: 1 – для непрерывной системы; 2 – для импульсной системы

РАЗВИТИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ПРОТИВОТУБЕРКУЛЕЗНЫХ СРЕДСТВ С БИОМИШЕНЯМИ

Руководитель проекта – доктор химических наук М.А. Гришина

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Построение количественных закономерностей между величиной противотуберкулезной активности и параметрами электронного строения комплексов противотуберкулезных соединений с биомшенью, например дигидрофолатредуктазой.

ПУБЛИКАЦИИ

2 научные статьи

2 научных доклада

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Любое биологическое действие соединений включает в себя взаимодействие как минимум с одной биологической мишенью. Поэтому величина биологической активности во многом определяется способностью лекарственного средства или его метаболита (продукта реакции метаболизма) взаимодействовать с биомишенями. Взаимодействия молекул во многом определяются электронной структурой. В связи с этим целью настоящего проекта является построение количественных закономерностей между величиной противотуберкулезной активности и параметрами электронного строения комплексов противотуберкулезных соединений с биомшенью, например дигидрофолатредуктазой. С одной стороны, данное исследование имеет фундаментальное значение - выявление механизмов действия противотуберкулезных соединений на молекулярном уровне, с другой стороны – важное прикладное значение, а именно, использование количественных закономерностей для дизайна новых противотуберкулезных средств на более высоком прогностическом уровне по сравнению с существующими в мире подходами. В проекте будет использован квантово-химический подход AlteQ для расчета, различных электронных характеристик связывания соединений с биомишенями, среди которых интегральные характеристики

перекрывания электронных облаков взаимодействующих частиц, характеристики критических точек электронной плотности в зонах связывания, поверхностные электронные характеристики (характеристики сеператрис) и т.д. В проекте предполагается выделить аминокислотные остатки энзимов (биомишеней), их фрагменты, связывание с которыми определяет величину противотуберкулезной активности.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

➔ Для анализа противотуберкулезной активности будут получены модельные комплексы «рецептор-лаганд», т.е. комплексы противотуберкулезных средств с биомишенями. В Protein Data Bank будут найдены данные рентгеноструктурного анализа (РСА) биомишеней противотуберкулезных средств. Для моделирования комплексов «рецептор-лиганд» предполагается использовать уникальную методологию Restricted Docking, основанную на рассмотрении всего комплекса ван-дер-ваальсовых, специфических и электростатических взаимодействий, оценки водородных связей. Ранее данный подход показал хорошее качество моделирования комплексов «рецептор-лиганд», что было показано при сопоставлении расчетных структур с экспериментально определенными структурами.

- Для моделирования электронной структуры будет усовершенствован квантово-химический алгоритм AlteQ, который по сравнению с мировыми аналогами исключает процедуру самосогласования, использует новые высокоскоростные программные подходы к интегрированию и дифференцированию функций электронной плотности, при этом с более высокой точностью описывает электронную плотность в соединениях, что было показано на множестве примеров сопоставления карт расчетной электронной плотности с картами, полученными с помощью прецизионного PCA. Будет проведен расчет интегральных объемных и поверхностных характеристик перекрываний электронных облаков в комплексах, определены интегралы парных перекрываний, перекрываний более высоких порядков, количество электронов сепаратрис и т.д.
- Будет реализован топологический анализ электронной плотности в программе AlteQ, будут оценены дифференциальные характеристики электронной плотности, ее лапласиана в критических точках разных типов (3,-3), (3,-1), (3,+1), (3,+3). Будет проведен расчет данных характеристик для комплексов противотуберкулезных средств с биомишенями с качеством не ниже 0.90 по технике «скользящий контроль».
- Будут выделены наиболее важные фрагменты электронной структуры, оценена эффективность взаимодействия лигандов с аминокислотными остатками энзимов.
- Будет осуществлен дизайн новых противотуберкулезных средств с высокой активностью и низкой токсичностью. Полученные структуры будут рекомендованы к биологическим испытаниям,
- Будут отправлены заявки на государственную регистрацию программного обеспечения.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты проекта будут использованы для прогноза противотуберкулезной активности и дизайна новых высокоэффективных и низкотоксичных противотуберкулезных кандидатов в лекарственные средства. Данные структуры в дальнейшем могут быть синтезированы и переданы на биологические испытания.

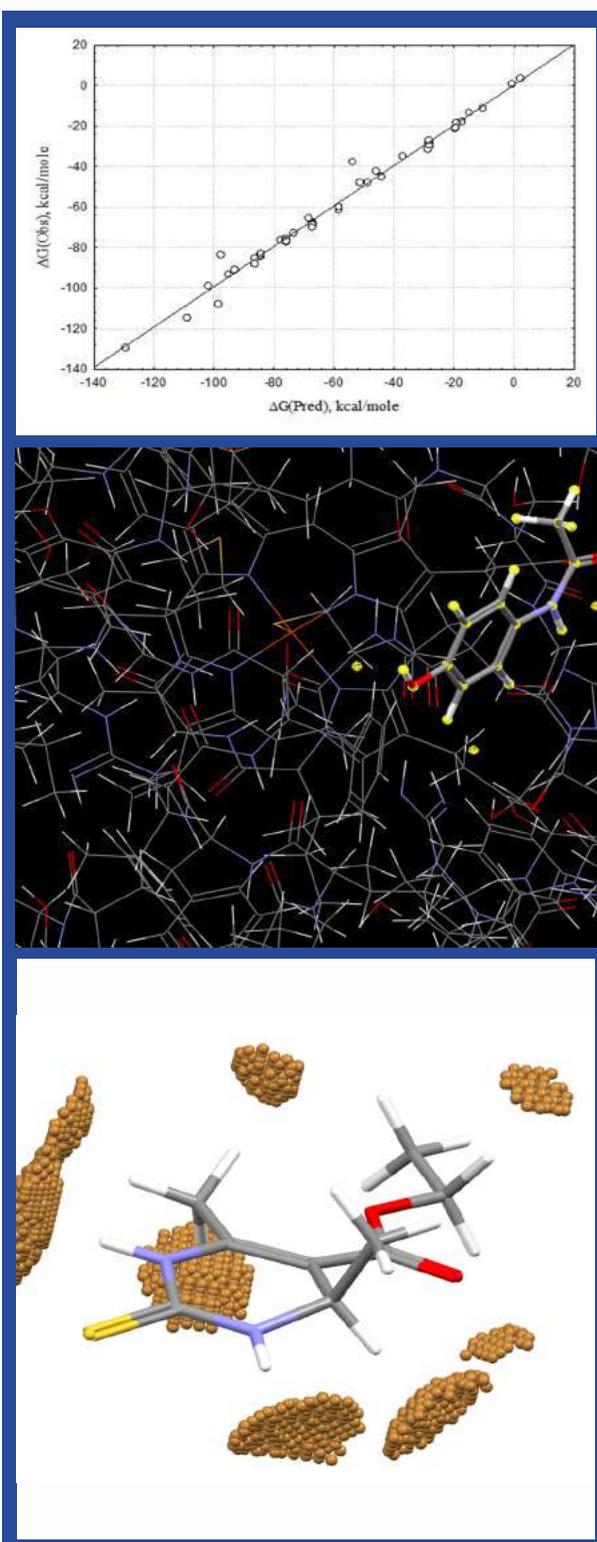
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Для анализа противотуберкулезной активности получены модельные комплексы «рецептор-лаганд», т.е. комплексы противотуберкулезных средств с биомишенями с использованием метода Restricted Docking. Для моделирования электронной структуры усовершенствован квантово-химический алгоритм AlteQ, который по сравнению с мировыми аналогами исключает процедуру самосогласования, использует новые высокоскоростные программные подходы к интегрированию и дифференцированию функций электронной плотности, при этом с более высокой

точностью описывает электронную плотность в соединениях, что было показано на множестве примеров сопоставления карт расчетной электронной плотности с картами, полученными с помощью прецизионного PCA. Проведен расчет интегральных объемных и поверхностных характеристик перекрываний электронных облаков в комплексах, определены интегралы парных перекрываний, перекрываний более высоких порядков, количество электронов сепаратрис и т.д.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- University of Information Technologies, Mechanics and Optics (I);
- N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences (Москва).



ПОГРАНИЧЬЕ КУЛЬТУРНЫХ МИРОВ (ЮЖНЫЙ УРАЛ ОТ ДРЕВНОСТИ ДО НОВОГО ВРЕМЕНИ)

Руководитель проекта – доктор исторических наук А.В. Епимахов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Построение описательных моделей процесса взаимодействия групп населения с принципиально разными социокультурными системами; обоснование тезиса о пограничье как самостоятельной зоне, определяющей вектор развития территорий в долгосрочной ретроспективе.

ПУБЛИКАЦИИ

10 научных статей

9 научных докладов

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья в SCOPUS

4 статьи в Web of Science

5 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Проанализировать историографический ландшафт изучения пограничных сообществ в евразийском регионе; выделить нерешенные и актуальные вопросы.
- ➔ Разработать методологические основы и методику компаративного, мультидисциплинарного исследования межкультурных взаимодействий в пограничье.
- ➔ Пополнить базу источников по проблемам пограничья культурных миров за счет новых материалов полевых археологических исследований и архивных изысканий по территории Южного Урала.
- ➔ Обосновать перечень устойчивых социальных структур приграничных сообществ, обеспечивающих их успешную адаптацию к новым условиям природной и социальной среды.
- ➔ Выявить ключевые факторы, определяющие характер и результаты взаимодействия в условиях пограничья.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Получение высококачественных исторических, археологических и этнографических материалов. Создание банка архивных данных по тематике взаимодействия населения пограничья. Разработка методологии компаративного, мультидисциплинарного исследования. Создание описательных моделей взаимодействия культурных миров для традиционных и современных обществ. Выделение и обоснование перечня

устойчивых социальных структур приграничных сообществ – основы успешной адаптации к изменяющимся условиям природной и социальной среды.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Процессы в приграничных зонах являются одним из важнейших факторов, влияющих на различные аспекты жизни современных государств. Недостаточность знаний об алгоритмах, определявших характер процессов взаимодействия в пограничье культурных миров в прошлом, осложняет формирование правильной культурной, национальной, социальной политики, не учитывающей реалии, уходящие корнями в предшествующие эпохи. Результаты проекта заполняют эти пробелы и позволят включать в экспертные заключения научно значимые выводы об устойчивых процессах, характерных для приграничных сообществ, о культурно-исторических особенностях пограничья, игнорирование которых приводит к ошибкам в регулировании миграций и правовом обеспечении адаптации мигрантов. Сформированные в результате проекта модели приграничных сообществ могут служить теоретической основой для дальнейших научных разработок.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

В отчетный период получены качественно новые археологические и архивные

материалы – основа аналитических исследований по всем периодам. Пополнен банк данных палеогенетических и радиоуглеродных анализов для памятников бронзового века. Предложена и апробирована модель фронта для объяснения фактов, связанных с историей возникновения и функционирования яркого археологического феномена синташтинских древностей начала II тыс. до н.э.

Изучение детских и женских погребений эпохи бронзы контактной зоны (между европейской и азиатской частями Южного Урала) показало смешение культурных стереотипов. Женские гендерные стереотипы оказались намного устойчивее в условиях движения населения, мужские демонстрируют большую вариативность. Детские погребения контактной зоны устраивались в соответствии со срубной традицией (западная часть ареала), а женские – в соответствии с алакульской (восточная). Констатируется постепенное размывание алакульских гендерных стереотипов в пользу срубных. Таким образом, проживание в пограничье культурных миров непосредственно влияло на формирование гендерных стереотипов в древних обществах.

Проанализированы взаимоотношения населения зауральской лесостепи и кочевников урало-казахстанских степей в I тыс. до н.э., этапы их взаимодействия. Проведенные исследования позволили сформулировать две основные модели взаимоотношений культурных миров в Южном Зауралье в раннем железном веке – «гороховская» и «киткульская». По теме проекта проведена всероссийская (с международным участием) научная конференция «Этнические взаимодействия на Южном Урале. Сарматы и их окружение».

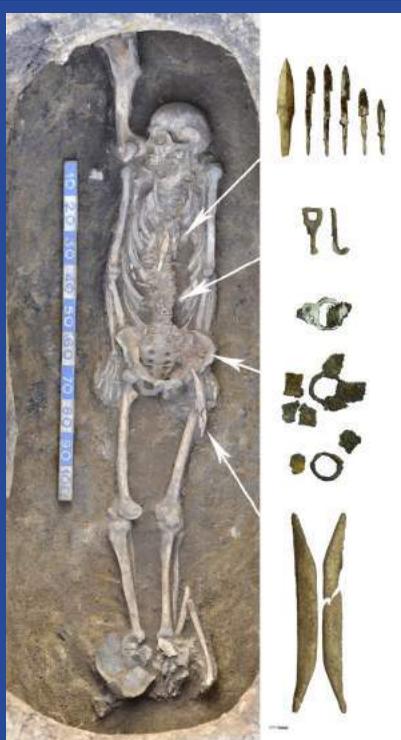
По результатам дешифрования космоснимков и обобщения архивных материалов создана карта курганов с «усами» V-VII вв. Ее анализ показал, что летние кочевья в Южном Зауралье располагались в верховьях рек и на вершинах Зауральского пенеплена (Урало-Тобольский водораздел). Аналогичное геоморфологическое расположение характерно для других частей

ареала: Тургай, Кокшетау, Восточная Сары-Арка и Восточный Казахстан. На юге Тюменской области открыт памятник VII-VIII вв., сочетающий черты лесостепных культур Западной Сибири и кочевого населения степей Южного Зауралья и Казахстана. Среди находок многочисленные детали поясов геральдического стиля, предметы конского снаряжения, орудия труда, инструменты металлообработки и ювелирного производства. В ходе исследования могильника Уелги обнаружено захоронение воина-лучника, сопровождаемого сложным луком, колчаном со стрелами и стрелковым поясом. Этот инвентарь наиболее ранний в составе памятника (VII-VIII вв.), тогда как сам могильник датируется IX-XI вв.

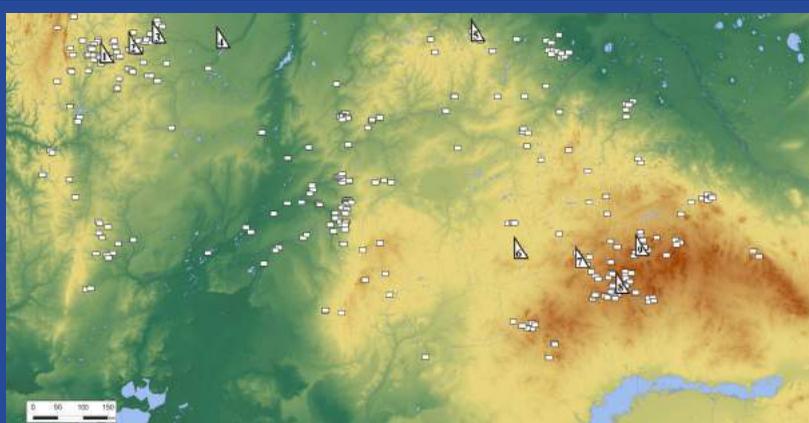
Выявлены новые материалы по истории формирования юго-восточного пограничья Российской империи в XVIII в., в частности, карта Исетской пограничной линии 1742 г. Получены материалы, подтверждающие существование в XVI-XVII вв. единого культурно-хозяйственного тюркского пространства в Зауралье и Западной Сибири. Анализ политики слободского расселения в Тюменском и Туринском уездах XVII в. показал, что слободы и остроги ставились по наказным памятникам из Тобольска и Верхотурья, видимо, с целью обойти вотчинные права местного ясачного населения. Изучение социальной группы «захребетных» татар позволило коренным образом пересмотреть их статус. Группа состояла не из бесправных людей, а была привилегированной. Ее члены выполняли функции «кадрового резерва» служивых татар, имели собственные угодья и были освобождены от уплаты податей.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Институт истории и археологии УрО РАН
- Институт минералогии УрО РАН
- Государственный исторический музей Южного Урала
- Университет Гете (Франкфурт-на-Майне)
- Университет Питтсбурга
- Гарвардская медицинская школа



Могильник Уелги.
Погребение лучника (VII-VIII вв.)



Карта распространения курганов с «усами» (V-VII вв.)



Городище «Соляной брод» раннего железного века.
Каслинский район

МЕТОДИКА РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ НАРУШЕНИЙ ПАТТЕРНА ХОДЬБЫ И БЕГА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕРМОГРАФИЧЕСКИХ И БИОМЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЛОКОМОЦИЙ ЧЕЛОВЕКА

Руководитель проекта – кандидат биологических наук **В.В. Епишев**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Создание фундаментальных основ для изучения состояния человека при помощи оценки температуры кожных покровов

ПУБЛИКАЦИИ

3 научные статьи

3 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья в SCOPUS

1 статья в Web of Science

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Составление «температурной карты человека».
- ➔ Определение взаимосвязей между температурой в различных частях тела и заболеваниями опорно-двигательного аппарата.
- ➔ Разработка методики бесконтактной диагностики заболеваний крупных суставов.
- ➔ Определение взаимосвязей между биомеханикой движения человека и температурой кожи в области крупных мышечных групп.
- ➔ Разработка принципов измерения компонентного состава тела (жировая, мышечная ткань) при помощи измерения.
- ➔ Изучение возможностей дозирования физической нагрузки при помощи изучения температуры тела.
- ➔ Создание технического задания на разработку диагностирующих устройств для бесконтактной диагностики заболеваний опорно-двигательного аппарата, измерения компонентного состава тела.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Полученные взаимосвязи между температурой отдельных участков тела как интегрального параметра состояния человека позволит значительно повысить возможности и снизить стоимость диагностики заболеваний опорно-двигательного аппарата. Кроме

того, контроль за содержанием жировой ткани в организме, дозирование физических нагрузок можно будет осуществлять при помощи измерения температуры, что значительно упростит мониторинг состояния человека.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

В результате реализации проекта будут определены фундаментальные принципы бесконтактной термометрии для экспресс-диагностики состояния крупных суставов, для измерения количества жировой, мышечной ткани в организме, а также методики дозирования и контроля за физическими нагрузками. Будет создано техническое задание для разработки технических средств диагностики и контроля состояния человека, что позволит коммерциализировать результаты исследования.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Целью данного этапа исследований являлось изучение взаимосвязей между температурой в различных частях тела и компонентным составом тела, а также изучение температурных реакций на дозированную физическую нагрузку (Schiller Cardiovit AT-104 PC Ergo-Spiro). В исследовании приняли участие 69 здоровых девушек-студентов 2-4 курса обучения (18-20 лет). Проводилось измерение состава тела на анализаторе

«Tanita BC-418» с вычислением массы и процента жировой ткани и термография с помощью бесконтактного тепловизора Baltech-TR-01500. На каждого испытуемого делали 8 фотофиксаций термограмм: нижняя часть тела вид сзади, верхняя часть тела вид сзади, нижняя часть тела вид спереди, верхняя часть тела вид спереди, нижняя часть тела вид слева, верхняя часть тела вид слева, нижняя часть тела вид справа, верхняя часть тела вид справа.

Полученные термограммы обрабатывались с помощью специализированной программы Baltech Expert, в которой для количественного анализа на каждой термограмме выделяли зоны на теле, в пределах которых с помощью программных средств автоматически определялась средняя температура с точностью до 0,1°C или 2 %.

В результате статистической обработки результатов (вариационный, корреляционный, регрессионный анализ) были уставлены следующие закономерности:

- индекс массы тела находится в отрицательной корреляционной взаимосвязи с температурой кожи в верхней и нижней части тела;
- снижение средней температура тела ниже 32 °C свидетельствует о признаках нарушения обмена веществ, что отражается ростом уровня жировой ткани;
- температура кожи в голени является индикатором содержания жировой ткани в организме: чем выше температура в голени, тем ниже уровень жировой ткани;
- реакция температуры кожи на дозированную физическую нагрузку является разнонаправленной: нагрузка 100–150 Вт вызывает ее снижение, а 150–300 Вт – увеличение, вплоть до достижения субмаксимальных величин (39,5 °C).

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- ➔ Дальневосточный федеральный университет



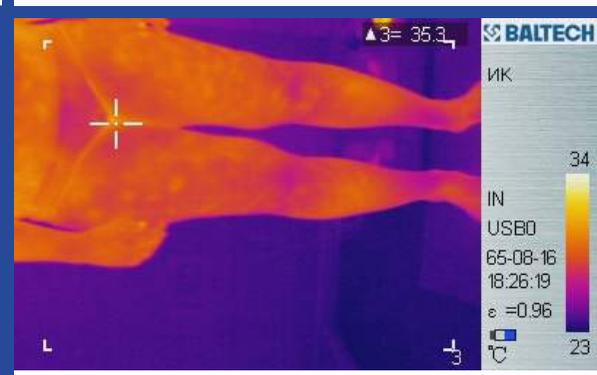
Фото тепловизора и дорожка



Термограмма, пример 3



Термограмма, пример 1



Термограмма, пример 4



Термограмма, пример 2



Термограмма, пример 5

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ ПРИ СИНТЕЗЕ И ДЛИТЕЛЬНОМ ХРАНЕНИИ БОРОСИЛИКАТНЫХ СТЕКЛОСОДЕРЖАЩИХ МАТРИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЗАХОРОНЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Руководитель проекта – доктор химических наук В.Е. Еремяшев

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Теоретическое и экспериментальное исследование процессов кристаллизации, протекающих в структуре многокомпонентных боросиликатных матричных материалов при их высокотемпературном синтезе и в процессе длительного хранения

ПУБЛИКАЦИИ

6 научных статей

4 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

5 статей в WoS/SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Проект посвящён развитию теоретических основ синтеза и исследованию стеклосодержащих матричных материалов для иммобилизации радиоактивных отходов. Высокая востребованность и актуальность исследований в данной области определяется необходимостью дальнейшего поиска способов безопасной переработки и хранения отходов ядерной энергетики.

Основная цель исследования – теоретическое и экспериментальное исследование процессов кристаллизации, протекающих в структуре многокомпонентных боросиликатных матричных материалов при их высокотемпературном синтезе и в процессе длительного хранения.

Недостаточная термическая и гидротермальная устойчивость существующих матричных материалов для захоронения радиоактивных отходов при длительном хранении, а также необходимость увеличения их ёмкости определяет необходимость продолжения поиска новых модификаций матриц для захоронения радиоактивных отходов.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Исследование базируется на представлении о том, что недостатки стеклосодержащих матричных материалов могут быть устранены на стадии синтеза с контролируемым увеличением

их раскристаллизованности за счет правильно подобранных добавок различных компонентов. Получаемые стеклокерамические материалы будут демонстрировать большую устойчивость при длительном хранении за счёт большей стабильности установившихся фазовых равновесий с участием кристаллических фаз. Полифазность полученного материала будет способствовать не только его стабильности, но и большей его ёмкости по отношению к различным радиоактивным изотопам, поскольку среди различных кристаллических фаз в материалах будут присутствовать содержащие в своей кристаллической структуре радиоактивные изотопы.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Значимость полученных результатов определяется важностью исследования материалов, применяемых при иммобилизации радиоактивных отходов, для решения проблем технологий атомной энергетики в части безопасного обращения с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом.

По результатам проекта будут сформированы положения, определяющие характер протекающих процессов и рекомендации по совершенствованию составов и условий использования данного вида стеклокерамических материалов для иммобилизации радиоактивных отходов.

Основным научным результатом проводимых исследований является возможность определения

рациональных подходов к созданию технических решений, направленных на повышение качества и безопасности переработки радиоактивных отходов, что в свою очередь будет способствовать улучшению экологической обстановки в регионах и на предприятиях, задействованных в глубокой переработке и утилизации радиоактивных и токсичных отходов.

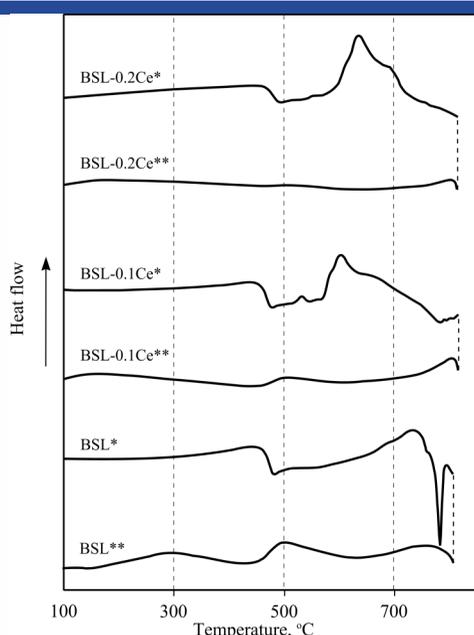
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ ЗА 2017 г.

Выполнен синтез нескольких серий образцов стеклосодержащих боросиликатных матричных материалов широкого спектра составов, включающих элементы – имитаторы радиоактивных изотопов. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии выполнено исследование влияния добавок оксидов цезия, рубидия, кальция, бария,

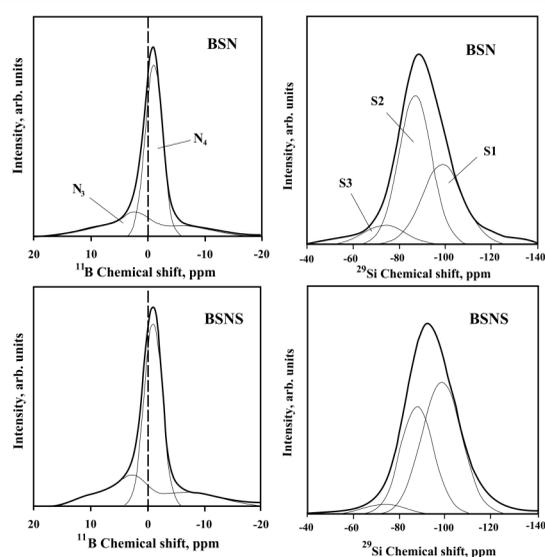
стронция, цинка, молибдена и церия на термические свойства щелочных боросиликатных стекол. Данные термического исследования сопоставлены с результатами структурных исследований этих стекол методами РСА, РФА, КРС, ЯГР, ИК и ЯМР, установлены факторы, определяющие наблюдаемое изменение термических свойств, фазового состава и кристаллизационной способности синтезированных матричных материалов. Выполнено экспериментальное и термодинамическое моделирование фазовых равновесий, реализующихся в исследуемых системах в условиях, характерных для выплавки, термообработки и эксплуатации данного вида матричных материалов.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

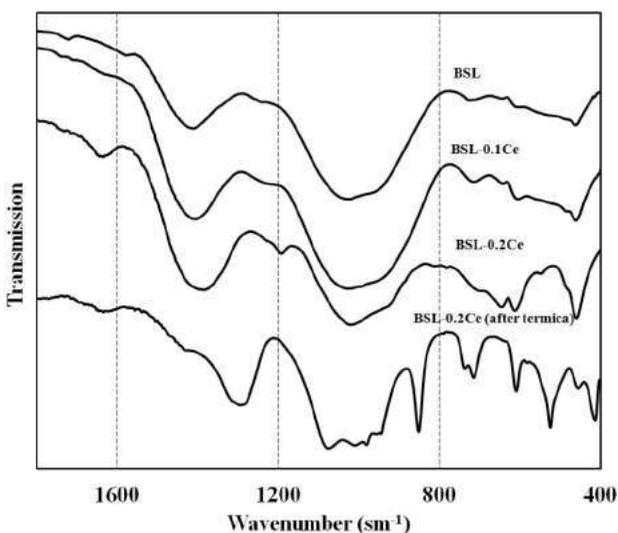
- Институт минералогии УрО РАН.
- Санкт-Петербургский государственный университет.
- Университет Регенсбурга (Германия).
- Тренчанский университет А. Дубчика (Словакия).



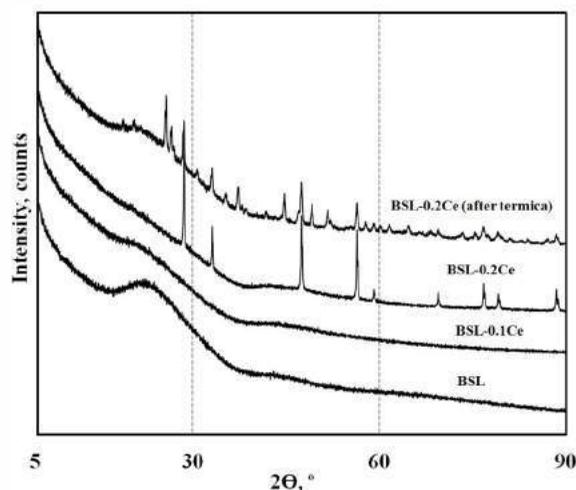
Термограммы образцов, полученные методом ДСК



¹¹B и ²⁹Si ЯМР спектры изученных боросиликатных стекол



ИК-спектры синтезируемых образцов



Рентгенограммы образцов до и после термообработки

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ С УЗЛОВЫМ АТОМОМ АЗОТА

Руководитель проекта – доктор химических наук Д.Г. Ким

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Поиск и разработка эффективных подходов к синтезу новых конденсированных гетероциклических соединений, обладающих высокой биологической активностью, на основе доступных многофункциональных прекурсоров ряда азолов и азинов.

ПУБЛИКАЦИИ

5 научных статей

1 защищена кандидатская диссертация

10 научных докладов

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

3 статьи в SCOPUS/WoS

2 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Исследование ранее не изученных N-, O-, S-алкенильных и пропаргильных производных азолов и азинов в реакциях гетероциклизации с галогенами, галогенводородными кислотами и другими электрофильными реагентами с целью синтеза новых потенциальных биологически активных конденсированных гетероциклических соединений.
- Изучение механизмов гетероциклизации указанных объектов исследования, поскольку известные механизмы не объясняют всего многообразия соединений.
- Идентификация и доказательство структуры синтезированных гетероциклических соединений комплексом физико-химических методов анализа (ГХ-МС, ИК, ЯМР ¹H и ¹³C спектроскопия, РСА).
- Исследование противогрибковой, антивирусной и антибактериальной активности синтезированных соединений, включая ее сравнительную оценку с активностью известных аналогов.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Широкий ряд новых гетероциклических соединений, обладающих потенциальной биологической активностью и являющихся ценными объектами для дальнейшего тонкого органического

синтеза. Результаты биоскрининга выборки синтезированных соединений.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Фундаментальные исследования, выполненные в рамках настоящего проекта, в частности разработанные методы и подходы, могут быть применены к более широкому кругу гетероциклических соединений. В результате последующее развитие проекта в данном направлении позволит получить новые соединения, перспективные в плане их дальнейшего синтетического и практического применения.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Разработаны методы синтеза ранее не изученных N-, O-, S-непредельных производных азолов [2-меркаптобензимидазола, 1,3,4-оксадиазол-2-тиона) и азинов [2-меркапто-4(3H)-пиримидинона, 2-меркапто-6-аминопиримидин-4(3H)-она, 2-пиридона, 5-нитро-2-пиридона и 3-циано-4,6-диметил-2-пиридона).

Изучены реакции гетероциклизации 2-пропаргилтио-5-R-бензимидазолов, 2-аллилсульфанил- и 2-пропаргилсульфанил-6-

аминопиримидин-4(3Н)-онов, алкенильных производных 2-пиридола, 5-нитро-2-пиридола и 3-циано-4,6-диметил-2-пиридола, 2-аллилсульфанил-1,3,4-оксадиазола под действием галогенов (иода и брома), а 2-алкенилсульфанил-6-метил-5-этил-4(3Н)-пиримидинонов – под действием соляной кислоты.

Установлено, что строение полученных конденсированных гетероциклических систем определяется структурой исходного гетероцикла и условиями реакции (соотношение исходных реагентов, растворитель, температура, длительность реакции).

Впервые осуществлено алкилирование 5-фенил(5,6-дифенил)-1,2,4-триазин-3-тионов пропаргилбромидом, при этом синтезированы неизвестные ранее 3-пропаргилсульфанил-5-фенил(5,6-дифенил)-1,2,4-триазины.

3-Пропаргилсульфанил-5,6-дифенил-1,2,4-триазин был также получен методом одnoreакторного синтеза.

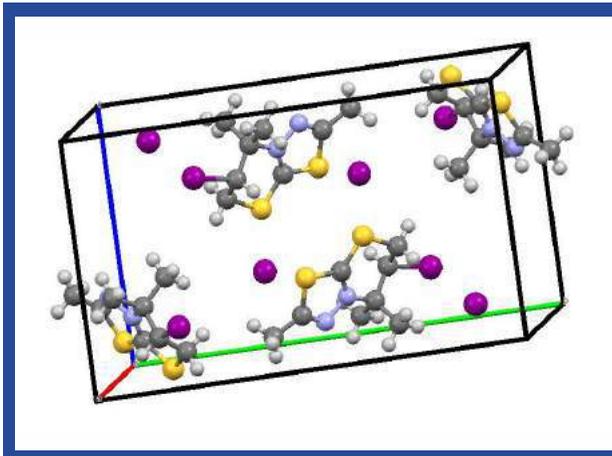
Найдено, что при гетероциклизации 3-пропаргилсульфанил-5-фенил(5,6-дифенил)-1,2,4-триазинов под действием йода и 3-пропаргилсульфанил-5,6-дифенил-1,2,4-триазина под действием брома происходит аннелирование тиазольного цикла. Взаимодействие 3-пропаргилсульфанил-5-фенил-1,2,4-триазина с бромом в хлороформе не останавливается на стадии образования продукта гетероциклизации с экзоциклической двойной связью, а идет дальше через стадии электрофильного присоединения брома и элиминирования бромоводорода с образованием бромида 3-дибромметил-7-фенил[1,3]тиазоло[3,2-b][1,2,4]триазиния. Следует отметить, что данная цепь превращений является примером неизвестной ранее домино-(каскадной) реакции.

Идентифицированы и доказаны структуры всех синтезированных соединений физико-химическими методами анализа (газовая хромато-масс-спектрометрия, ИК спектроскопия, ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопия, рентгеноструктурный анализ).

Результаты представлены в трех статьях, индексируемых Web of Science и Scopus, в двух статьях РИНЦ и в десяти докладах на российских и международных научных конференциях.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»,
- Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,
- Челябинский государственный университет.



НОВЫЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ РЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Руководитель проекта – кандидат химических наук И.В. Кривцов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Целью проекта является поиск новых методов синтеза, позволяющих получить наноструктурированные катализаторы, применяемые для деструкции трудноокисляемых органических поллютантов и промышленно значимых химических процессов. Катализаторы должны иметь заданную структуру и каталитическую активность более высокую, чем у существующих коммерческих аналогов.

ПУБЛИКАЦИИ

2 научные статьи

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- ➔ Будут разработаны новые методы синтеза металлооксидных и графитоподобных нитридоглеродных (фото)катализаторов, проявляющих эффективность более высокую, чем существующие аналоги в реакциях разложения метиленового синего под ультрафиолетовым излучением, в селективных реакциях органического синтеза. Методы будут основаны на нетоксичных реагентах.
- ➔ Будут изучены механизмы формирования высокоэффективных (фото)катализаторов и найдены новые способы управления структурообразованием неорганических наноразмерных материалов.
- ➔ Будут получены новые материалы, являющиеся продуктами импортозамещения в сфере новых функциональных (фото) катализаторов промышленного назначения.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

- ➔ Селективный органический синтез. Возможно использование на предприятиях, осуществляющих получение сложных органических соединений, с использованием катализаторов типа Evonik P-25.

- ➔ Деструкция трудноокисляемых органических соединений. Возможно использование на предприятиях, имеющих в качестве отходов трудноокисляемые органические соединения.
- ➔ Дальнейшее развитие методов управления структурообразованием неорганических веществ. Возможно использование в научно-исследовательских лабораториях и научно-образовательных центрах.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Селективное окисление метильных групп ароматических соединений до соответствующих карбонильных и карбоксильных функциональных групп – процесс, имеющий огромное значение для активации исходных веществ в органическом синтезе. В последнее время особое внимание привлекает использование молекулярного кислорода в качестве «зеленого окислителя» с применением недорогих, нетоксичных, легковосстанавливаемых и безотходных полупроводниковых фотокатализаторов, таких как TiO_2 или $g\text{-C}_3\text{N}_4$.

Представлен не изученный ранее метод хемоселективного фотоокисления метильной группы амфифильной молекулы 2-(4-метилфенокси) этанола (МРЕТ) посредством $g\text{-C}_3\text{N}_4$, что приводит к образованию 4-(2-гидроксиэтокси) бенальдегида (НЕВ) в присутствии атмосферного O_2 в качестве

окислителя. НЕВ находит применение в фармацевтической промышленности, а также часто используется в качестве структурного элемента при синтезе полимеров, применяемых при производстве лекарств. Данное вещество обычно получают путем синтеза в органических растворителях при нагревании в присутствии галогенированных соединений, поэтому разработка более экологически и экономически эффективных методов его производства вызывает существенный интерес.

Сравнение характеристик двух наиболее распространенных фотокатализаторов при фотоокислении МРЕТ показывает существенное различие в их реакционных механизмах (рис. 1). С целью увеличения скорости реакции и селективности в отношении образования НЕВ мы использовали несколько ранее описанных методов, среди которых: тепловое отслаивание (ТЕ), гидротермальный синтез в присутствии NaOH, протонирование $g\text{-C}_3\text{N}_4$ в присутствии HCl, легирование щелочными металлами, и обработка чистого $g\text{-C}_3\text{N}_4$ [MCN_O] пероксидом водорода по методике, подобной той, что представлена в работе, но в более мягких условиях.

Для получения более эффективного фотокатализатора применялось тепловое отслаивание $g\text{-C}_3\text{N}_4$ при 500 °C (ТЕ) с последующей обработкой H_2O_2 (ТЕ_0). Потенциальная константа скорости реакции МРЕТ, наблюдаемая в образце ТЕ, слегка снижается после обработки H_2O_2 (рис. 2 (А)), а выход НЕВ заметно увеличивается (рис. 2 (В)). Хотя селективность по отношению к НЕВ несколько снижается при высокой степени превращения, она находится в диапазоне 72–83 % в течение всего времени протекания реакции (рис. 2 (С, D)).

Уникальная способность $g\text{-C}_3\text{N}_4$ селективно окислять алкильную группу алкилфенолеоксилата и молекулы алкилового спирта в водной среде с использованием O_2 в качестве окислителя открывает новые пути применения этого фотокатализатора в области органического синтеза. Однако для более глубокого понимания механизма реакции необходимо исследовать более широкий спектр субстратов. Кроме того, в данном исследовании ясно показано, что контроль водородной связи между функциональными группами на поверхности фотокатализатора и подложкой имеет первостепенное значение для частичного фотоокисления.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Universit  di Palermo, Italy.
- University of Oviedo, Spain.

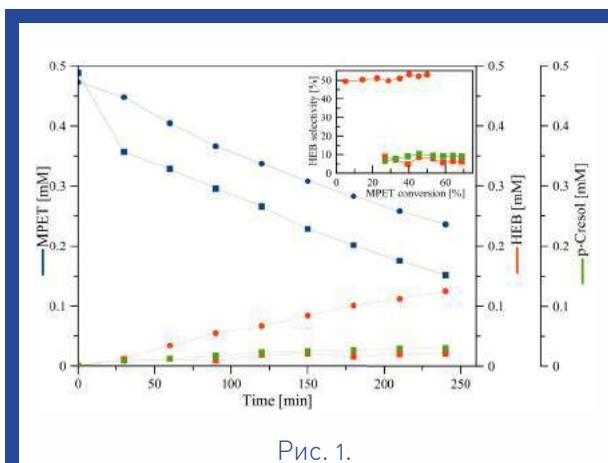


Рис. 1.

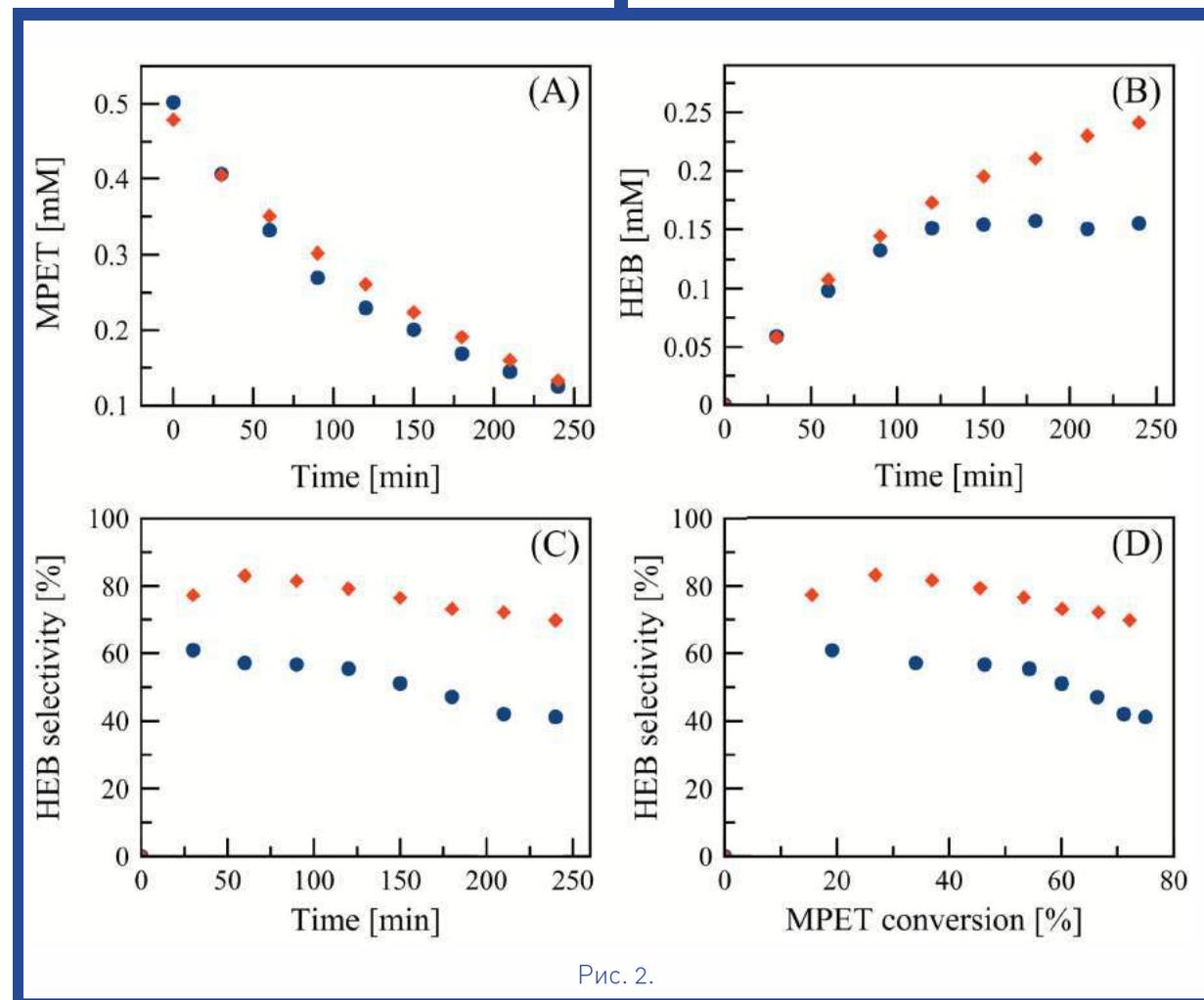


Рис. 2.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНЫХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРЕЦИЗИОННЫХ СОПРЯЖЕНИЙ РАСПЫЛИТЕЛЯ ТОПЛИВНОЙ ФОРСУНКИ ДИЗЕЛЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ И УЛУЧШЕНИЯ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Руководитель проекта – доктор технических наук **В.Е. Лазарев**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Повышение надежности топливоподающей форсунки при снижении токсичности отработавших газов дизеля и улучшении его эксплуатационных свойств при повышенных (до 300 МПа) давлениях впрыска топлива.

ПУБЛИКАЦИИ

2 научные статьи

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Описание особенностей эксплуатации используемых материалов и условий нагружения распылителей топлива в дизелях при условии повышенных (до 300 МПа) давлений подачи топлива, а также разработка и анализ опытной конструкции распылителя с разделенными направляющими и уплотняющими функциями в области прецизионных сопряжений иглы и корпуса.
- ➔ Подготовка комплексных гидродинамических (CFD/CFX) моделей для анализа основных гидродинамических параметров потока топлива в проточной части распылителей различных конструкций.
- ➔ Моделирование гидродинамических параметров потока при условии варьирования геометрическими характеристиками прецизионных сопряжений, а также с учетом особенностей взаимного расположения иглы и корпуса распылителя.
- ➔ Анализ полученных результатов и поиск наиболее рациональных и эффективных технических решений конструкций распылителя, обеспечивающих наименьшую совокупность нагружений различной физической природы и, как следствие, наивысший технический ресурс.
- ➔ Подготовка практических рекомендаций по совершенствованию методов расчетного анализа и вариантов конструкции распылителей,

работающих при повышенных (до 300 МПа) давлениях впрыска топлива.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

В результате проведения исследования ожидается получение комплексной модели оценки гидродинамических параметров потока в топливной магистрали распылителя, позволяющей объединить участки, характеризующиеся особенностями микро-геометрии (с характерными размерами от нескольких десятков микрометров), до макрогеометрии (с характерным размером до нескольких тысяч микрометров). Указанное обстоятельство позволит наиболее точно учесть особенности взаимного расположения иглы и корпуса распылителя и оценить распределение скоростей и давлений потока топлива в областях верхнего (уплотняющего) и нижнего (направляющего) сопряжений. Использование комплексного метода, учитывающего вид и уровень нагружения, фактические параметры шероховатости и триботехнические характеристики прецизионных сопряжений, а также предусматривающего конечно-элементный анализ теплового и напряженно-деформированного состояния сопряжений с различными способами моделирования микрорельефа шероховатости и поточный анализ движения топлива в зазорах прецизионных сопряжений, позволит оценить влияние предложенных технических решений на ресурс распылителя.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Разработан, изготовлен и подготовлен к стендовым испытаниям опытный образец распылителя.

Результаты проекта могут быть использованы при разработке и изготовлении промышленных образцов распылителей топливных форсунок дизелей, обеспечивающих эффективные показатели подачи топлива при повышенных (до 300 МПа) давлениях впрыска и в учебном процессе высших учебных заведений, специализирующихся на подготовке бакалавров и магистров по направлению «Энергетическое машиностроение» в части изучения особенностей и принципов функционирования распылителей форсунок дизелей, методов их совершенствования и анализа.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

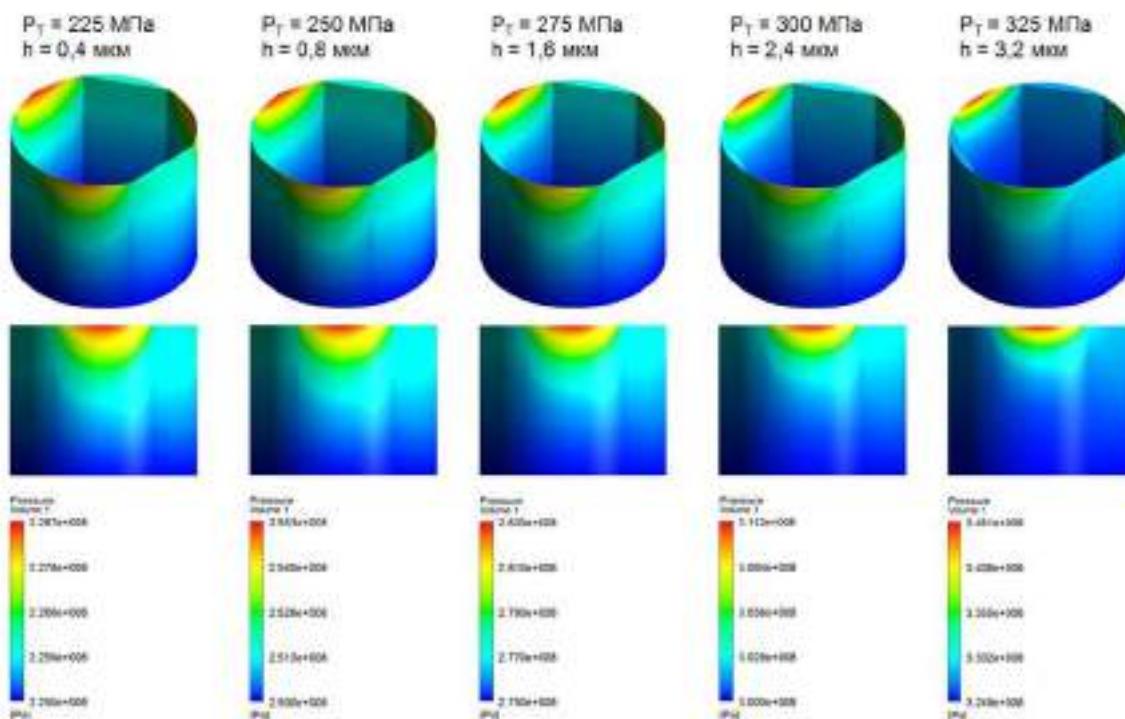
- ☑ Выполнено описание особенностей эксплуатации используемых материалов и условий нагружения распылителей топлива в дизелях при условии повышенных (до 300 МПа) давлений подачи топлива, а также разработка и анализ опытной конструкции распылителя с разделенными

направляющими и уплотняющими функциями в области прецизионных сопряжений иглы и корпуса.

- ☑ Подготовлены комплексные гидродинамические (CFD/CFX) модели для анализа основных гидродинамических параметров потока топлива в проточной части распылителей различных конструкций.
- ☑ Проведено моделирование гидродинамических параметров потока при условии варьирования геометрическими характеристиками прецизионных сопряжений, а также с учетом особенностей взаимного расположения иглы и корпуса распылителя.
- ☑ Выполнен анализ полученных результатов и поиск наиболее рациональных и эффективных технических решений конструкций распылителя, обеспечивающих наименьшую совокупность нагружений различной физической природы и, как следствие, наивысший технический ресурс распылителя.
- ☑ Проведена подготовка практических рекомендаций по совершенствованию методов расчетного анализа и вариантов конструкций распылителей, работающих при повышенных (до 300 МПа) давлениях впрыска топлива.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- ☞ Министерство образования и науки Российской Федерации,
- ☞ Институт двигателей внутреннего сгорания Мюнхенского технического университета (Мюнхен, Германия),
- ☞ Германская служба академических обменов ДААД.



Результаты оценки распределения гидродинамических давлений потока топлива в дополнительном направляющем прецизионном сопряжении и функции давления топлива и смещения иглы распылителя

ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И УПРОЧНЕНИЯ СПЛАВОВ ЖЕЛЕЗА С ХРОМОМ НА ОСНОВЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АТОМОВ ПРИМЕСЕЙ И ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЕ К РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ СПЛАВОВ

Руководитель проекта – доктор физико-математических наук Д.А. Мирзаев

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Проведение многомасштабного моделирования железохромистых сплавов с целью выяснения важных аспектов фазовых превращений, структуры, прочности и охрупчивания и создание на этой основе методов прогнозирования поведения сплавов и формирования их свойств при термической обработке

ПУБЛИКАЦИИ

3 научные статьи

3 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в SCOPUS

1 статья в журнале, входящем в перечень ВАК

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Разработка усовершенствованного варианта теории превращений аустенита и приложение её для прогнозирования кинетики превращений в железохромистых сплавах.
- Разработка методики расчёта структурного состава и твёрдости железохромистых сплавов в зависимости от режима термической обработки.
- Первопринципное компьютерное моделирование локальных особенностей поведения примесей (фосфор, водород) в железохромистых сплавах и основанный на этом термодинамический анализ влияния примесей на охрупчивание сталей.
- Анализ влияния дополнительных легирующих элементов на фазовые превращения в железохромистых сплавах, выяснение оптимальных типов легирования для повышения комплекса свойств.
- Разработка на основе полученных результатов новых режимов термической обработки высокохромистых трубных сталей для нефтегазовой промышленности.

- Методика расчёта структурного состава и твёрдости железохромистых сплавов в зависимости от содержания хрома и углерода и режима термической обработки.
- Полученные методами компьютерного моделирования значения энергии растворения атомов вредных примесей (водорода, фосфора) и их взаимодействия с дефектами решётки – границами зёрен – в железе и железохромистых сплавах.
- Данные о влиянии дополнительных легирующих элементов на фазовые превращения, структуру и свойства железохромистых сплавов.
- Разработка на основе полученных результатов новых режимов термической обработки комплекснолегированных хромистых сталей для производства труб нефтегазовой промышленности, обеспечивающих оптимальные свойства.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты проекта предназначены для использования при разработке методик реалистичного расчёта диаграмм превращений в различных температурных областях, на основе которых могут подбираться составы промышленных сплавов и назначаться режимы их термической обработки, в том числе для высокохромистых трубных сталей, применяемых в нефтяной и газовой промышленности.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Кинетическая теория превращения гамма-фазы (аустенита) в диффузионной, промежуточной и мартенситной области в железохромистых сплавах.

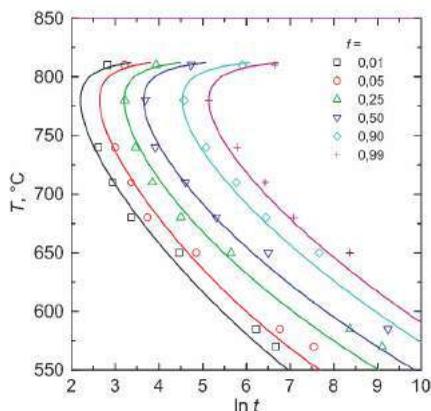
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- ☑ Разработана усовершенствованная теория превращения аустенита в диффузионной области. Она отличается от существующих, во-первых, отказом от учёта температурной зависимости работы образования критического зародыша в энергии активации, как это следует из ряда современных экспериментальных работ; во-вторых, альтернативным вариантом учёта исчерпания мест зарождения на границах зёрен, лучше соответствующим реально наблюдаемой морфологии роста частиц феррита. Теория применена для моделирования превращения аустенита в феррит в железохромистых сплавах с небольшим количеством углерода. С её помощью рассчитаны диаграммы образования феррита, которые хорошо согласуются с экспериментальными.
- ☑ Разработана модель кинетики превращения аустенита в феррито-карбидную структуру (перлит) в высокоуглеродистых сплавах на железо-хромистой основе. В её основу были положены те же усовершенствованные теоретические положения, что и для модели превращения

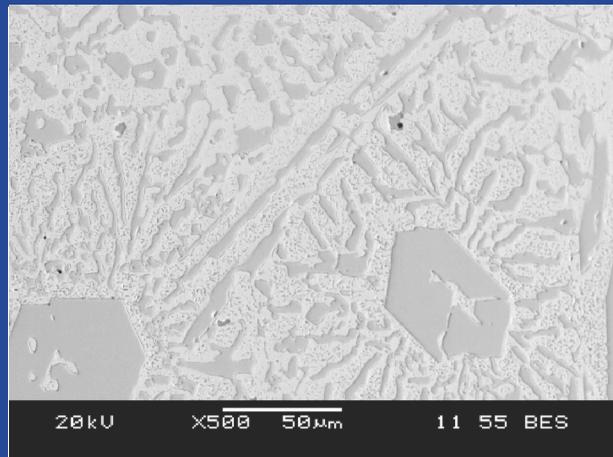
аустенита в феррит, а значения коэффициентов и их зависимость от концентрации углерода и хрома в аустените были определены на основе анализа экспериментальных данных для широкой области составов (2,0–4,3 %C и 12–26 %Cr).

Продемонстрировано достаточно хорошее согласие рассчитанных диаграмм изотермического образования перлита с экспериментальными.

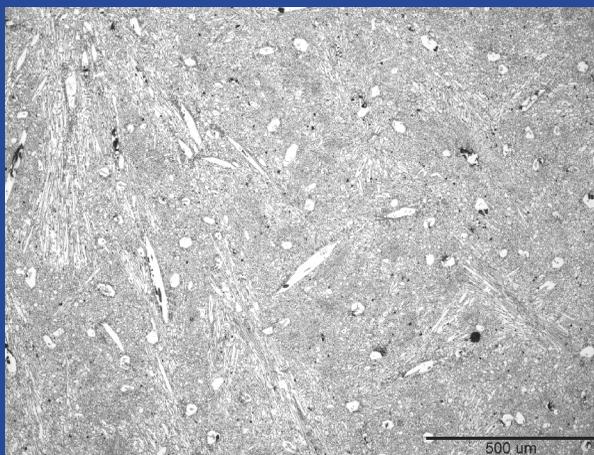
- ☑ Создана модель, связывающая структурный состав железохромистых сплавов с их твёрдостью. Для этого найдена уточнённая зависимость положения мартенситной точки и количества остаточного аустенита от исходного состава гамма-фазы, а также связь микротвёрдости мартенсита, остаточного аустенита и карбидов с их химическим составом. Интегральная твёрдость сплава определялась при этом по правилу аддитивности. На основе этой модели создана методика расчёта структурного состава и твёрдости железохромистых сплавов в зависимости от содержания хрома и углерода и режима термической обработки. В ней вначале производится термодинамический расчёт химического состава аустенита и количества карбидной фазы к моменту окончания аустенитизации (нагрева под закалку), а затем структурный состав и твёрдость сплава после проведения операции закалки. Таким образом становится возможным обоснованно подбирать расчётным путём составы сплавов и режимы их термической обработки в зависимости от конкретных технических требований.



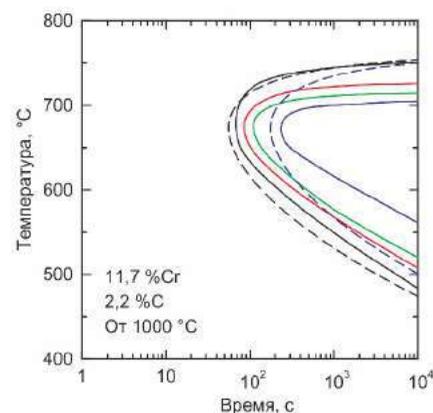
Рассчитанная диаграмма изотермического аустенит-ферритного превращения в сплаве Fe-9 %Cr с 0,04 %C в сравнении с экспериментальной



Микроструктура сплава Fe-28 %Cr-3 %C после закалки от 1050 °C



Микроструктура сплава Fe-28 %Cr-2,8 %C после закалки от 1190 °C



Рассчитанная диаграмма изотермического образования перлита в сплаве Fe-11,7 %Cr-2,2 %C в сравнении с экспериментальной

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В ОКСИДНЫХ СИСТЕМАХ, ВКЛЮЧАЮЩИХ ФЕРРИТЫ БАРИЯ

Руководитель проекта – доктор технических наук Г.Г. Михайлов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Оценка возможности и установление границ применимости расчетных подходов к моделированию поведения механической части трубопровода применением современных вычислительных средств прогнозирования взаимодействия деформируемого твердого тела и жидкости.

ПУБЛИКАЦИИ

11 научных статей

4 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

8 статей в SCOPUS/WoS

3 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Гексаферриты М-типа со структурой магнетоплюмбита известны более полувека и благодаря своим свойствам – химической инертности, механической твердости, высоким значениям температуры Кюри, коэрцитивной силы и поля анизотропии – получили широкое распространение в различных отраслях науки и техники, в первую очередь в устройствах хранения и записи информации, а также при изготовлении постоянных магнитов. В то же время развитие методов и устройств для исследования материалов в последние два десятилетия существенно расширило сферы и возможности использования ранее известных материалов. В последние десятилетия интерес к гексаферритам возрос благодаря возможности их использования в электронике в виде объемных материалов – в магнитооптике, акустоэлектронике, в качестве сфер для устройств СВЧ-диапазона, в виде тонких пленок – в устройствах хранения и перезаписи информации высокой плотности.

Получение гексаферритов посредством расплавной технологии требует надежных данных о фазовых равновесиях, реализующихся в системах вида $MeO-Fe_2O_3-RnOm$. При этом обстоятельный обзор литературы показывает, что информация о таких фазовых равновесиях очень отрывочна и противоречива. Даже данные о двойных системах вида $MeO-Fe_2O_3$, представленные в литературе, существенно различаются. Немногие представленные в литературе варианты фазовых диаграмм таких систем отличаются не только количественно,

но и качественно. Ещё хуже обстоит дело с более сложными системами, начиная с трёхкомпонентных. По ним практически отсутствуют экспериментальные данные, а попытки моделирования посредством самых современных баз приводят к явно неудовлетворительным результатам (что, очевидно, связано с рассогласованностью данных даже для ряда двухкомпонентных систем). Восполнить очевидные пробелы в информации фундаментального характера, которые препятствуют развитию расплавной технологии, – задача настоящего исследования.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Современная электроника идет по пути миниатюризации, и как следствие – ужесточаются требования к чистоте исходных материалов, а также к возможности оптимизации чистых материалов (кристаллических матриц) под конкретные задачи. Особые возможности по модификации состава, структуры и, следовательно, свойств представляют именно гексагональные ферриты М-типа. Это обусловлено наличием 5 различных кристаллографических позиций железа в их кристаллической решетке, контролируемое замещение которых различными ионами металлов позволяет варьировать свойства получаемых таким образом структур в широком диапазоне.

Перспективным на настоящий момент времени направлением исследований является создание покрытий и объемных элементов на основе ферритов для летательной техники, бронемашин, кораблей и других объектов, представляющих

стратегический интерес, а также материалов для устройств телекоммуникации. Данное научное направление отмечено в качестве перспективного в «Прогнозе научно-технологического развития России: 2030», составленном Министерством образования и науки Российской Федерации и Национальным исследовательским университетом «Высшая школа экономики».

Следует сказать, что к настоящему времени разработано множество способов, обеспечивающих получение гексаферритов М-типа в разной форме. Для получения тонких пленок применяют жидкофазную эпитаксию, импульсное лазерное напыление, трафаретную печать, осаждение металлоорганических соединений. Основными способами получения нано- и микрочастиц являются методы химического соосаждения, гидротермальный, золь-гель, метод окисления в расплаве, спекание, механотермической обработки и метод микроэмульсии. Объемные монокристаллы получают методами зонной плавки или из раствора с использованием в качестве флюса один из ряда $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$, $\text{BaO}(\text{SrO})-\text{B}_2\text{O}_3-\text{PbO}$, $\text{BaF}_2(\text{SrF}_2)-\text{Fe}_2\text{O}_3$, $\text{BaCl}_2(\text{SrCl}_2)-\text{B}_2\text{O}_3$, $\text{BaO}(\text{SrO})-\text{B}_2\text{O}_3$, Bi_2O_3 , NaFeO_2 , Na_2O .

Каждый из методов обладает преимуществами и недостатками. Сложный и малоизученный характер плавления гексаферритов препятствует широкому распространению расплавных методов получения. И несмотря на это, растворные методы являются более универсальными для получения объемных материалов.

Известно, что добавление в расплав веществ, уменьшающих температуру плавления расплава, может приводить к их микро- и макровключениям в матрицу растущего кристалла. Вообще добавление новых компонентов в расплав может оказать труднопрогнозируемое влияние на результаты процесса. Помимо снижения температуры плавления добавка может привести к формированию новых, ненужных фаз, препятствующих росту кристалла. С другой стороны, включение в состав кристалла дополнительных компонентов можно рассматривать как легирование, которое в ряде случаев может оказывать положительное влияние на функциональные характеристики получаемого материала. Поэтому трудно переоценить значение изучения фазовых равновесий в используемых для выращивания кристаллов системах с точки зрения потребностей совершенствования расплавной технологии.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

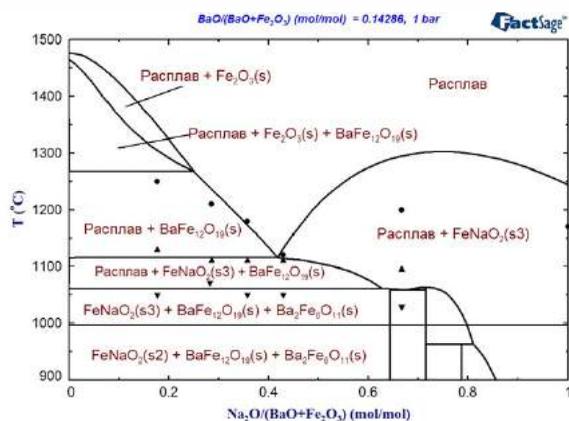
В ходе этапа НИР выполнен анализ экспериментальных литературных данных и экспериментальное изучение фазовых равновесий в двойных оксидных системах для областей составов и температур, представляющих интерес с точки зрения анализа процесса выращивания кристаллов гексаферритов. Осуществлено термодинамическое моделирование фазовых равновесий, реализующихся в двойных оксидных системах, включающее в себя расчёт фазовых диаграмм перечисленных систем. Проведён большой объём работ по выращиванию образцов монокристаллов, пригодных для исследования структуры и свойств гексаферритов. Выполнено исследование морфологических особенностей, состава и структуры монокристаллов гексаферритов. Подготовлены публикации, сделаны доклады на научных конференциях.

Результатом исследования на проведённом этапе стала информация фундаментального характера о двойных оксидных системах, являющихся граничными по отношению к более сложным системам, составляющим основу флюса для выращивания кристаллов гексаферритов, а также новые данные о методике выращивания монокристаллов гексаферритов из расплава и о свойствах полученных таким образом кристаллов.

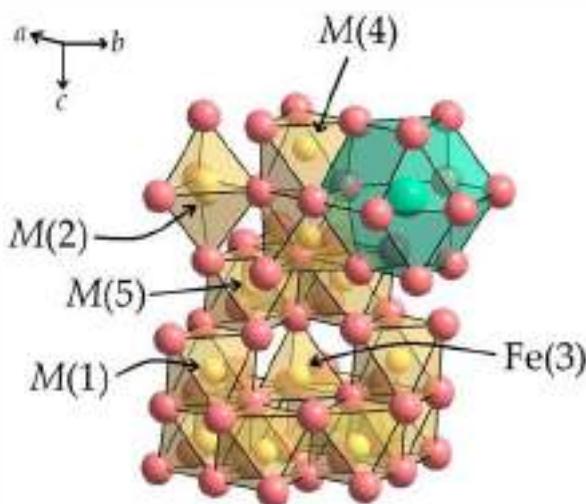
Результаты работы, полученные на данном этапе, будут использованы на следующем этапе настоящего исследования.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Институт геологии и минералогии имени В.С. Соболева СО РАН
- Институт общей физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН



Политермический разрез фазовой диаграммы системы $\text{BaO}-\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ на линии $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}-\text{Na}_2\text{O}$. ● – точки равновесия оксидного расплава с кристаллическими фазами, включая $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$; ▲ – граница пересечения областей фазовых равновесий; ▼ – тройная эвтектика



Фрагмент кристаллической решетки замещенного алюминием гексаферрита бария

3D/4D QSAR ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ, ПРОТИВОВИРУСНОЙ И ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Руководитель проекта – кандидат химических наук В.А. Потёмкин

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

3D/4D QSAR исследование и молекулярный дизайн противоопухолевых, противовирусных средств и противовоспалительных средств, включающее комплексную оценку механизма целевого действия, метаболических и токсических эффектов.

ПУБЛИКАЦИИ

5 научных статей

4 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

4 статьи в SCOPUS

1 статья в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Создание моделей для прогноза биологической активности в мультikonформационно-мультитаутомерном режиме с использованием алгоритмов BiS и CiS, разработанных в лаборатории.
- ➔ Разработка высокопрогностических моделей для оценки ADMET свойств молекул и возможности их синтеза, которые важны для проектов по исследованию лекарств.
- ➔ Разработка полифармакологической модели для прогнозирования биологической активности соединений на основе известных данных.
- ➔ Разработка новых подходов 3D/4D QSAR на основе молекулярного интерьера и экстерiorsа.
- ➔ Молекулярный докинг для определения особенностей активных соединений.
- ➔ Квантовые расчеты для комплексов «лекарство - фермент» для выяснения тонких особенностей электронной структуры активных веществ.
- ➔ Создание прогностических моделей для предсказания биологических и ADMET свойств.
- ➔ Молекулярный дизайн новых кандидатов в лекарства.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- ➔ В рамках алгоритма MultiGen будет проведено построение мультikonформационной модели молекул противовирусных средств с установленной экспериментально величиной

активности. В случае солей - провести моделирование ориентации катиона и аниона в присутствии водного окружения с использованием алгоритма MOPS.

- ➔ В рамках 3D/4D QSAR алгоритмов BiS и CiS будет произведен отбор конформеров, отвечающих за связывание соединений с биомолекулами.
- ➔ Будет проведено моделирование поля молекул, представленного как сумма кулоновского и ван-дер-ваальсова потенциала.
- ➔ Будет проведено построение количественных моделей между величинами биологической активности и параметрами внешнего поля молекул с качеством не ниже 0,90 по технике «скользящий контроль».
- ➔ Будут выделены наиболее активные конформеры, расчетная биологическая активность которых является максимальной.
- ➔ В алгоритме CiS будет проведен расчет силовых постоянных взаимодействия, позволяющий имитировать амплитуду движения сайта рецептора при подстройке к каждому биологически активному соединению.
- ➔ Будет оценено распределение электронной плотности в молекулах с использованием квантово-химических подходов и алгоритмом AlteQ.
- ➔ В рамках алгоритма ConGO будет проведено наложение структур до максимального совпадения электронной плотности.
- ➔ Будут найдены количественные взаимосвязи характеристик электронного строения молекул с активностью с качеством не ниже 0,90 по технике «скользящий контроль».
- ➔ Будет проведен дизайн новых

кандидатов в противовирусные, противовоспалительные, противоопухолевые средства с высокой активностью и низкими нежелательными побочными действиями.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Предсказанные в результате выполнения противовирусные лекарственные средства в дальнейшем могут быть синтезированы, подвергнуты *in vitro*, *in vivo* и клиническим испытаниям с последующим производством и внедрением в терапевтическую практику.

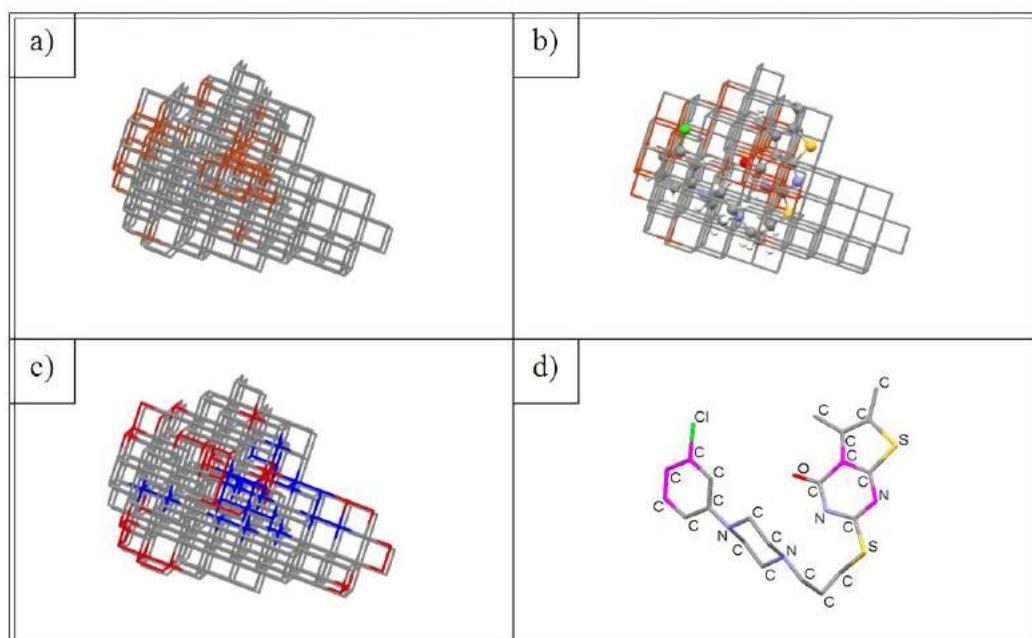
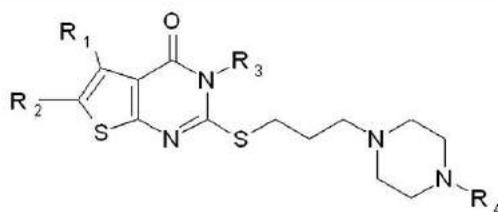
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Проанализированы базы данных по противовирусной активности, метаболическим свойствам соединений (константы Михаэлиса), токсичности (LD50), константам диссоциации комплексов «рецептор-лиганд» (Kd). Собрана информация из различных источников, таких как публикации в научных статьях, информация, представленная в онлайн-ресурсах, таких как theChEMBL family Европейского Института Биоинформатики (EMBL EBI), Американского Национального Института Здоровья, PDBBind,

OSCHEM, TOXNET и т.д. Проанализированы информативность и полнота сведений, представленных в этих ресурсах. Сгенерированы информативные обучающие выборки соединений, действующих по сходному механизму, выборки субстратов изоформ цитохрома P450 для анализа теоретическими методами. Для каждого механизма действия средств осуществлен полный анализ биологической активности с использованием 3D/4D QSAR алгоритмов BiS/MC, CiS, ConGO, выделены наиболее активные конформеры молекул, построены количественные взаимосвязи с активностями, определены характеристики молекулярного экстерiors и интериора. Проведен расчет широкого спектра физико-химических свойств (термодинамические свойства, температуры кипения, плавления, плотность и т.д.) для оценки их влияния на биоактивность с использованием количественных моделей, имеющихся у коллектива авторов. Кроме того, для сравнения проведен расчет физико-химических свойств представленными в интернете онлайн-ресурсами. Рассмотрены, проанализированы доступные на сегодняшний момент широкому кругу исследователей онлайн-приложения, позволяющие осуществлять прогноз физико-химических свойств соединений. Написано программное обеспечение для реализации алгоритма AlteQ и квантово-химических расчетов данных систем.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Москва.
- Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск.
- Университет Эрлангена – Нюрнберга им. Фридриха-Александра, Эрланген, Германия.



РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СИНТЕЗА ПИЩЕВЫХ ИНГРЕДИЕНТОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ С АДАПТОГЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ

Руководитель проекта – доктор технических наук И.Ю. Потороко

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Проект направлен на разработку и внедрение биотехнологических подходов для получения растительных полуфабрикатов с повышенным содержанием функциональных пищевых ингредиентов (ФПИ) и их применение в производстве продуктов с адаптогенными свойствами. Выполнение проекта осуществляется с использованием методов молекулярной биотехнологии в секторе агропромышленных технологий, тематическая область «Пищевые биотехнологии», на основе прорывного направления в рамках программы развития «Биотехнологии 2030».

ПУБЛИКАЦИИ

7 научных статей

3 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

7 статей в SCOPUS/
WoS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Создана база данных с характеристикой вариабельности химического состава растительного сырья с позиций биологической активности отдельных составных частей и с учетом технологической возможности их применения в создании биокомпозитов.
- ➔ Проведен выбор эффективных методов и режимов ультразвукового (УЗ) воздействия в целях интенсификации экстракционных процессов и максимального извлечения ФПИ растительного сырья.
- ➔ Осуществлено математическое моделирование в целях оптимизации химического состава и функциональных свойств биокомпозитов ФПИ.
- ➔ Проведена разработка технологических рекомендаций и принципиальных технологических схем применения биокомпозитов ФПИ в конкретных отраслях пищевой промышленности для создания нового ассортимента продуктов с адаптогенными свойствами.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

В результате выполнения проекта будут разработаны технологии эффективного извлечения функциональных пищевых ингредиентов. Полученные

функциональные пищевые ингредиенты будут использованы в качестве основы для создания биокомпозитов, обладающих выраженным адаптогенным действием. Теоретические и экспериментальные исследования технологических свойств биокомпозитов ФПИ позволят разработать оптимальные рецептуры и технологии пищевых продуктов с адаптогенными свойствами.

Созданные лабораторные образцы адаптогенных пищевых продуктов в дальнейшем могут быть использованы для масштабной разработки, в том числе в условиях реального производства, и коммерциализации инновационных разработок в пищевой отрасли. Результаты проекта лягут в основу Программы развития производства продуктов здорового питания на основе инновационных пищевых ингредиентов в Уральском регионе на период до 2030 г. в рамках прорывного направления программы «Биотехнологии 2030».

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Отработанные алгоритмы и режимы экстракции могут быть использованы для извлечения функциональных пищевых ингредиентов из других видов растительного сырья и получения биокомпозитов на их основе. Полученные результаты могут составлять определённый практический интерес для предприятий АПК и пищевой отрасли.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

При реализации проекта получены результаты, вносящие вклад в решение одной из основных фундаментальных проблем в области рационального природопользования – создание современных экологически ориентированных технологий переработки растительного сырья. Созданы и апробированы инновационные технологии экстракции функциональных пищевых ингредиентов малоиспользуемого в этих целях растительного сырья (свекла, жимолость, имбирь, овес, фукоидан). С помощью оригинальных и усовершенствованных методик определены биохимические характеристики полученных экстрактов, выделены наиболее перспективные для переработки виды. Разработаны параметры стандартизации биокомпозитов, оптимальные формы для их применения. Созданы принципиальные технологические схемы получения биокомпозитов ФПИ, а также установлены конкретные особенности технологий для каждого вида сырья с применением экологически ориентированных методов.

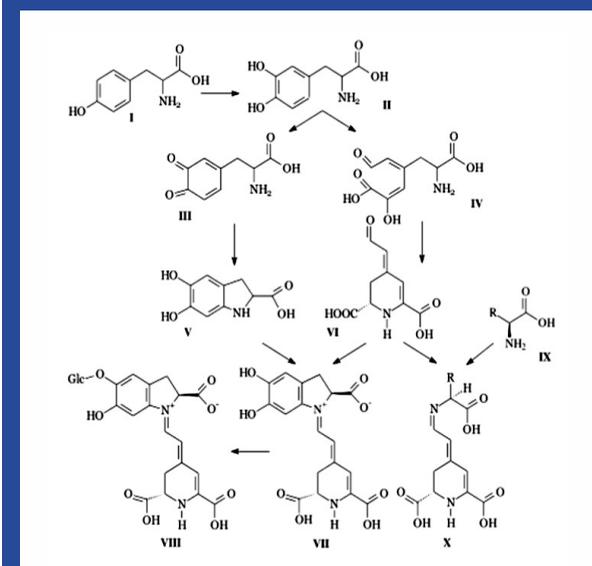
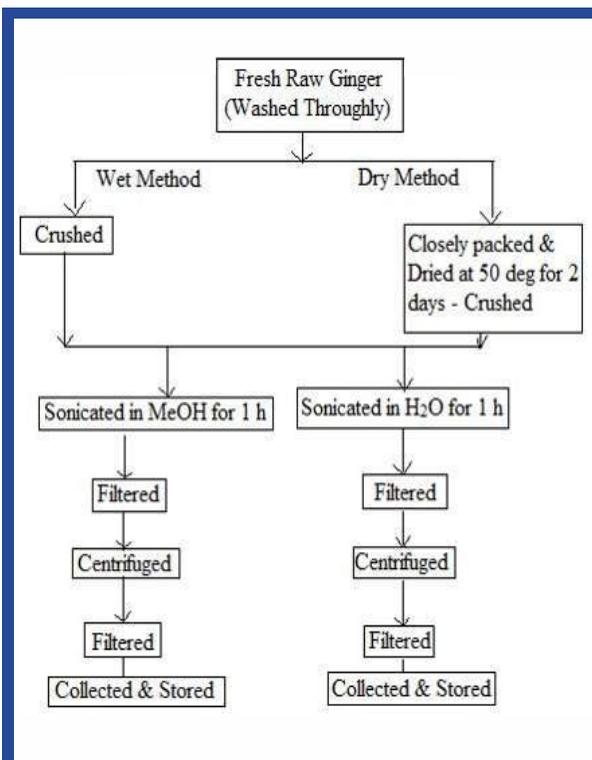
ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

Коммерческие партнеры:

- ➔ Агропарк «ГОГИНО»;
- ➔ ООО «Боровое»;
- ➔ АНО РКЦ по Уралу и Сибири;
- ➔ ООО «Биотехнологии».

Научно-исследовательские лаборатории и вузы:

- ➔ Лаборатория «Тест-Пушино»;
- ➔ Национальный технологический институт, Индия;
- ➔ Далянский технологический институт, Китай;
- ➔ Варненский медицинский университет, Болгария;
- ➔ Шеньянский университет, Китай;
- ➔ Университет Людонг, Китай;
- ➔ Словацкий сельскохозяйственный университет, Словакия.



ПРОВЕДЕНИЕ КОМПЛЕКСА НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И РАЗРАБОТОК, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ ПОВЫШЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ТОЛСТОЛИСТОВОГО ПРОКАТА

Руководитель проекта – доктор технических наук А. А. Радионов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка комплекса научно-обоснованных, концептуально связанных технических решений, обеспечивающих повышение энергетической эффективности и ресурсосбережение при производстве толстолистого проката из труднодеформируемых марок стали на отечественных металлургических предприятиях.

ПУБЛИКАЦИИ

4 научных статьи

1 защищена кандидатская диссертация

4 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

4 статьи в SCOPUS

4 статьи в Web of Science

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Проведение комплекса теоретических и экспериментальных исследований с целью определения путей и резервов энерго- и ресурсосбережения при производстве проката для труб большого диаметра.
- ➔ Разработка способов, алгоритмов и систем взаимосвязанного автоматического регулирования технологических параметров, обеспечивающих повышение энергоэффективности, снижение расходного коэффициента и повышение качества толстолистого проката из труднодеформируемых марок стали.
- ➔ Разработка математических моделей электромеханических и гидравлических систем прокатных станов. Разработка динамических моделей автоматизированных систем управления технологическим процессом, взаимосвязанных в процессе прокатки металла.
- ➔ Исследование разработанных автоматизированных электроприводов и систем управления методами математического моделирования. Проведение экспериментальных исследований в производственных условиях на толстолистовом стане 5000 и широкополосном стане 2000 горячей прокатки ПАО «Магнитогорский металлургический комбинат» (ПАО «ММК»).

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Конкретными практическими результатами являются принципиально новые автоматизированные электроприводы и системы управления, обеспечивающие повышение конкурентоспособности продукции отечественных металлургических заводов за счет повышения энергетической эффективности, снижения материалоемкости, улучшения качества трубной заготовки.

Выполненные разработки будут способствовать импортозамещению за счет конкурентного вытеснения с отечественного рынка зарубежных производителей аналогичной продукции.

Совокупность планируемых научно-технических разработок можно характеризовать как новое крупное достижение в области прокатного производства и как решение важной промышленно-хозяйственной задачи. Результаты исследований будут способствовать инновационному развитию отечественной металлургической отрасли.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Объекты внедрения результатов проекта – толстолистовые и широкополосные станы горячей прокатки. Разработанные способы, алгоритмы и системы управления в полном объеме пройдут опытно-промышленные испытания на толстолистовом стане 5000 ПАО «ММК».

Выполненные разработки могут найти применение практически на всех отечественных металлургических заводах. В перспективе планируется выход на рынок ближнего зарубежья.

Математические модели и официально зарегистрированное программное обеспечение будут предоставлены проектным и научно-исследовательским организациям для использования при совершенствовании технологий и автоматизированных электротехнических систем прокатных станов.

Полученные результаты внесут существенный вклад в теорию и практику создания автоматизированных электроприводов и систем автоматического управления взаимосвязанных технологических комплексов.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- ☑ Обоснованы и разработаны концептуальные решения по повышению качества продукции, энерго- и ресурсосбережению при производстве проката из труднодеформируемых марок стали на толстолистовом стане.

- ☑ Выполнена разработка энергосберегающего алгоритма управления многоуровневым преобразователем частоты в составе автоматизированного электропривода большой мощности. Разработаны математическое описание, выполнены теоретические и экспериментальные исследования взаимосвязанных электротехнических систем толстолистого прокатного стана.
- ☑ Обоснованы уточненные технологические требования к автоматизированным электроприводам и системам автоматического регулирования технологических параметров при производстве толстолистого проката из труднодеформируемых марок стали.
- ☑ Разработан гибридный алгоритм управления, осуществляющий переключение между существующим и разработанным алгоритмами широтно-импульсной модуляции, обеспечивающий повышение энергетической эффективности электропривода. Проведены теоретические и экспериментальные исследования разработанных алгоритмов и технических решений.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Публичное акционерное общество «Магнитогорский металлургический комбинат»;
- Публичное акционерное общество «Челябинский трубопрокатный завод».



Комплекс по производству толстолистого проката ПАО «ММК»



Вид на прокатную клеть толстолистого стана 5000 (с разных сторон)

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНАЗИЛЬНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Руководитель проекта – доктор химических наук О.А. Ракитин

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Формирование новых органических полупроводниковых систем на основе конденсированных халькогеназильных гетероциклов для применения в безметалльной электронике.

ПУБЛИКАЦИИ

2 научные статьи

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в SCOPUS

2 статьи в Web of Science

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Химия гетероциклических халькоген-содержащих соединений на данный момент является одной из наиболее быстро развивающихся областей. Было установлено, что определенные структуры на границе органической и неорганической химии, характеризованные высоким отношением гетероатомов (сера, селен, кислород, азот) к углероду, могут быть использованы как материалы с интересными оптическими и электрическими проводящими свойствами, а также высокой биологической активностью. Например, те из них, которые содержат [1,2,5]халькогенадиазольное кольцо, могут быть применены в качестве высокопроизводительных и дешевых компонентов светочувствительных фотоэлементов, препаратов против ВИЧ и рака, поэтому вызывают высокий фундаментальный и прикладной интерес. Таким образом, крайне важен дизайн новых молекул, содержащих [1,2,5]халькогенадиазол, которые обладают свойствами, применимыми в медицине и инженерии.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Поиск эффективного и простого пути синтеза [1,2,5]халькогенадиазоло [3',4':5,6] пиразино[2,3-f][1,10] фенантролинов как перспективного материала для излучающих систем видимого диапазона.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Органические светоизлучающие диоды получили широкое распространение в технике ввиду простоты получения, низкой стоимости и высокой эффективности. Получение новых светоизлучающих систем на основе конденсированных халькогеназотистых гетероциклов имеет перспективы качественного увеличения эффективности.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

☑ Синтез [1,2,5]халькогенадиазоло[3',4':5,6] пиразино[2,3-f][1,10]фенантролинов. Установлено, что обработка 3,4-диамино-1,2,5-оксадиазола 7a 1,10-фенантролин-5,6-дионом 6 в кипящей уксусной кислоте в течение 2 часов дает целевой продукт с 92 % выходом и высокой чистотой. Аналогичная процедура была использована для синтеза [1,2,5]тиадиазоло[3',4':5,6] пиразино[2,3-f][1,10]фенантролина 5b. Хорошо разработанные процедуры были использованы для получения комплексов $[Re(CO)_3Br(L)]$ ($L = 5a, b$); небольшой избыток $Re(CO)_3Br$ кипятился с лигандами 5a или 5b в толуоле под аргоном в течение 10–12 h. К сожалению, успешные результаты были получены только для соединения 5a, в то время как

соединение 5b оставалось неизменным даже при нагревании при 150°C в толуоле в запаянной трубке (рис. 1).

☑ Рентгеноструктурный анализ.

Согласно данным рентгеноструктурного анализа, при 120 К одиночные кристаллы относились к той же полиморфной группе и их структура была идентична структуре, полученной при комнатной температуре (рис. 2). В кристалле молекулы 5a объединены слабыми C-H...N взаимодействиями (H...N 2.4 Å) с атомами азота оксадиазольного цикла. Эти слои, в свою очередь, скомпанованы в два трехмерных каркаса с укладкой в стопки с контактами C...C и C...N, равными 3.52 и 3.42 Å.

☑ Фотофизические свойства.

Люминесценция соединения 9a в твердом состоянии при 300 К является незначительной, в то время как в дегазированном диметилсульфоксиде при этой же температуре видна невооруженным глазом. Наблюдаемое тушение люминесценции в твердом состоянии может быть следствием межмолекулярных контактов. Спектры поглощения и возбуждения для 8·10⁻⁴ М растворов в диметилсульфоксиде представлены на рис. 3. При возбуждении в коротковолновой области (360 нм) наблюдается сильная эмиссия лиганда при 412 нм вместе со слабой фосфоресценцией ³MLCT состояния при 640 нм. Характеристичное время жизни возбужденного состояния в растворе при температуре 300 К равно 186 нс (±15%), а абсолютный квантовый выход – 0,016 ± 0,003.

Следует отметить, что OLED структуры не являются полностью оптимизированными и эта часть работы все еще продолжается. OLED структуры были приготовлены при упаривании смеси компонентов на предварительно обработанной стекло - смешанный оксид индия и олова (ITO) - PEDOT:PSS подложке. Конфигурация OLED структуры показана на рис. 4.

Структура OLED работает при относительно высоком напряжении (напряжение включения оказалось равным 6 В) и испускает красный свет в широком диапазоне около 720 нм. Максимальная яркость оказалась равной 320 кд/м² при 13 В.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Министерство образования и науки РФ
- Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН.

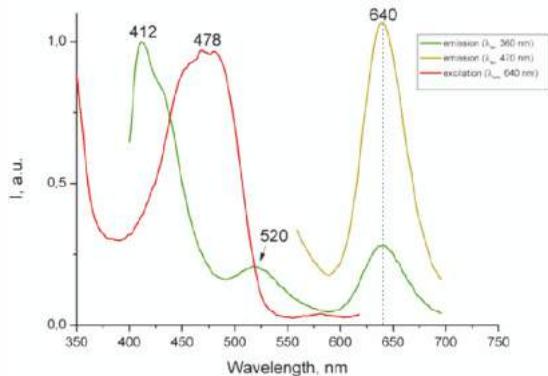


Рис. 3. Спектры возбуждения и эмиссии 8·10⁻⁴ М раствора соединения 9a в диметилсульфоксиде

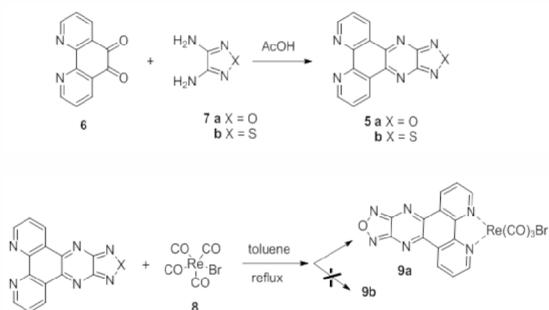


Рис. 1. Синтез [1,2,5]халькогенадiazоло[3',4':5,6]пиразино[2,3-f][1,10]фенантролинов
Синтез Re(II) бромотрикарбонильных комплексов

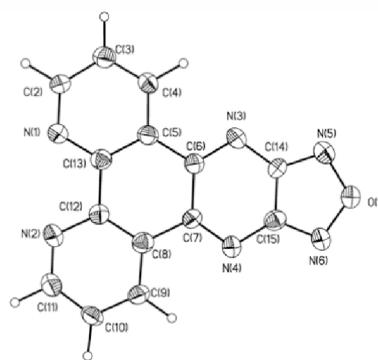


Рис.2. Общий вид молекулы 5a в кристалле с представлением неводородных атомов в виде предполагаемых эллипсоидов с атомной заселенностью (p=50%).

Выбранные длины связей (Å):
N(1)-C(2) 1.321(6), N(1)-C(13) 1.347(6),
N(2)-C(11) 1.321(6), N(2)-C(12) 1.347(6),
N(3)-C(6) 1.313(6), N(3)-C(14) 1.356(6),
N(4)-C(7) 1.296(6), N(4)-C(15) 1.363(6),
N(5)-C(14) 1.319(6), N(5)-O(1) 1.376(5),
N(6)-C(15) 1.319(6), N(6)-O(1) 1.374(5).

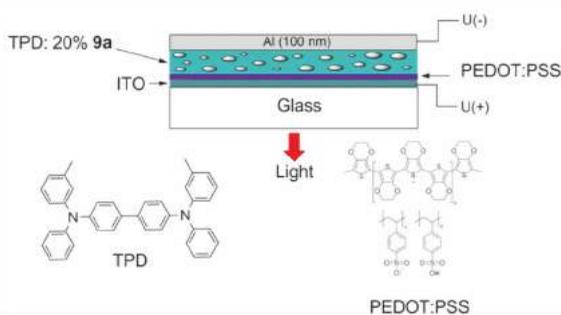


Рис. 4. OLED структура и композиция промежуточных слоев

РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ СВЯЗАННЫХ СИСТЕМ УПРУГОПОДАТЛИВЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ТРИБОСОПРЯЖЕНИЙ

Руководитель проекта – доктор технических наук Ю.В. Рождественский

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка теоретического обоснования, методического, алгоритмического и программного обеспечения моделирования взаимосвязанных процессов течения жидкости в тонких смазочных слоях и нелинейной динамики для связанных систем упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений.

ПУБЛИКАЦИИ

1 научная статья

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья в SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Разработка теоретического обоснования, методического, алгоритмического и программного обеспечения моделирования взаимосвязанных процессов течения жидкости в тонких смазочных слоях и нелинейной динамики для связанных систем упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений, учитывающих одновременное влияние:

- упругих свойств вкладышей и корпуса подшипника;
- нелинейные демпфирующие свойства смазочных слоев, обусловленные, в том числе, особенностями реологических свойств современных смазочных материалов;
- характеристики упругих связей шипов и подшипников;
- перекосы осей опорных и подвижных элементов трибосопряжений, вызванные комплексом внешних воздействий различной природы (динамических силовых, кинематических, тепловых).

Это позволит создать теоретические основы расчета упругоподатливых гидродинамических сопряжений и их систем, во многом решит проблему их конструирования и расчета, существенно расширит область применения разработанного методического, алгоритмического и программного обеспечения, снизит затраты на проектирование, испытания и доводку отдельных узлов и машин в целом.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Анализ преимуществ и недостатков существующих методик моделирования автономных упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений.
- Теоретические основы моделирования нестационарно нагруженных упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений и их систем.
- Методики, алгоритмическое и программное обеспечение моделирования автономного трибосопряжения с упругоподатливым вкладышем в жестком корпусе и перекосом осей подвижного (шипа) и неподвижного (подшипника) элементов при стационарной и нестационарной нагрузке.
- Методики, алгоритмическое и программное обеспечение моделирования автономного трибосопряжения с учетом упругих свойств корпуса подшипника.
- Методики, алгоритмическое и программное обеспечение моделирования системы упругоподатливых трибосопряжений с перекосом осей шипа и подшипника.
- Адаптация разработанного методического обеспечения к комплексному моделированию систем трибосопряжений многоопорных валов.
- Рекомендации по проектированию многоопорных валов на гидродинамических опорах скольжения. Предложение новых технических решений для гидродинамических трибосопряжений коленчатых валов высокофорсированных ДВС.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты проекта будут использованы при выполнении проблемно-ориентированных исследовательских работ для создания опережающего задела по разработке теоретических основ расчета тяжело нагруженных узлов трения; повышения ресурса и снижения трибологических потерь в трибосопряжениях, определяющих надежность машин и механизмов. В этом направлении в рамках проекта предусматривается развитие и консолидация различных областей науки, в том числе, гидродинамической теории смазки, трибологии, термодинамики, механики деформируемого твердого тела.

Полученные в результате выполнения проекта результаты могут быть распространены и направлены на цели повышения ресурса перспективных форсированных дизелей специального назначения, а также для разработки трибосопряжений поршневых и роторных машин, двигателей внутреннего сгорания нового поколения, в других областях промышленности.

Подходы, реализуемые в проекте, могут найти применение при создании искусственных суставов и протезов, так как известно, что закономерности, главным образом, упругогидродинамической смазки играют существенную роль в работе суставов человека и животного, в здоровом организме которых суставы работают безотказно в течение всей жизни.

Исследование суставов живых существ представляет большой интерес как для создания протезов, так и для конструирования по их образу и подобию узлов трения с минимальным коэффициентом трения и большой долговечностью.

Полученные в результате выполнения проекта знания, сформированный научный задел может быть распространен и направлен на получение результатов в двигателестроительной отрасли, гидро- и теплоэнергетике при разработке трибосопряжений поршневых и роторных машин нового поколения, энергоэффективных форсированных двигателей внутреннего сгорания, малоразмерных турбокомпрессоров, крупногабаритных подшипников паровых турбин. Кроме того, разработанные в ходе проекта методическое и программное обеспечения будут использоваться в образовательном процессе при подготовке студентов по направлению «Эксплуатация транспортно-технологических машин и комплексов» и аспирантов по специальности «Машиностроение».

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- ✓ Концепция моделирования упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений и их систем при нестационарном нагружении;
- ✓ математическая модель динамики и смазывания упругоподатливых гидродинамических трибосопряжений и их систем при нестационарном нагружении;
- ✓ методика моделирования автономного трибосопряжения с упругоподатливым вкладышем в жестком корпусе и перекосом осей подвижного (шип) и неподвижного (подшипник) элементов при статической и динамической нагрузке;
- ✓ алгоритмическое обеспечение моделирования автономного трибосопряжения с упругоподатливым вкладышем в жестком корпусе и перекосом осей подвижного (шип) и неподвижного (подшипник) элементов при статической и динамической нагрузке;
- ✓ программное обеспечение моделирования автономного трибосопряжения с упругоподатливым вкладышем в жестком корпусе и перекосом осей подвижного (шип) и неподвижного (подшипник) элементов при статической и динамической нагрузке;
- ✓ публикации в научных журналах, индексируемых в базе данных Scopus.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

Планируется в дальнейшем использовать результаты проекта при создании и доводке тяжело нагруженных подшипников скольжения поршневых ДВС (заказчик: ООО «ЧТЗ-Уралтрак»), при проектировании опор скольжения турбокомпрессоров (заказчик: АО СКБ Турбина, г. Челябинск, НПО Турботехника, г. Протвино), при совершенствовании крупногабаритных опор скольжения паровых турбин (Ленинградский металлический завод, г. Санкт-Петербург). Кроме того, результаты работы будут использованы при подготовке и переподготовке инженерных кадров двигателестроительных и машиностроительных предприятий, а также в образовательных программах по ГОС нового поколения, по программам бакалавриата, магистратуры и аспирантуры.

РАЗРАБОТКА НАУЧНЫХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ ПРОИЗВОДСТВА БЕССВИНЦОВИСТЫХ ВН-СОДЕРЖАЩИХ ЛЕГКООБРАБАТЫВАЕМЫХ СТАЛЕЙ

Руководитель проекта – кандидат технических наук А.В. Рябов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка составов и стабильных технологий производства нового класса экологически безопасных легкообрабатываемых сталей.

ПУБЛИКАЦИИ

2 научные статьи

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Получение новых экологически чистых легкообрабатываемых марок стали, которые используют для повышения производительности металлорежущих станков; для экономии режущего инструмента; для получения высокой чистоты поверхности; для повышения скорости резания; для механизации процесса уборки стружки без значительного увеличения количества использования легирующих элементов, а также использования специфического дорогостоящего оборудования.
- Интеграция разработанного комплекса решений практически в любое металлургическое предприятие без больших экономических затрат и в короткие сроки, поскольку технология получения стали не требует специфического дорогостоящего оборудования.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Аналитический обзор научных и информационных источников.
- Обоснование выбора оптимального варианта решения задачи.
- Возможные решения задачи и проведение их сравнительной оценки.
- Термодинамические характеристики для систем, содержащих элементы, необходимые для прогнозирования качества и обрабатываемости альтернативных легкообрабатываемых сталей.
- Новый класс альтернативных легкооб-

рабатываемых марок стали.

- Технология производства альтернативных сталей повышенной обрабатываемости на конкретном предприятии.
- Экспериментальные лабораторные образцы альтернативных легкообрабатываемых сталей в виде слитков (заготовок).
- Предложения и рекомендации по промышленному производству альтернативных легкообрабатываемых сталей.
- Результаты изучения влияния конструктивных и технологических факторов на усвоение легирующих элементов и их распределения в стали.
- Изучение влияния нитридов бора на качество и служебные свойства стали (обрабатываемость; механические свойства; фазовые превращения, структура и прокаливаемость; форма существования неметаллических включений, распределение в слитках (заготовках), причины образования дефектов передельной заготовки и сквозной выход годного).
- Сравнительный анализ загрязнённости воздуха в рабочей зоне.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

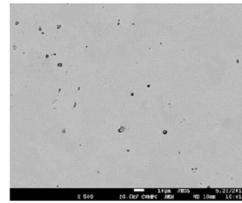
- За рубежом данные исследования будут востребованы в странах с развитым автомобилестроением: Японии, США, странах Евросоюза (Германия, Италия, Франция, Англия и другие), Китае, Южной Корее и ряде других.
- Результаты исследований будут полезны для основных производителей легкообрабатываемых сталей в Российской Федерации: ОАО «Челябинский металлургический комбинат», АО «Златоустовский электрометаллургический завод», ПАО «Надеждинский металлургический завод».

- Результаты проекта могут быть использованы при изготовлении автомобильной техники, выпускаемой на ОАО «Автомобильный завод «УРАЛ», ОАО «ГАЗ», ОАО «УАЗ», ОАО «БАЗ», ПАО «АВТОВАЗ».

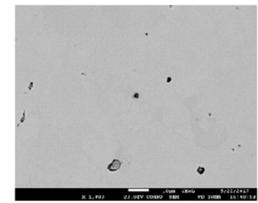
РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

В работе выполнен аналитический обзор научных и информационных источников. В рамках проекта проведено обоснование выбора оптимального варианта решения задачи. Представлены возможные варианты решения задачи и их сравнительная оценка.

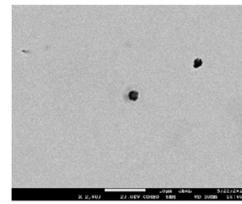
В работе проведены теоретический и практический эксперименты исследования процессов образования и получения неметаллических включений в легкообрабатываемой конструкционной среднеуглеродистой стали. Для моделирования поведения включений использовали программное обеспечение FactSage. В ходе исследования рассчитаны температуры образования и количество оксидов алюминия, нитридов бора, сульфидов марганца, нитридов алюминия. Порядок образования включений в стали: $Al_2O_3 > BN > MnS > AlN$. Предметом исследования являлась литая заготовка стали марки А38ХГМАР, А40ХГНМ, А30ХМР и А45Р. Эксперименты проводили в лабораторной печи индукционного типа. После предварительного раскисления стали первичным алюминием производили легирование стали азотом и бором. Анализ качества проводили по химическому составу, макро- и микроструктуре, характеру и форме неметаллических включений. В матрице металла были получены мелкие равномерно распределенные неметаллические включения нитрида бора. Проведен количественный и качественный анализ распределения нитридов бора в матрице металла. Нитриды бора в структуре металла представлены отдельно и в комплексных соединениях с сульфидом марганца. Морфология включений в основном сферическая. На основании представленных исследований будет получен новый класс альтернативных легкообрабатываемых марок стали.



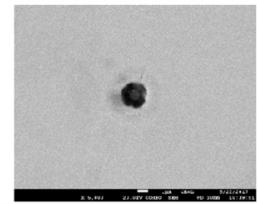
а) x500



б) x1000

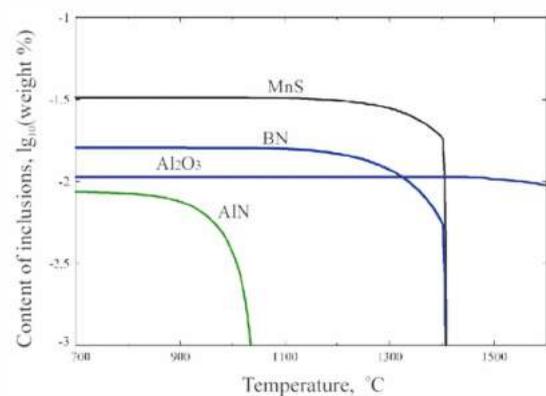


в) x2000

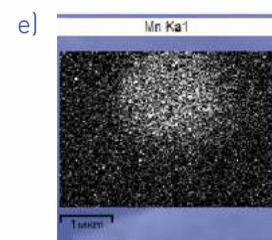
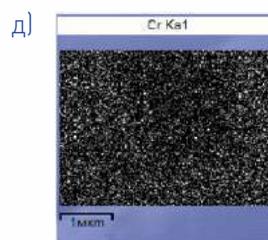
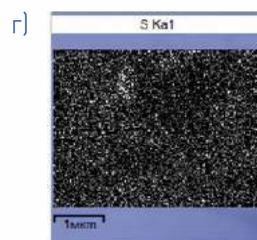
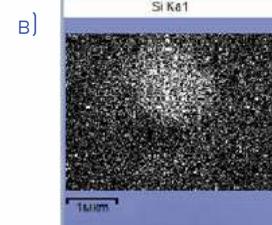
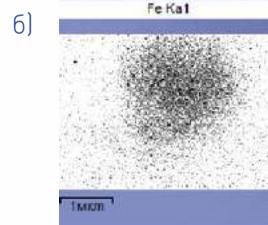
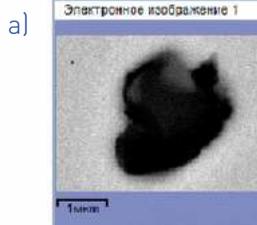


г) x5000

Микроструктура стали А38ХГМР



Моделирование кристаллизации
стали А38ХГМАР при 0,006% В



Включение стали А38ХГМАР: а) в «поглощенных» электронах;
б–е) в характеристическом излучении железа, кремния; серы, хрома и марганца (× 20000)

РАЗРАБОТКА НОВЫХ СПОСОБОВ И ТЕХНОЛОГИЙ СОЗДАНИЯ ИЗДЕЛИЙ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОГО И КОНСТРУКЦИОННОГО НАЗНАЧЕНИЯ ИЗ УГЛЕГРАФИТОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОСРЕДСТВОМ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ДИНАМИЧЕСКОГО ФОРМОВАНИЯ

Руководитель проекта – кандидат технических наук **М.Н. Самодурова**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Отработка технологических приёмов и создание технологий изготовления деталей технических систем из графитопластовых композиций методом высокоскоростного динамического формования.

ПУБЛИКАЦИИ

10 научных статей

2 научных доклада

4 заявки на патент

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья в SCOPUS

2 статьи в Web of Science

ЗАДАЧА ПРОЕКТА

Отработка технологических приемов и создание технологий производства деталей технических систем из графитопластических композиций методом высокоскоростного динамического формования. К изделиям, технологию производства которых планируется разработать, относятся щётки для электродвигателей, детали токосъёмников для электротранспорта и другие подобные изделия, работающие в условиях постоянного трения и к которым при этом предъявляются жесткие требования по механической прочности и электропроводности. Результаты работы над проектом планируется довести до технологий, применимых в реальном производстве для получения продукции, которая по своим потребительским характеристикам существенно превосходит имеющиеся аналоги, и при этом стоимость производства изделий должна быть такой, чтобы использование разработанных технологий было экономически оправданным.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

➤ Рекомендации по оптимизации составов графитопластовых композиций (при необходимости содержащих металлическую составляющую), обеспечивающих после изготовления из них изделий разрабатываемым методом требуемые характеристики (механические, теплофизические, электротехнические и пр.).

- Эскизная конструкторская документация на оборудование для высокоскоростного динамического формования.
- Эскизная конструкторская документация на вспомогательное оборудование для высокоскоростного динамического формования.
- Данные об оптимальных параметрах процессов приготовления композиций, высокоскоростного динамического формования и последующей термообработки, обеспечивающих оптимальные потребительские характеристики создаваемых изделий.
- Результаты изучения свойств полученных материалов и изделий в лабораторных условиях.
- Результаты изучения потребительских свойств полученных изделий в условиях регулярной эксплуатации.
- Лабораторные технологические регламенты, описывающие разработанные технологии.
- Не менее 10 публикаций в отечественных и зарубежных изданиях, индексируемых в Web of Science и Scopus.
- Доклады, посвященные результатам работы на ведущих, наиболее авторитетных международных конференциях.
- Результаты для подготовки и защиты докторской диссертации и двух кандидатских диссертаций.
- Девять объектов интеллектуальной собственности.

Внедрение результатов работ на промышленных предприятиях машиностроительного комплекса РФ приведет к существенному повышению качества деталей из графитопластовых композиций, что в конечном счете положительно скажется на качестве машин и механизмов, в состав которых они будут входить, а также повлияет на расширение сферы применения графитовых деталей при изготовлении различного рода машин и механизмов.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

- Полученные в ходе работы результаты станут важным вкладом в развитие в нашей стране технологий, направленных на использование графита в качестве материала для изготовления деталей машин и механизмов. Проведение планируемых работ прежде всего силами ответственных исследователей в российском исследовательском центре может позволить нашей стране выйти на лидирующие позиции в этой стратегически важной области технологий.
- Ключевым преимуществом разрабатываемых решений, которые должны быть востребованы промышленностью, станет существенное снижение стоимости изготовления изделий на основе графитовых композиций, расширенная возможность управления свойствами и составом материала изделий. Указанные обстоятельства позволяют расширить сферу применения изделий на основе графита и его композиций в качестве деталей различных технических систем.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

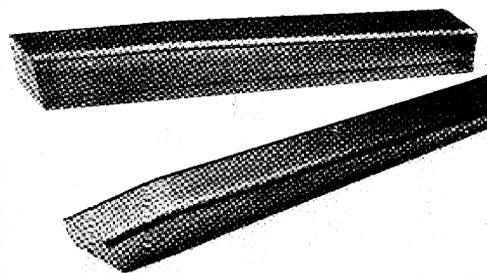
- ☑ Выполнен аналитический обзор имеющейся литературы и патентный поиск с целью уточнения параметров изделий, технологию изготовления которых планируется разработать.
- ☑ Разработаны оптимальные составы графитопластовых композиций, обеспечивающие изготовление из них изделий с требуемыми характеристиками (механические, теплофизические, электротехнические).
- ☑ Выполнены работы по совершенствованию конструкции основного оборудования для высокоскоростного динамического формования.
- ☑ Проведены работы по разработке и созданию вспомогательного оборудования и технологической оснастки для высокоскоростного динамического формования (проектирование технологической оснастки).

ПАРТНЕР ПРОЕКТА

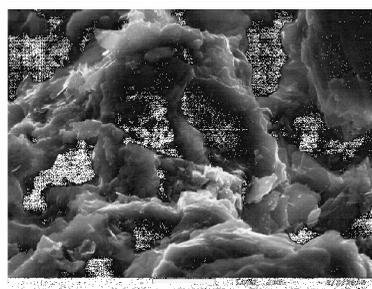
- ЗАО «Региональный инжиниринговый центр аддитивных и лазерных технологий» (г. Челябинск).



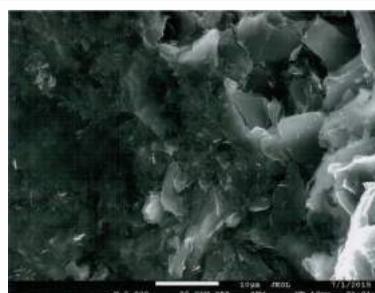
Модель установки



Заготовки вставок для токосъема трамвая



Фрактограмма исследуемой прессовки: скорость 3 м/с, температура 24°C, энергия удара 2247 Дж, плотность 1,76 г/см³



Фрактограмма исследуемой прессовки: скорость 30 мм/с, температура 180°C, плотность 1,54 г/см³



Заготовки вставок для токосъема троллейбуса



Заготовки щеток для электродвигателей электроподвижного состава горэлектротранспорта

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ОЦЕНКИ ХРУПКОЙ И КВАЗИХРУПКОЙ ПРОЧНОСТИ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С КОНЦЕНТРАТОРАМИ НАПРЯЖЕНИЙ ТИПА ДВУГРАННЫЙ УГОЛ

Руководитель проекта – доктор технических наук С.Б. Сапожников

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Создание расчетной оценки прочности элементов сварных конструкций с острыми V-образными концентраторами напряжений.

ПУБЛИКАЦИИ

1 научная
статья

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья
в SCOPUS

ЗАДАЧА ПРОЕКТА

Развитие подходов механики разрушения и получение новых сведений о процессе разрушения сварных конструкций путем совершенствования аппарата прочностных расчетов, применяемого при создании перспективных видов вооружения, военной и специальной техники в трубной отрасли и для решения проблем защиты околоземного пространства.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Практическими результатами работы будут запатентованные программы ЭВМ для расчета прочности элементов сварных конструкций при наличии концентраторов напряжений типа двугранный угол.

Научные результаты смогут быть использованы для проведения прочностных расчетов при наличии острых концентраторов напряжений типа двугранный угол для сварных конструкций.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Практическое применение результатов – повышение надежности расчетных оценок

статической прочности сварных конструкций в областях авиационной и космической техники, корабельных конструкций, наземного и трубопроводного транспорта. Результаты могут использоваться при разработке классификаторов дефектов сварных соединений.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Проведен обзор литературных источников существующих критериев механики разрушения для описания разрушений сварных конструкций при наличии концентраторов напряжений типа двугранного угла для растяжения и изгиба стыкового сварного соединения.

Проведены экспериментальные исследования прочности призматических образцов из органического стекла (ПММА) с v-образными концентраторами (двугранные углы 25, 90 и 120°) различной глубины при статическом трехточечном изгибе.

В конечно-элементных расчетах с использованием нелокального критерия прочности получено, что острый надрез с двугранным углом до 90° ведет к увеличению нагрузки разрушения лишь на 15-20 % по сравнению с трещиноподобным вырезом (угол 25°) и хорошо согласуется с экспериментальными данными. Увеличение двугранного угла

острого надреза с 25° до 120° ведет к повышению нагрузок разрушения в 1,5...2 раза. Исследована морфология поверхности разрушения и показано, что неглубокие вырезы (до 1,5 мм) при изгибе имеют бороздчатую поверхность разрушения (высокая скорость и скачкообразная картина движения трещины), тогда как более глубокие вырезы (2,5...5 мм) характеризуются медленным распространением трещины и гладкой поверхностью разрушения. В работе рассмотрены два подхода к оценке прочности элементов конструкций из хрупкого материала с острыми концентраторами напряжений при трёхточечном изгибе: с использованием нелокальной теории прочности (в вершине острого надреза напряжения усредняются на некоторой базе) и линейной механики разрушения (определяются коэффициенты интенсивности напряжений и степени сингулярности). Широко использован метод конечных элементов (пакет ANSYS Workbench, 2D-постановка). Эти два подхода оказываются связанными анализом напряженного состояния у острых v -образных надрезов с соответствующими аппроксимациями поля напряжений, позволившими на основе оптимизационных процедур найти корректные значения коэффициентов интенсивности напряжений и степеней сингулярности.

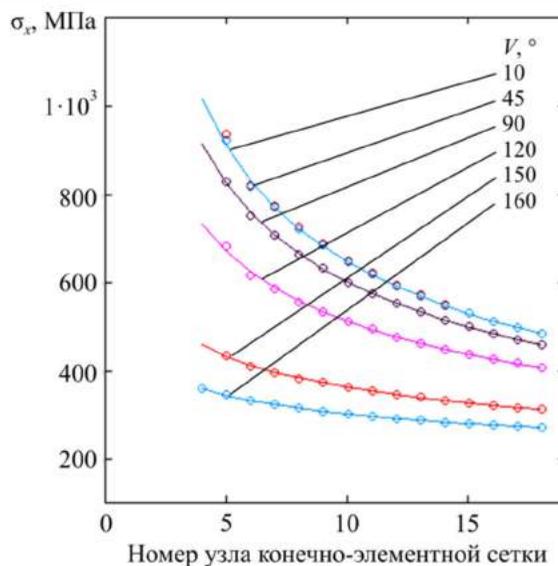
По результатам работы за 2017 год опубликована статья «SCOPUS» DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.04

В целом можно отметить, что, независимо от теории прочности, изменение двугранного угла концентратора напряжений от 0 градусов (трещина) до 90° (прямой угол в вершине концентратора) не приводит к существенному изменению прочности элементов конструкции. Это обстоятельство является значимым для проектирования, производства и эксплуатации сварных конструкций, не учитываемых действующими нормативными документами в области сварки. Часто в практике и проектировании встречаются углы перехода от поверхности шва к поверхности основного металла, близкие к 90° градусам. Повышение объективности и достоверности прочностных оценок при наличии подобных концентраторов напряжений позволит повысить надежность сварных конструкций и их металлоемкость.

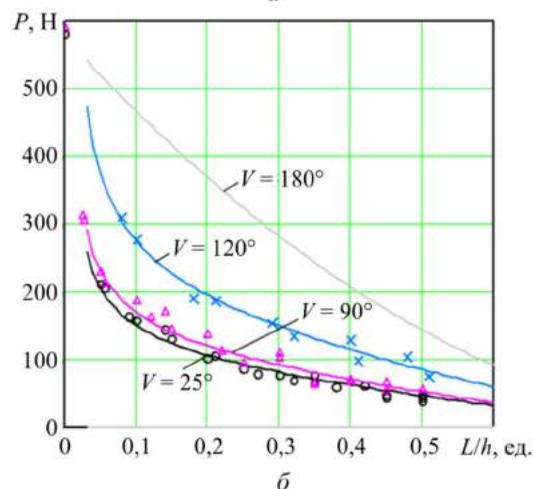
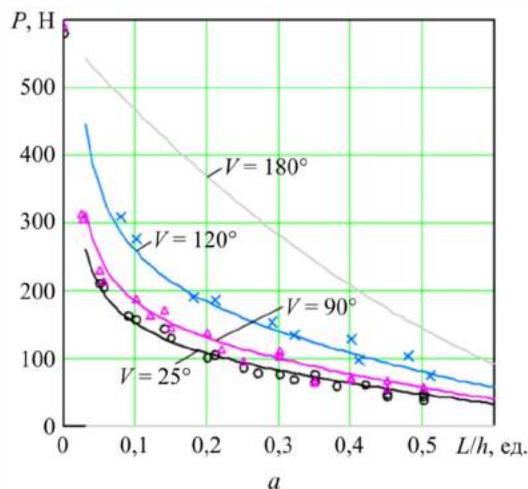
Дальнейшие исследования направлены на изучение квазихрупких разрушений от острых концентраторов при значительных пластических деформациях в устьях, процессах подрастания трещин из устьев, создания, учета сварочных деформаций, универсального инженерного аппарата расчета прочности элементов сварных конструкций.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Работа выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013), соглашения № 02.A03.21.0011.



Примеры распределения напряжений при найденных оптимальных m и K_1^V для образцов с глубиной надреза $L = 5$ мм и разными двугранными углами $v = 10...160^\circ$



Результаты расчета нагрузок разрушения образцов по двухпараметрическому критерию (а) и по линейной механике разрушения (б) в функции глубины выреза

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УПРАВЛЯЕМОЙ ВИБРАЦИИ НА СТАБИЛИЗАЦИЮ ТРЕБУЕМОЙ ГЕОМЕТРИИ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ РАЗМЕРНОМ ДИСПЕРГИРОВАНИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Руководитель проекта – кандидат технических наук С.В. Сергеев

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Формирование научных основ размерного механического диспергирования конденсированных сред, обеспеченного введением в зону разрушения материала расчетного управляемого вибрационного воздействия, для проектирования вибрационных технологий и высокотехнологичного, энергоэффективного оборудования, необходимых на производстве гранулоподобной стружки, волокон и порошков из различных материалов, применяемых главным образом при изготовлении изделий из композитов, в том числе посредством аддитивных технологий, а также при утилизации отходов.

ПУБЛИКАЦИИ

5 научных статей

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья в Scopus

4 статьи в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Разработать и исследовать новые принципы вибрационного диспергирования вязких, хрупких и волокнистых конденсированных сред.
- ➔ Решить задачу моделирования процесса управления формой и размерами частиц при вибрационном диспергировании резанием вязких, раскалыванием хрупких и скользяще-режущим волокнистых материалов с целью стабилизации формы и гранулометрического состава получаемых частиц и проверить адекватность разработанных моделей.
- ➔ Разработать новые способы размерного диспергирования и исследовать их возможности.
- ➔ Разработать методологию и концептуальные основы алгоритмов проектирования станков-вибродиспергаторов нового поколения.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Принципиально новые процессы размерного механического диспергирования конденсированных сред, основанные на так называемом воксельном подходе, обеспеченные путем принудительного введения в зону разрушения материала расчетного управляемого вибрационного воздействия. Такой подход станет научной основой проектирования вибрационных технологий и высокотехнологичного, энергоэффективного оборудования для

размерного диспергирования материалов при производстве гранулоподобной стружки, волокон и порошков из различных материалов, применяемых главным образом при производстве изделий из композитов, в том числе и посредством аддитивных технологий, а также при переработке промышленных и бытовых отходов.

В плане науки:

– во-первых, именно такой подход позволит перейти от традиционного (хаотичного) к новому – высокоорганизованному, то есть упорядоченному и управляемому процессу разрушения вязких, хрупких и волокнистых конденсированных сред, различных по структуре;

– во-вторых, параллельные теоретические и экспериментальные исследования новых способов возбуждения управляемой вибрации и воздействия ее на процесс управляемого диспергирования позволят, с одной стороны, сделать вклад в теорию колебаний (создать математическое описание процессов самовозбуждения и самосинхронизации высокочастотных колебаний и механически модулируемых колебаний). С другой стороны, результаты позволят развить знания в теории вибрационного резания виброударного разрушения и вибрационного истирания материалов.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты уже востребованы и позволят получать дисперсные частицы порошков требуемого качества без изменения их физико-химических характеристик, чего ожидают

производители изделий из порошков, а также переработчики твердых промышленных и бытовых отходов. На основе синтеза полученных новых знаний в областях вибрационной механики (теории резания и теории разрушения) будут сформулированы алгоритмы расчета кинематических связей станков-диспергаторов нового поколения, что очень актуально в условиях импортозамещения.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Впервые изучен физический механизм управления формой и размером дисперсных частиц на основе воксельного подхода при вибрационно-фрезерном диспергировании вязких материалов.

Разработаны математические модели, описывающие процесс формирования срезаемых слоев (то есть гранулоподобной стружки) с требуемыми размерами и формой, регулирование которых обеспечивается за счет сообщения принудительных колебаний сложной формы рабочему органу (инструменту) в зоне диспергирования.

Математическое описание процесса с одной стороны опирается на традиционные представления теории резания и теории колебаний. С другой стороны, процесс формирования поверхностей дисперсных частиц посредством управляемых виброперемещений режущей части математически описан как нахождение частей целого посредством аппарата математической логики. Математическая модель, состоящая из логических предикатов для реальных поверхностей получаемых дисперсных частиц, отделенных от массива материала каждым вибрирующим режущим лезвием, позволит посредством современных программных продуктов предварительно вычислять не только размеры и форму получаемых частиц, но и их элементарный объем. На основе полученных предикатов критериально выведены теоретические зависимости для вычисления требуемых геометрических размеров, параметров формы и объемов дисперсных частиц с учетом сложных траекторий принудительных виброперемещений режущих лезвий.

Для применения в диспергаторах нового поколения в качестве вибрационных приводов главного движения предлагается использовать самосинхронизирующиеся высокочастотные виброприводы (патенты РФ № 2347627, 2410166 и др.). Впервые получены математические выражения для определения амплитуд, частот и форм вибрационных полей (через радиус-векторы генерируемых колебаний). Определены условия, при которых возможна самосинхронизация колебаний.

Разработана методология проектирования диспергаторов нового поколения для размерного диспергирования вязких материалов, в основу которой положены: принцип стабилизации размеров и формы дисперсных частиц; воксельный принцип, заключающийся в том, что размеры и форма получаемых при измельчении дисперсных частиц должны обеспечить максимально «тесную», то есть селективную укладку этих частиц при формировании из них изделия; принцип управляемости гранулометрическим составом дисперсных частиц путем изменения параметров колебаний рабочих органов станков-диспергаторов. Сформулированы концептуальные основы алгоритмов проектирования и

настройки вибрационно-фрезерных диспергаторов.

Размерное механическое диспергирование – это принципиально новое научное направление, которое еще только формируется под воздействием спроса производителей порошков и волокон и переработчиков твердых промышленных и бытовых отходов. Новые математические модели дали возможность осуществлять компьютерное прогнозное моделирование процесса получения дисперсных частиц, а это открывает путь к созданию программных станков вибродиспергаторов вязких сред.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

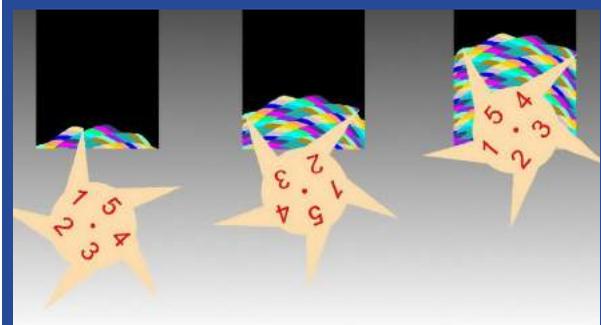
- ⇨ ООО «Гранулятор» г. Златоуст;
- ⇨ ЗАО «Монолит» г. Златоуст;
- ⇨ ООО «Газстройинвест» г. Уфа;
- ⇨ АО «Южно-Уральский специализированный центр утилизации», г. Миасс.



Возможные схемы реализации высокочастотных виброприводов (патент 2410199)



Дисперсные частицы различных материалов



Пример анимации процесса формирования частиц требуемой геометрии

МОДЕЛИ, МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ БОЛЬШИХ ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА, ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА И ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Руководитель проекта – доктор физико-математических наук Л.Б. Соколинский

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка, исследование и внедрение моделей, методов и алгоритмов, позволяющих эффективно работать с большими данными в задачах искусственного интеллекта с использованием высокопроизводительных кластерных вычислительных систем и облачных технологий.

ПУБЛИКАЦИИ

8 научных статей

8 научных докладов

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

7 статей в SCOPUS

7 статей в Web of Science

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- Выделение и идентификация речи человека.
- Реализация фреймворк «Мастер-работчие» в виде библиотеки на языке C++.
- Разработка и реализация методов параллельной обработки сверхбольших массивов многомерных данных на кластерных вычислительных системах с мультиядерными процессорами. Интеграция разработанных алгоритмов в свободную СУБД PostgreSQL.
- Разработка и реализация имитационной модели обработки больших данных с использованием колоночного представления на кластерных вычислительных системах с мультиядерными процессорами. Выполнение с помощью разработанной модели анализа перспективных многопроцессорных архитектур в контексте обработки больших данных.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Облачный сервис по выделению и идентификации речи человека и отделению ее от фоновых шумов.
- Облачный сервис для организации колоночного сопроцессора баз данных; плагин для свободной СУБД PostgreSQL для подключения к колоночному сопроцессору баз данных.
- Библиотека для разработки масштабируемых параллельных программ на базе фреймворка «Мастер-работчие» для кластерных вычислительных систем.

- Плагин для свободной СУБД PostgreSQL, позволяющий обрабатывать большие массивы многомерных данных.
- Симулятор BDP (Big Data Processing) позволит разработчикам суперкомпьютеров выбирать оптимальные архитектурные решения для решения задач обработки больших данных.

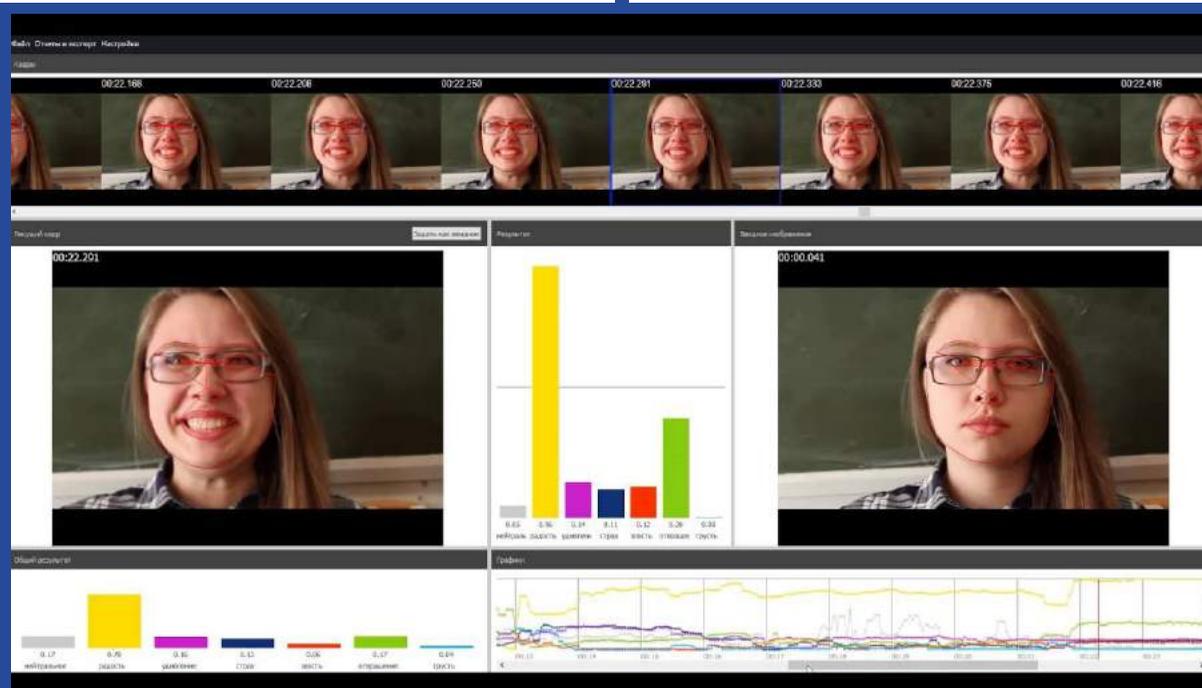
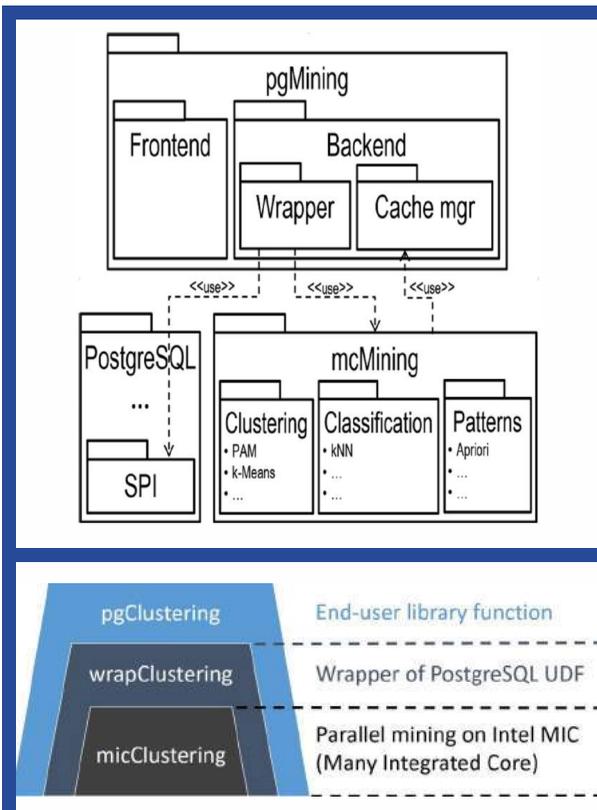
ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

- Облачный сервис по выделению и идентификации речи человека и отделению ее от фоновых шумов может использоваться для создания интеллектуальных слуховых аппаратов нового поколения.
- Облачный сервис для организации колоночного сопроцессора баз данных и плагин для свободной СУБД PostgreSQL для подключения к колоночному сопроцессору баз данных могут использоваться для создания информационных систем, обрабатывающих сверхбольшие объемы данных (электронная коммерция, здравоохранение, системы поддержки принятия решений, социальные сети, поисковые системы и др.).
- Библиотека для разработки масштабируемых параллельных программ на базе фреймворка «Мастер-работчие» для кластерных вычислительных систем может использоваться научными организациями и конструкторскими бюро для суперкомпьютерного моделирования.
- Плагин для свободной СУБД PostgreSQL, позволяющий обрабатывать большие массивы многомерных данных, может использоваться организациями, занимающимися картографией и георазведкой.

- Симулятор BDP (Big Data Processing) позволит разработчикам суперкомпьютеров выбирать оптимальные архитектурные решения для решения задач обработки больших данных.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- Описана дискретная модель дескриптора голоса человека.
- Выполнена программная реализация нейронной сети для выделения и идентификации голоса человека.
- Сформирована библиотека функций, реализующих языки для колоночных индексов, разработаны алгоритмы создания колоночных индексов на SQL-сервере и пересылки их на колоночный сопроцессор и алгоритмы обновления колоночных индексов.
- Разработана математическая модель параллельных вычислений на распределенной памяти на основе фреймворка «Мастер-рабочие».
- Выведена формула зависимости масштабирования программы от соотношения затрат на вычисления и передачу данных.



```

Detection Result:
JSON:
[
  {
    "FaceRectangle": {
      "Left": 406,
      "Top": 222,
      "Width": 393,
      "Height": 393
    },
    "Scores": {
      "Anger": 0.000397396216,
      "Contempt": 0.00145808281,
      "Disgust": 0.009788709,
      "Fear": 0.105373211,
      "Happiness": 0.119125396,
      "Neutral": 0.019883167,
      "Sadness": 0.686141968,
      "Surprise": 0.0578320622
    }
  }
]

```

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПОСТРОЕНИЯ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ РАСХОДОМЕРОВ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ РАСЧЕТНЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Руководитель проекта – кандидат технических наук П.А. Тараненко

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка связанной математической модели расходомера, включающей в себя подсистемы управления и обработки сигналов, механическую колебательную подсистему и модель текущей среды для совершенствования существующих и повышения эффективности разработки новых расходомерных устройств.

ПУБЛИКАЦИИ

1 научная
статья

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

1 статья
в SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Разработка расчетной модели расходомера с текущей средой.
- ➔ Экспериментальное исследование динамических характеристик расходомера с текущей средой при его вынужденных колебаниях в зависимости от конструктивных и режимных параметров системы.
- ➔ Решение электромагнитной задачи, связывающей перемещения и скорости механической системы при ее колебаниях с электрическим сигналом, вырабатываемым сенсором.
- ➔ Разработка междисциплинарной функциональной модели расходомера с текущей средой в пакете имитационного моделирования с учетом моделей системы обработки сигнала и системы управления.
- ➔ Стендовые испытания расходомера с текущей средой.
- ➔ Разработка (на основе результатов расчетов и экспериментов) рекомендаций, позволяющих повысить точность измерения расхода текущей среды.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Связанная функциональная модель расходомера, включающая в себя подсистемы управления и обработки сигналов, механическую колебательную подсистему и модель текущей среды и позволяющая предсказывать ее отклик (разность фаз механических колебаний) при изменении конструктивных и

режимных параметров (давления, температуры, расхода, плотности, внешней вибрации, условий закрепления).

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты исследования предназначены для предприятий-производителей расходомеров и рекомендованы к использованию для совершенствования существующих и разработки новых измерительных устройств. Разрабатываемая методика предназначена для применения при разработке систем, содержащих текущую среду (жидкость или газ), использующихся в нефтегазовой промышленности

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

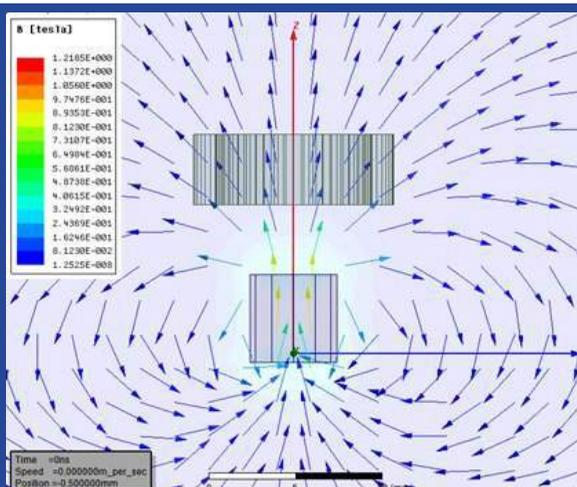
- ☑ Разработана балочная конечноэлементная модель криволинейной трубки расходомера для расчета ее вынужденных колебаний с учетом воздействия текущей однородной среды.
- ☑ Выполнено расчетное исследование зависимости собственных частот расходомера от его конструктивных параметров.
- ☑ Выполнен экспериментальный модальный анализ расходомера.
- ☑ Определены экспериментальные передаточные функции расходомера.
- ☑ Найденные экспериментальные передаточные функции расходомера верифицированы результатами

- численно-аналитического расчета.
- ☑ Разработан алгоритм передачи собственных частот и форм в пакет имитационного моделирования.
 - ☑ Выполнено расчетно-экспериментальное

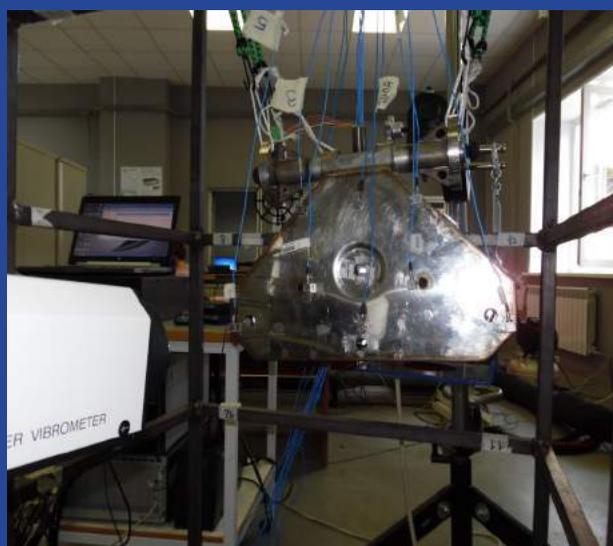
исследование влияния жесткостей присоединенных трубопроводов на сдвиг фаз измерительных катушек расходомера без жидкости.



Измерение экспериментальных передаточных функций



Распределение магнитных силовых линий на центральной катушке



Определение динамических характеристик расходомера



Конечно-элементная модель расходомера



Испытания расходомера на гидропробивочном стенде

РАЗРАБОТКА МЕТОДОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ В УСЛОВИЯХ СТОХАСТИЧНОЙ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

Руководитель проекта – кандидат экономических наук Т.А. Худякова

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Разработка теоретических положений и практических методов управления оптимальной траекторией устойчивого и эффективного развития промышленных предприятий в условиях вариабельной экономики.

ПУБЛИКАЦИИ

28 научных статей

5 научных докладов

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в SCOPUS

6 статей в Web of Science

21 статья в РИНЦ

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Разработка концептуальных положений и принципов управления промышленным предприятием с позиции устойчивого и эффективного развития в условиях стохастичной внешней среды, обуславливающей динамику входных параметров миниэкономической системы.
- ➔ Анализ влияния стохастичной среды на траекторию устойчивого развития российских промышленных предприятий в контексте финансового, экономического и финансово-экономического подходов к определению устойчивости предприятия. Выявление факторов, препятствующих построению оптимальной траектории устойчивого развития российских промышленных предприятий.
- ➔ Анализ влияния смены общественных парадигм на концептуальные подходы к управлению устойчивым и эффективным развитием предприятия.
- ➔ Разработка методических подходов к управлению оптимальной траекторией устойчивого и эффективного развития хозяйствующего субъекта на основе принципов целеполагания и целеориентированности.
- ➔ Разработка комплексной модели управления оптимальной траекторией устойчивого и эффективного развития российских промышленных предприятий в условиях стохастичности внешней среды.
- ➔ Разработка методологических подходов, включающих в себя разработку экономико-математических моделей, к опреде-

лению эффективности процесса управления в контексте построения оптимальной траектории устойчивого и эффективного развития хозяйствующего субъекта в разрезе целеполагания.

- ➔ Прогнозирование влияния стохастичной среды функционирования на стоимость предприятия в разрезе авторского подхода к устойчивому развитию хозяйствующего субъекта.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Полученные и ожидаемые на дальнейших этапах реализации проекта результаты исследования будут доведены до уровня конкретных практических рекомендаций и могут быть использованы при формировании механизмов устойчивого развития российских предприятий в условиях флуктуационных возмущений. Это позволит, в частности, повысить финансово-экономическую устойчивость субъектов экономики в разрезе целеполагания, а следовательно, повысить уровень резистентности кризису российской экономики.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

На данном этапе проекта разработаны концептуальные положения и

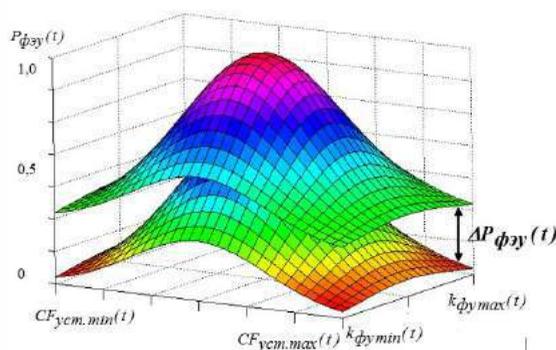
принципы управления промышленным предприятием с позиции устойчивого и эффективного развития в условиях стохастической внешней среды. Выявлено и количественно оценено влияние варибельной среды на траекторию устойчивого развития российских промышленных предприятий. Проведен критический анализ, позволивший выявить влияние смены общественных парадигм на концептуальные подходы к управлению устойчивым и эффективным развитием предприятия.

Результаты исследования докладывались на международных конференциях, входящих в базы данных Scopus и Web of Science, и используются в учебном процессе в рамках магистерской программы «Управление устойчивым развитием современной корпорации».

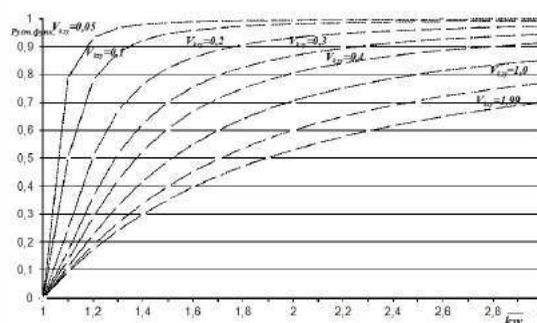
Кроме того, полученные теоретические результаты будут включены в состав международной энциклопедии по устойчивому менеджменту (Encyclopaedia of Sustainable Management), планируемой к изданию в 2018 году London Metropolitan University совместно с издательством Springer International Publishing AG.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

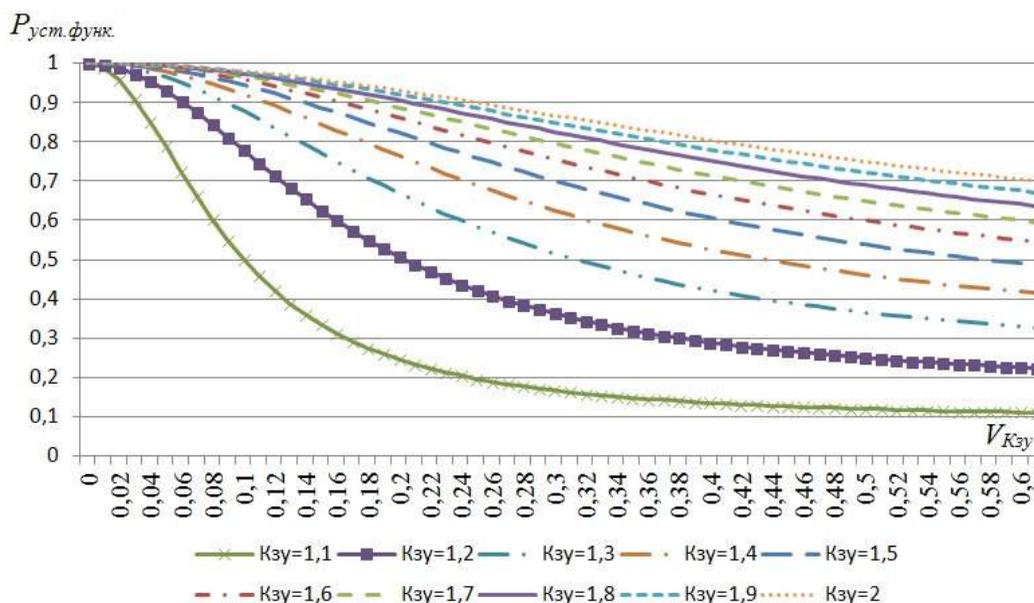
- London Metropolitan University (Великобритания);
- Konstantin Preslavsky University of Shumen (Болгария);
- Научно-исследовательский институт регионального развития (Караганда, Казахстан);
- Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (Россия);
- Юго-Западный государственный университет (Россия).



Графическая интерпретация оценки результативности управления устойчивым развитием предприятия



Зависимость вероятности устойчивого функционирования мини-экономической системы от среднего значения коэффициента запаса устойчивости



Зависимость вероятности устойчивого функционирования промышленного предприятия от коэффициента вариации запаса устойчивости

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ СЕРТОНИНЕРГИЧЕСКИХ НЕЙРОНОВ ПРИ СИНДРОМЕ ПОСТТРАВМАТИЧЕСКОГО СТРЕССОРНОГО РАССТРОЙСТВА

Руководитель проекта – доктор медицинских наук **О.Б. Цейликман**

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Изучение состояния серотонинергических нейронов при синдроме посттравматических стрессорных расстройств (ПТСР) для выяснения механизмов сдерживания этого заболевания и эффективной активации этих механизмов для коррекции ПТСР.

ПУБЛИКАЦИИ

3 научные статьи

1 научный доклад

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

3 статьи в SCOPUS

2 статьи в Web of Science

ЗАДАЧА ПРОЕКТА

Решение проблемы фармакологической коррекции ПТСР ингибиторами обратного захвата серотонина и объяснение природы сниженной агрессивности при экспериментальном ПТСР.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- ➔ Определение характера влияния ПТСР на активность серотонинергических нейронов в головном мозге. Проведение сопоставления между уровнем активности серотонинергических нейронов и обменом серотонина в гиппокампе, гипоталамусе, префронтальной коре, таламусе, промежуточном мозге.
- ➔ Определение корреляций между уровнем активности серотонинергических нейронов и характером поведенческих расстройств при ПТСР.
- ➔ Раскрытие механизмов сдерживания агрессивного поведения при ПТСР.
- ➔ Проверка возможности экспериментальной коррекции ПТСР новыми веществами, синтезированными в УрО РАН, действующими на серотонинергическую систему.
- ➔ Выполнение методом магнитно-резонансной спектроскопии исследования in vivo баланса между тормозными (ГАМК) и возбуждающими медиаторами (глутамат) в гиппокампе, стриатуме и миндалине в зависимости от уровня активности серотонинергической системы.

- ➔ Выявление критических точек развития ПТСР, в которых произойдут необратимые изменения обмена серотонина.
- ➔ Проверка возможности коррекции работы серотонинергических нейронов гипоксическими тренировками. Ожидается, что характер влияния ПТСР на уровень серотонина должен определяться продолжительностью воздействия и уровнем микросомального окисления.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Проект может найти применение для оптимизации фармакологической коррекции ПТСР. На основании полученных результатов возможна разработка более эффективных лекарственных препаратов по сравнению с имеющимися аналогами.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

- ☑ Впервые установлена активация серотонинергических нейронов при ПТСР. Проведено сопоставление между уровнем активности серотонинергических нейронов и обменом серотонина в гиппокампе, гипоталамусе, префронтальной коре, таламусе, промежуточном мозге.
- ☑ Определены корреляции между уровнем активности серотонинергических нейронов и характером поведенческих расстройств при ПТСР.

- ☑ Раскрыты механизмы сдерживания агрессивного поведения при ПТСР.

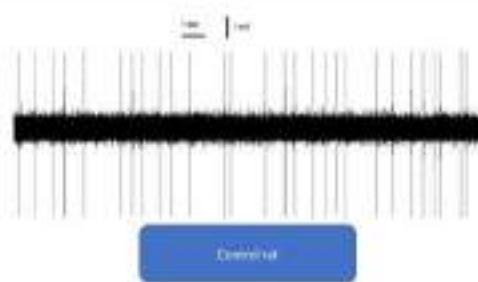
ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Eliyahu Dremencov PhD, Senior Researcher, Institute of Molecular Physiology and Genetics, Slovak
- Доктор биологических наук М.В. Кондашевская, руководитель группы функциональной морфологии стресса Института морфологии человека РАНХ
- Fred Downey Professor Department of Integrative Physiology, University of North Texas Health Science Center at Fort Worth
- Daniel Fishman PhD Senior Researcher – Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva, Israel



Эффект хронического стресса на 5-НТ нейроны

* $p < 0,05$, two-tailed Student's t-test, $n = 33$ neurons from 3 control and 11 neurons from 3 stressed rats



Firing rate 1.25 Hz



Firing rate 4.47 Hz

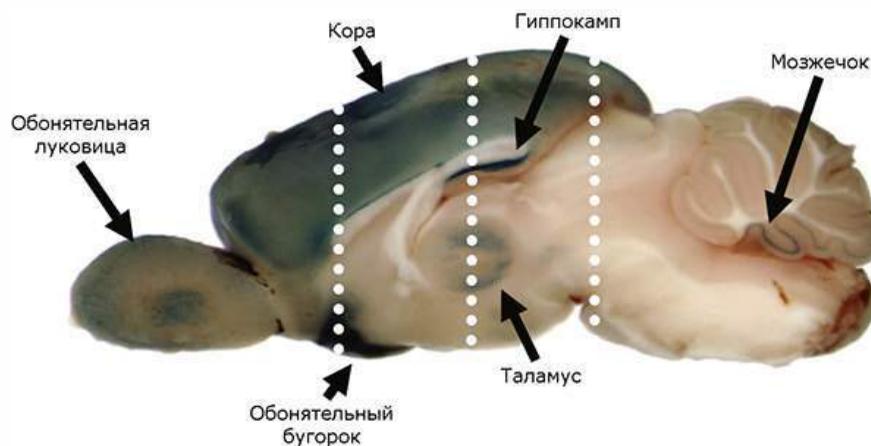
Репрезентативная запись контрольных и стрессированных крыс



Модель ПТСР «Запах хищника»



Исследование серотонинергических нейронов у крыс



Исследуемые структуры головного мозга крысы

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ СИНТЕЗА ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ

Руководитель проекта – доктор химических наук О.К. Шарутина

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Развитие методов синтеза и установление строения органических соединений сурьмы и висмута, а также комплексов металлов платиновой группы как полупродуктов и материалов с практически важными свойствами.

ПУБЛИКАЦИИ

16 научных статей

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

16 статей в Web of Science

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

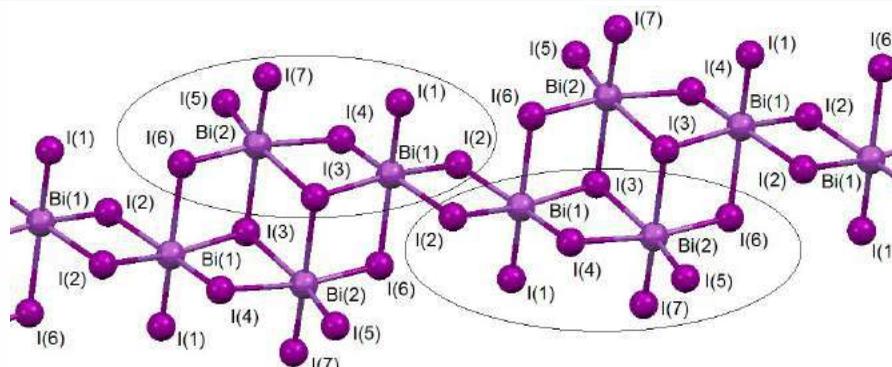
Результатом исследования методов синтеза элементоорганических и комплексных соединений будут надежные методики, позволяющие получать соединения заданного строения с высоким выходом и высокой степенью чистоты, которые могут быть использованы в научных профильных российских и зарубежных лабораториях. Установление особенностей молекулярных и кристаллических структур вновь синтезированных соединений углубят теоретические представления о природе химической связи и межмолекулярных взаимодействий, расширят многообразие структур международного Кембриджского банка данных (CCDC) и станут доступны мировому научному сообществу. Изучение свойств новых соединений существенно раздвинет границы их применения в различных областях химии, в частности в тонком органическом синтезе и катализе. Результаты научных исследований будут использованы в учебном процессе при изучении курсов «Основы химии элементоорганических соединений», «Методы элементоорганической химии» (лекции и лабораторный практикум), «Рентгеноструктурный анализ» (лабораторный практикум), при выполнении курсовых и выпускных квалификационных работ студентами бакалавриата и магистратуры, при прохождении научно-исследовательской практики.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

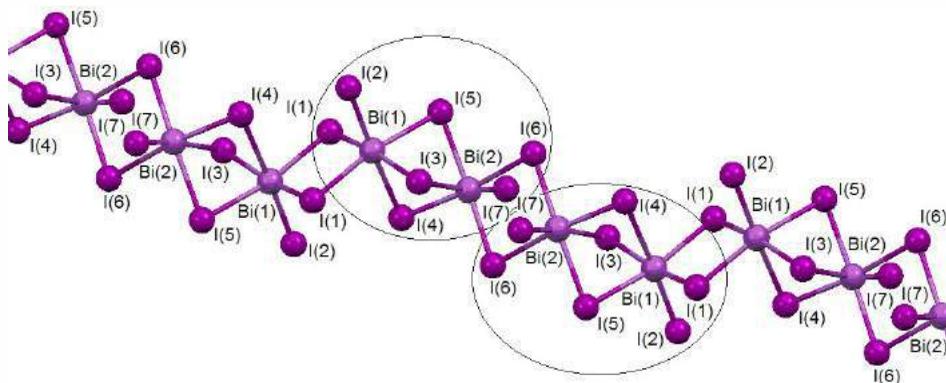
Возможность практического использования результатов проекта связана с выявлением биохимической активности полученных элементоорганических соединений, которая уже обнаружена для производных пятивалентной сурьмы и комплексов металлов платиновой группы (например, высокая противоопухолевая активность).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

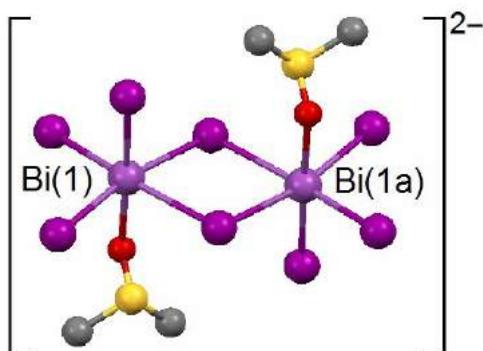
- ☑ Впервые по реакции окислительного присоединения синтезированы молекулярные трехъядерные соединения сурьмы с чередованием связей $-Sb-O-Sb-O-Sb-$.
- ☑ Синтезированы неизвестные ранее ряды дикарбоксилатов, диароксидов, диоксиматов триарилсурьмы, содержащих электроотрицательные атомы фтора в ароматических кольцах. Методом рентгеноструктурного анализа установлены особенности их строения.
- ☑ Отработаны методики синтеза соединений высококоординированных сурьмы и висмута с различными полиидентатными лигандами. Установлено, что степень ассоциации $VI-,I-$ содержащих анионов в комплексах с элементоорганическими катионами определяется не только мольным соотношением реагентов, но и природой растворителя.
- ☑ Синтезировано около 80 неизвестных ранее элементоорганических соединений и комплексов, строение которых установлено методом рентгеноструктурного анализа, и структурные данные депонированы в международном банке Cambridge Crystallographic Data Center.



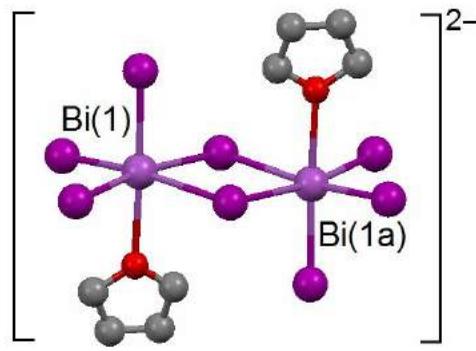
Строение аниона $[\text{Bi}_2\text{I}_7]_n^{n-}$ в комплексе $[\text{Bu}_4\text{P}]_n^+[\text{Bi}_2\text{I}_7]_n^{n-}$, полученном в тетрагидрофане



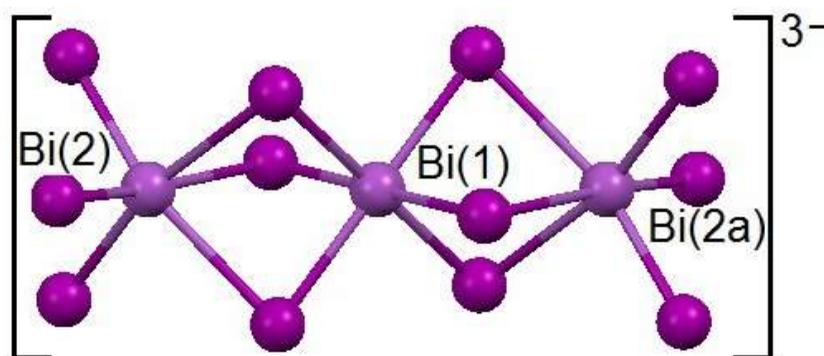
Строение аниона $[\text{Bi}_2\text{I}_7]_n^{n-}$ в комплексах $[\text{p-Tol}_4\text{P}]_n^+[\text{Bi}_2\text{I}_7]_n^{n-}$ и $[\text{p-Tol}_4\text{Sb}]_n^+[\text{Bi}_2\text{I}_7]_n^{n-}$, полученных в ацетоне



Строение аниона в комплексах $[\text{Ph}_4\text{P}]_2^{+2} \text{trans-}[\text{Bi}_2\text{I}_8(\text{dmsO})_2]^{2-}$ и $[\text{p-Tol}_4\text{P}]_2^{+2} \text{trans-}[\text{Bi}_2\text{I}_8(\text{dmsO})_2]^{2-}$, полученных в диметилсульфиде



Строение аниона $\text{trans-}[\text{Bi}_2\text{I}_8(\text{THF})_2]^{2-}$ в комплексах $[\text{p-Tol}_4\text{P}]_2^{+2} \text{trans-}[\text{Bi}_2\text{I}_8(\text{THF})_2]^{2-}$ и $[\text{p-Tol}_4\text{Sb}]_2^{+2} \text{trans-}[\text{Bi}_2\text{I}_8(\text{THF})_2]^{2-}$, полученных в тетрагидрофане



Строение аниона $[\text{Bi}_3\text{I}_{12}]^{3-}$ в комплексах $[\text{p-Tol}_4\text{P}]_3^+[\text{Bi}_3\text{I}_{12}]^{3-}$ и $[\text{p-Tol}_4\text{Sb}]_3^+[\text{Bi}_3\text{I}_{12}]^{3-}$, полученных в 2-этоксизтанолe

ВОЗРАСТНЫЕ ОСОБЕННОСТИ СИСТЕМОГЕНЕЗА В АДАПТАЦИИ К СПЕЦИФИЧЕСКИМ НАГРУЗКАМ СПОРТСМЕНОВ СИТУАТИВНЫХ ВИДОВ СПОРТА (ФИЗИОЛОГИЧЕСКИЕ И ПСИХОФИЗИОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ)

Руководитель проекта – доктор биологических наук В.В. Эрлих

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Исследование возрастных физиологических и психофизиологических особенностей системогенеза организма спортсменов ситуативных видов спорта при адаптации к специфическим условиям спортивной деятельности.

ПУБЛИКАЦИИ

2 монографии

5 научных статей

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

5 статей в WoS/ SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Выявление возрастных особенностей развития и совершенствования нейродинамических, функциональных систем при адаптации к специфической деятельности спортсменов ситуативных видов спорта.
- ➔ Выявление возрастных особенностей психологической адаптации спортсменов ситуативных видов спорта к специфическим условиям тренировочной и соревновательной деятельности.
- ➔ Определение возрастных физиологических и психофизиологических особенностей системогенеза в адаптации к специфическим условиям спортивной деятельности ситуативных видов спорта.
- ➔ Разработка и апробация неинвазивных способов оценки функционального состояния и уровня функциональной подготовленности спортсменов различного возраста, занимающихся ситуативными видами спорта.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

Новые интегративные сведения об особенностях системогенеза важнейших функциональных систем, обеспечивающих адаптацию организма спортсменов в наиболее

сложных по нейродинамическому и психическому компонентам соревновательного упражнения видам спорта. Разработка и апробирование неинвазивных способов оценки функционального состояния и уровня функциональной подготовленности спортсменов ситуативных видов спорта (игровые виды спорта, единоборства) разного возраста и уровня квалификации.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Результаты реализации проекта должны быть положены в основу дальнейших теоретико-практических разработок в области возрастной физиологии, психофизиологии и нейрофизиологии спорта и экстремальных видов деятельности. Разработанные способы оценки функционального состояния и уровня функциональной подготовленности спортсменов с учетом вида спорта и возраста могут быть использованы для разработки новых программно-аппаратных продуктов федеральных проектов «NeuroNet» и «HealthNet».

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Была проведена систематизация базы данных, полученных в 2009-2016 гг. Исследования позволили выявить особенности адаптации спортсменов,

специализирующихся в игровых видах спорта (на примере хоккея с шайбой), и роль спортивного отбора в данных процессах. Определены возрастные периоды напряжения адаптации организма к специфическим нагрузкам, происходящим на фоне изменения антропометрического профиля хоккеистов предпубертатного и пубертатного возраста. Спортсмены с большей экономизацией регуляторных процессов вегетативной нервной системы в критические периоды 13 лет и 15 лет в дальнейшем имеют лучшие перспективы развития профессиональной карьеры. Адаптивные резервы вегетативной регуляции хоккеистов на протяжении всего подросткового периода развития отличаются относительно низкими абсолютными и относительными значениями.

Выявлены психологические и психомоторные особенности элитных хоккеистов 15–16 лет и динамика изменений психофизиологических показателей в годовом периоде подготовки. Впервые определены особенности организации функциональных систем спортсменов в зависимости от типа вегетативной регуляции.

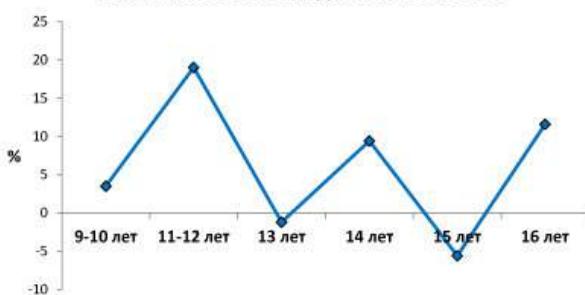
Определены специфические критерии оценки функционального состояния и уровня функциональной подготовленности спортсменов ситуативных видов спорта.

Результаты представлены в пяти статьях, индексируемых Web of Science и Scopus, а также в главе монографии «Фундаментальные и прикладные аспекты работоспособности, реактивности и регуляции организма спортсменов в системе спортивной подготовки (питание, пищеварение и энергообеспечение)» (Изд-во ЮУрГУ, 2017 г).

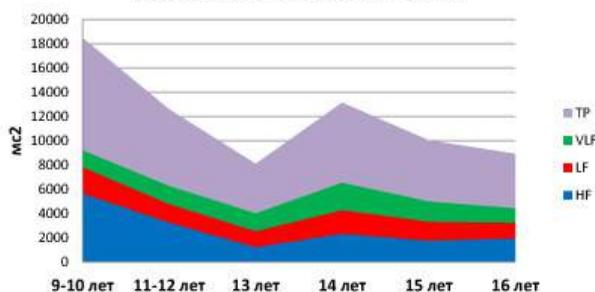
ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Управление по физической культуре, спорту и туризму Администрации города Челябинска,
- СШОР «Трактор»,
- Учебный центр олимпийской подготовки по дзюдо Челябинской области,
- СШОР «Локомотив» по дзюдо г. Челябинска и др.

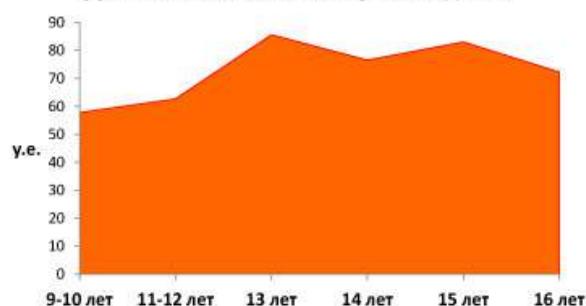
Темпы изменения индекса массы тела



Спектральный анализ показателей variability ритма сердца



Динамика изменения стресс-индекса



ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИНТЕНСИВНЫХ ПОТОКОВ КОРПУСКУЛЯРНОГО И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С КОМПОЗИЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ НА ОСНОВЕ МИКРО- И НАНОПОРОШКОВ

Руководитель проекта – доктор физико-математических наук А.П. Яловец

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Экспериментальное и теоретическое исследование воздействия интенсивных потоков корпускулярного и электромагнитного излучения на композиционные материалы на основе микро- и нанопорошков для разработки новых эффективных методов создания перспективных материалов.

ПУБЛИКАЦИИ

6 научных статей

3 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

6 статей в SCOPUS

ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

- ➔ Разработка экспериментальных методов формирования покрытий на поверхности различных материалов, включая микропорошки, и модификация свойств этих покрытий радиационными методами.
- ➔ Экспериментальное исследование свойств покрытий и материалов, полученных методом селективного лазерного спекания.
- ➔ Численное исследование формирования полей остаточных напряжений в системе пленка-подложка после радиационного воздействия.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

На основе теоретических и экспериментальных исследований будут получены закономерности воздействия интенсивных потоков корпускулярного, электромагнитного излучений и потоков плазмы на металлы и различного рода дисперсные среды.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Проведенные экспериментальные и теоретические исследования представляют научную базу для создания перспективных функциональных материалов.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВА- ТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ 2017 г.

- ☑ В результате теоретических и экспериментальных исследований установлены механизмы, отвечающие за формирование рельефа поверхности мишени при воздействии интенсивного плазменного потока. Показано, что формирование макрократера на поверхности облучаемой мишени, диаметр которого сопоставим с размерами плазменного пучка (рис.1, область 1), есть результат развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова на границе плазменный поток-расплава. Фрагментация поверхности расплава с образованием структур ~ 400x800 мкм (рис.1, область 2) обусловлена быстрым ростом упругой энергии в растекающемся по поверхности мишени расплаве за счет возмущения поля скоростей, вызванного торможением расплава вследствие его охлаждения. Сглаживание микрорельефа на масштабах отдельного фрагмента до значения шероховатости ~ 0.5 мкм обусловлено совместным действием капиллярных сил, вязкости и сил инерции.
- ☑ Исследован процесс получения металлматричного композиционного материала Cu-Al₂O₃ с применением технологии селективного лазерного сплавления (SLM). Полученный композиционный материал имеет повышенную твердость в сравнении с медью, соответственно 61.2 и 45 по Бринеллю. Данный материал может использоваться там, где требуется высокая электропроводность или

теплопроводность в сочетании с высокой твердостью и износостойкостью, кроме того, имеются перспективы улучшения эксплуатационных свойств меди при повышенных температурах. В качестве исходного сырья использовался сферический порошок меди фракцией 15-50 мкм (рис. 2, а), полученный распылением в газовой струе на установке УРМ-001 производства ЮУрГУ, и порошок оксида алюминия, содержащий как крупные частицы до 50 мкм, так и мелкие до 1 мкм (рис. 2, б). Полученный композиционный порошок состоял из частиц меди, покрытых мелкими частицами оксида алюминия (рис. 2, в). Далее этот порошок использовался для получения композиционного материала методом SLM на машине Sinterstation® Pro DM125. Структура полученного материала представлена на рис. 2, г. Упрочняющая керамическая фаза распределена преимущественно равномерно по объему медной матрицы.

✓ Впервые теоретически установлено, что при радиационной обработке увеличение шероховатости материала подложки приводит к увеличению адгезии материала пленки за счет уменьшения остаточных растягивающих напряжений на границе пленка-подложка. Данный вывод подтвержден экспериментами, в которых показано, что предварительная обработка мишени компрессионными плазменными потоками или электронными пучками в закритическом режиме приводит к увеличению шероховатости подложки и, как следствие, к улучшению адгезии.

ПАРТНЕРЫ ПРОЕКТА

- Институт электрофизики УрО РАН (Екатеринбург),
- Институт сильноточной электроники СО РАН (Томск),
- Томский политехнический университет (НИУ),
- Государственный университет Республики Беларусь (Минск).

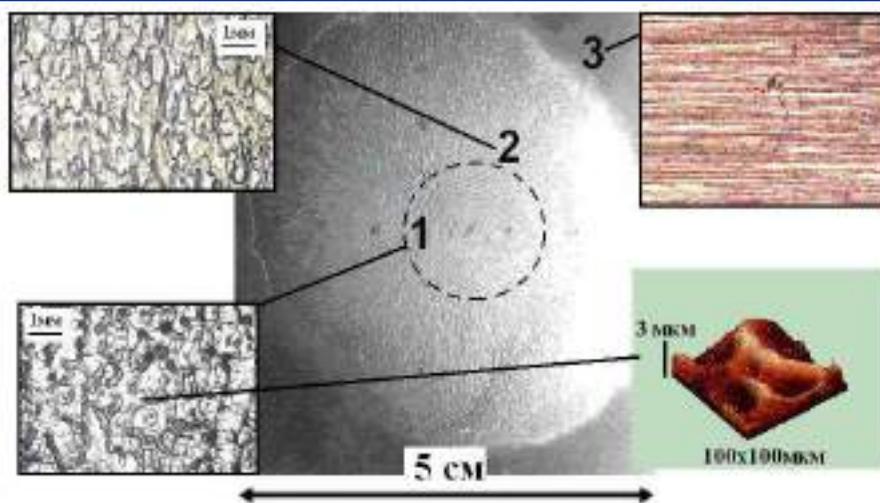


Рис.1. Поверхность образца после обработки компрессионным плазменным потоком с плотностью 20 Дж/см². 1 - область поверхности, на которую плазменный поток падает нормально 2 - область, в которой плазменный поток растекается радиально вдоль поверхности, 3 - не обработанная поверхность.

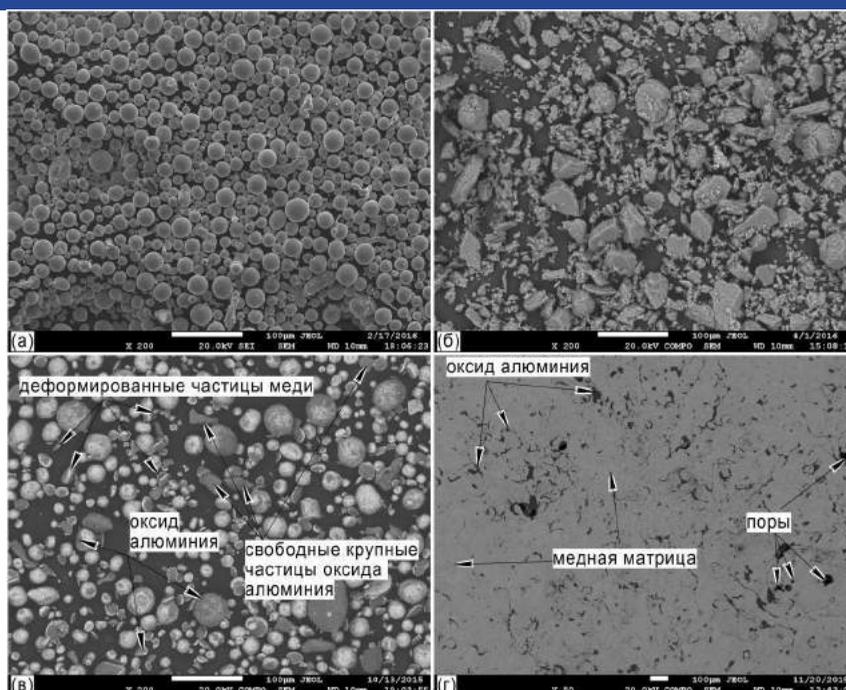


Рис. 2. а) исходный порошок меди; б) исходный порошок оксида алюминия; в) композиционный порошок Cu-Al₂O₃; г) структура композиционного материала Cu-Al₂O₃, полученного методом селективного лазерного сплавления

РАЗРАБОТКА, ИССЛЕДОВАНИЕ И РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМОВ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ ПРОСТРАНСТВЕННО- РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ОБЪЕКТОВ

Руководитель проекта – кандидат физико-математических наук Н.М. Япарова

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Расширение вектора измеряемых параметров, уменьшение погрешности их измерения и разработка алгоритмов оценки состояния реальных объектов (решение задачи самодиагностики).

ПУБЛИКАЦИИ

4 научные статьи

3 научных доклада

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

2 статьи в SCOPUS

ЗАДАЧА ПРОЕКТА

Разработка пространственно-временных (или пространственно-частотных) моделей распределенных объектов, позволяющих определить связь структуры и характеристик объекта с параметрами выходного сигнала. На этой основе решить обратную задачу восстановления фактических характеристик объекта с учетом его динамического состояния по измеренным значениям выходных сигналов.

ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

- Новые методы и алгоритмы самодиагностики и метрологического самоконтроля датчиков расхода и температуры, а также оценка их эффективности.
- Математические модели интеллектуальных устройств.
- Конструкторско-технологические решения, позволяющие уменьшить погрешность датчиков в различных режимах работы.
- Лабораторные макеты устройств с функцией самоконтроля и расширенными возможностями диагностики измеряемой среды.
- Повышение надежности потенциально опасных объектов.
- Снижение риска возникновения в них чрезвычайных ситуаций техногенного характера.

- Повышение эффективности управления системами и объектами за счет оптимизации работы контуров управления, увеличения межповоротных и межрегламентных периодов и сокращения численности обслуживающего персонала.
- Повышение экспортного потенциала.
- Вывод на рынок новой научно-технической продукции.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Область использования результатов проекта определяется областью производства и использования датчиков температуры и расхода, т.е., охватывает практически все отрасли промышленности. Существенными преимуществами разрабатываемых расходомеров должна явиться возможность работы с нестационарными потоками, а термопреобразователей – расширенные информационные функции, в частности способность оценивать качество установки и собственного метрологического состояния. Особую важность результаты проекта имеют для потенциально опасных и не обслуживаемых производств и объектов управления, а также объектов с необходимостью коммерческого учета результатов работы датчиков. В настоящее время предполагается, что основными потребителями подобных приборов могут быть предприятия нефтехимического и газоперерабатывающего комплексов, а также предприятия Росатома.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ В 2017 г.

Работы в области термометрии направлены на исследование возможности использования контролируемых тепловых возмущений с целью оценки качества установки термопреобразователя и контроля его метрологического состояния. С этой целью проведены теоретические исследования распространения теплового импульса в слоистых средах, а также проведено численное моделирование реакции термопреобразователя с линейной функцией преобразования на подобные импульсы для реальных конструкций. Также исследуется обратная задача по восстановлению характеристик теплового излучателя при проведении косвенных измерений в средах с известной нелинейной теплопроводностью.

Результаты исследований отражены в 4 статьях (из них две в индексируемых в Scopus изданиях) и докладывались на трех международных конференциях.

Основной целью исследований в области расходомерии является создание кориолисовых расходомеров, работающих в условиях нестационарных потоков контролируемого вещества. В настоящее время разрабатывается модель однотрубного кориолисова расходомера с несимметричным расположением масс, позволяющая перейти к моделированию нестационарного потока. Одновременно разрабатываются методы сверхбыстрой оценки разности фаз движения датчиков расходомера, что позволяет практически реализовать измерение параметров нестационарного потока.

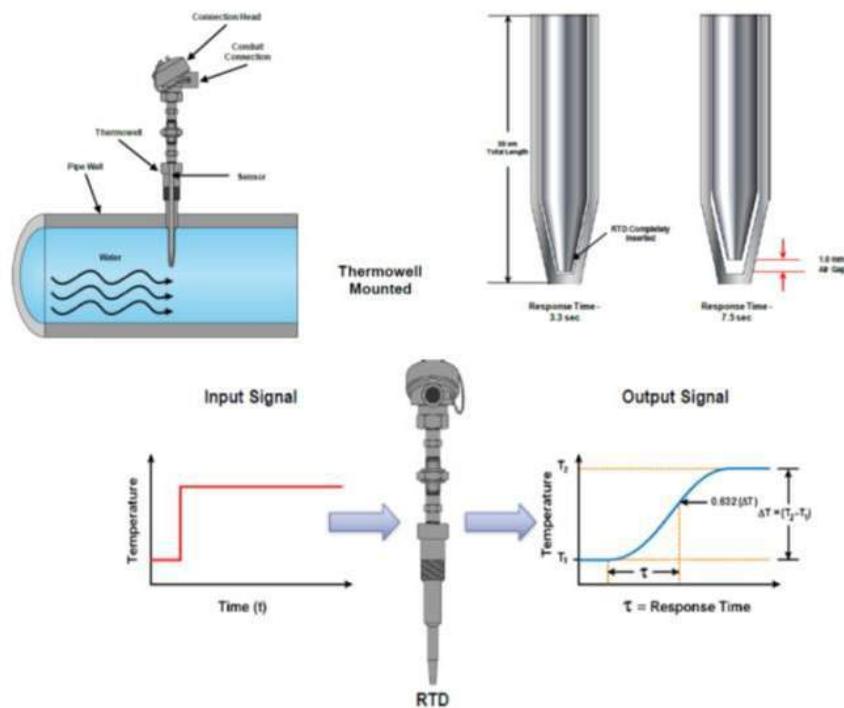
Результаты исследований отражены в 1 статье Scopus и докладывались на одной международной конференции.



Расходомер на рабочем месте



Расходомер



Установка термопар