

РОССИЙСКИЙ
ФОНД
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

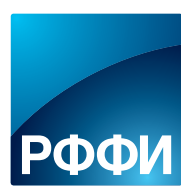
ISSN 1605-8070

Вестник РФФИ

1(81) январь-март 2014

Тематический блок,
посвященный международным
проектам РФФИ

стр.
15



ВЕСТНИК РФФИ

№ 1 (81) январь–март 2014 года

Основан в 1994 году

Зарегистрирован Комитетом РФ по печати,
рег. № 012620 от 03.06.1994 г.

Учредитель

Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Российский фонд фундаментальных исследований»

Главная редакция:

главный редактор В.Я. Панченко,
заместитель главного редактора В.В. Квардаков,
приглашенный редактор А.Г. Габибов

Редакционная коллегия:

В.А. Геловани, Ю.Н. Кульчин, В.П. Матвеевко, Е.И. Моисеев,
А.М. Музафаров, А.С. Сигов, Р.В. Петров, И.Б. Федоров, В.В. Ярмолук,
П.П. Пашинин, Е.Н. Черных, В.А. Шахнов

Редакция:

В.И. Елисеев, Н.А. Карташова, А.П. Локтев

Адрес редакции:

119991, Москва, Ленинский проспект, 32а

Тел.: (495) 952 6053, факс: (495) 952 5541

e-mail: pressa@rfbr.ru



JOURNAL RFBR

Number 1 (81) January-March 2014

Founded in 1994

Registered by the Committee of the Russian Federation for Printed Media,
reg. Number 012620 of 03.06.1994

The Founder

**Federal State Institution
«Russian Foundation for Basic Research»**

Editor-in-Chief V. Panchenko,
Deputy chief editor V. Kvardakov,
Guest Editor A. Gabibov

Editorial Board:

V. Gelovani, J. Kul'chin, V. Matveenko, E. Moiseev,
A. Muzafarov, A. Sigov, R. Petrov, I. Fedorov, V. Yarmolyuk,
P. Pashinin, E. Chernykh, V. Shakhnov

Editorial:

V. Eliseev, N. Kartashova, A. Loktev

Editorial address:

119991, Moscow, Leninsky Prospect, 32a
Tel.: (495) 952 6053, fax: (495) 952 5541
e-mail: pressa@rfbr.ru

№ 1 (81) январь-март 2014 г. (Приложение к «Информационному бюллетеню» № 21)

© 2006 The Authors
Journal compilation © 2006 Blackwell Publishing Ltd

© 2006 The Authors
Journal compilation © 2006 Blackwell Publishing Ltd

"RFBR Journal"**No 1 (81), January–December 2014** (Supplement to RFBR "Information Bulletin" No 21)**GUEST EDITOR'S COLUMN**

About the Editor of the Thematic Section RAS Corresponding Member A. Gabibov.....	6
<i>Gabibov A.G.</i>	
Abstract of the Thematic Section.....	8
<i>Sharov A.N.</i>	
International Relations of the RFBR.....	11
<i>Loktev A.P.</i>	
Publication Efficiency of International Project.....	14

THEMATIC SECTION DEVOTED TO INTERNATIONAL PROJECTS OF RFBR

<i>Korzhnikov A.M., Rogozhin E.A., Shen U., Deyev E.V., Abdiyeva S.V., Muraliyev A.M., Fortuna A.B., Charimov T.A., Yudakhin A.S., Mazheika Y.</i>	
RFBR International Palaeoseismological and Archaeoseismological Research	17
<i>Bumagin N.A., Potkin V.I.</i>	
Homogeneous and Heterogeneous Catalysts With 1,2-Azole Ligands for Cross-Coupling in Aqueous Media (Following the RFBR-supported Russian-Belarusian Project).....	23
<i>Davydov A.A., Veliov V.M.</i>	
Heterogeneity and periodicity in dynamic optimization problems (Following the RFBR-supported Russian-Austrian Project)	34
<i>Laverov N.P., Chizhova I.A., Gozhik P.F., Hrushhev D.P., Galeckij L.S., Kovalchuk M.S., Remezova E.A., Svivalneva T.V., Lalomov A.V., Lobanov K.V., Bochnova A.A., Chefranov R.M., Chefranov A.V., Aleksandrikova M.A.</i>	
Digital structural-litological and geological-dynamic modeling of heavy mineral placer deposits (Following the RFBR-supported Russian-Ukrainian Project).....	39
<i>Kochetkov S.N.</i>	
Approaches to Development of the New Generation of Anti-Hiv Drugs. (Following the RFBR-supported Russian-American Project).....	48
<i>Pestryakov P.E., Fomina E.J., Kutuzov M.M., Hodyreva S.N., Kurmi P., Shrajber V., Ovchinnikov L.P., Lavrik O.I.</i>	
Apurinic/Apyrimidinic Site Repair: Involvement of Poly (ADP-Ribose) Polymerases 1, 2 and Multifunctional Protein YB-1 (Following the RFBR-supported Russian-French Project).....	56
<i>Sabine Wurmehl, Lebedev O., Morozov I.V., Boltalin A.I., Shevelkov A.V.</i>	
New Layered Intermetallic Iron-based Superconductors and Related Compounds: Controlling Physical Properties by Using Iso- and Heterovalent Substitutions. (Following the RFBR-supported Russian-European Project).....	64
<i>Ustjuzhanina N.E., Saksena R.K., Saran S., Usov A.I., Bilan M.I., Gening M.L., Talukdar P., Titov D.V., Tsvetkov Y.E., Ganesh Krishna, Nifantiev N.E.</i>	
Russian-Indian Collaboration in Glycosciences Supported by RFBR.....	78

ANALYTICS

<i>Osipov I.A.</i>	
International Collaboration as a Method to Increase Competitive Strength of the Russian Science.....	83
<i>Andrushchenko V.B., Kiyak B.R., Krasovskaya O.B.</i>	
Collaboration of Ukraine's and Russia's Foundations for Basic Research: a Ukrainian Perspective on the Result of the Competitions.....	87
<i>Rama S. Bansal</i>	
Development of scientific collaboration between India and Russia.....	91
<i>Michel Tararine</i>	
Coopération entre le RFBR et le CNRS: la France et la Russie partenaires privilégiés	96

CONFERENCES

<i>Korshunov Y.M.</i>	
Russian-German Scientific Colloquium in Moscow.....	98

A portrait of Prof. Dr. Mustafa Kemal Kaya, a middle-aged man with dark hair, wearing a dark suit, white shirt, and patterned tie. He is smiling slightly and looking towards the camera.

Председатель Экспертного совета по международным научным проектам РФФИ

Научная деятельность А.Г. Габимова направлена на выяснение механизма действия биокатализаторов, создание белков с новыми функциями. А.Г. Габимову принадлежат пионерские исследования в области стационарной и предстационарной кинетики, механизма действия ферментов метаболизма ДНК, аминокислот и обмена фосфора. Им предложен ряд оригинальных методик неизотопной микродетекции биополимеров. Работы Габимова

последних 15 лет непосредственно связаны с проблемами иммунофизиологии, патологии, молекулярной иммунологии. Им открыта ДНК-гидролизующая активность аутоантител при системной красной волчанке (СКВ) и высказано предположение об универсальном характере деградации антигенов под действием аутоантител при аутоиммунной патологии (Science, 1992). Эти исследования во многом инициировали работы по природным каталитическим антителам в России и за рубежом. Они продемонстрировали возможности антител не только связывать антигены, но и разрушать их. Габибовым детально

исследован механизм катализа деградации ДНК и белковых аутоантигенов антителами, предложена гипотеза возникновения каталитических антител как антиидиотипических антител к ферментам. Эти работы дали начало новому направлению – созданию «каталитических вакцин-антидотов», в частности, способных акцептировать фосфорорганические яды и их аналоги.

Большое значение Александр Габибович придает международному сотрудничеству в сфере науки. Он является членом комиссии РАН по работе с соотечественниками за рубежом, в 2009 г. избран иностранным членом французской академии фармацевтики, а в 2013 г. награжден медалью института CRSSA "La Tronche Grenoble" за вклад в развитие биохимии и медицинской токсикологии. В том же году Александр Габибович стал вице-президентом Федерации Европейских биохимических Обществ.

Предисловие к тематическому сборнику

В 2011 году решением бюро Совета Российского фонда фундаментальных исследований был создан новый экспертный Совет по международным проектам, в задачи которого, в частности, входит определение победителей совместных с зарубежными партнерами Фонда конкурсов международных научных проектов. Специфика работы Совета состоит в мультидисциплинарности объявляемых конкурсов и особенностях в определении критериев успеха международного научного сотрудничества в рамках контактов Фонда, закрепленных в соответствующих соглашениях. К работе нового Совета были привлечены ведущие ученые нашей страны, работающие в различных областях. Говоря формальным языком, каждый пункт научного рубрикатора РФФИ представлен двумя членами Совета по данной специальности. Возникает вопрос – зачем был нужен новый орган, в известной степени альтернативный уже существующим специализированным? Необходимость создания нового Совета обусловлена задачами выработки критериев отбора проектов совместных программ. Раньше профильные секции советов учитывали потенциал только российских научных групп, а не возможные результаты взаимодействия с зарубежными партнерами. Теперь подходы к экспертизе изменились – новый Совет оценивает эффективность будущего сотрудничества, потенциал «взаимопроникновения» тематик международных партнеров. При выборе окончательных оценок Совет старается ответить на вопрос: действительно ли две конкретные научные группы из разных стран нужны друг другу, увенчается ли их взаимодействие весомыми результатами, то есть статьями и патентами.

Ответ на поставленный вопрос дает анализ экспертизы отчётов. Статистика гласит, что фонд поддерживает примерно пятую часть заявок (21%). В 2013 году было предложено оценить потенциал 1473 совместных проектов, из которых были отобраны 307.

Настало время проанализировать работу Совета и вынести это обсуждение на страницы тематического номера Вестника РФФИ. В ходе очередного заседания Совета для публикации в номере Вестника были отобраны проекты в разных областях знаний, которые по нашему мнению могут представить определённую картину международной научной деятельности Фонда. В качестве предисловия к данному номеру мною приводятся выдержки из оценок отобранных проектов членами Совета, с которыми я бы хотел познакомить читателей. Среди этих оценок есть и мои собственные.

Номер открывается статьей А.М. Корженкова с соавторами «Палеосейсмологические и археосейсмологические исследования по международным проектам РФФИ». Профессор Владимир Иванович Кафтан отмечает, что данная публикация посвящена решению важной научной задачи восстановления сейсмической истории южного Прииссыккуля (Кыргызстан) на основе исследований в рамках Российско-Монгольского и Российско-Китайского проектов РФФИ. Работы, проводимые международным коллективом, позволяют уточнить современные представления о сейсмической опасности многонаселенного района.

В результате полевых исследований уточнены положения очагов и оценки максимальной магнитуды сильных сейсмических событий, а также обнаружены следы ранее незадокументированных сильных землетрясений. Получены новые данные для совершенствования карт сейсмической опасности региона.

Своими впечатлениями от работы в области химии Н.Бумагина и В. Поткина «Гомогенные и гетерогенные катализаторы с 1,2-азольными лигандами для реакций кросс-сочетания в водных средах» делится чл.-корр. РАН Федюшкин Игорь Леонидович. В статье представлены оригинальные результаты работы, направленной на получение новых катализаторов для реакций кросс-сочетания. Данный тип химических реакций является одним из наиболее важных в органическом синтезе, поскольку позволяет реализовать образование химических связей углерод-углерод. Исследования в этой области активно проводятся в десятках исследовательских коллективов по всему миру, в том числе и в России. В рамках совместного российско-белорусского исследователь-

Совместные исследования украинских и российских ученых в рамках этого проекта РФФИ направлены на решение важнейших задач прогнозирования и освоения россыпных промышленных месторождений с ис-

Апуриновые/апириимидиновые сайты (АП-сайты) являются одними из наиболее часто возникающих повреждений ДНК, обладающих значительной цитотоксичностью и мутагенным потенциалом. В работе коллектива под руководством О. Лаврик представлены результаты исследования роли представителей семейства поли(АДФ-рибозо)полимераз: PARP1 и PARP2, а также мультифункционального белка YB-1 в процессе репарации АП-сайтов. Описаны представления о механизмах исправления повреждений этого типа. Приведены закономерности взаимодей-

Свои замечания на статью А.В. Шевелькова и его соавторов. «Новые слоистые бескислородные железосодержащие сверхпроводники и их аналоги: управление физическими свойствами путем изо- и гетеровалентного замещения» подготовил чл.-корр. РАН Евгений Викторович Антипов.

Я посчитал необходимым также поделиться своим мнением с читателями «Вестника РФФИ» о статье Н.Э. Нифантьева «Российско-индийское сотрудничество в области гликонаук при поддержке РФФИ». В статье рассмотрены результаты Российско-Индийского симпозиума по гликонаукам, состоявшегося 13-16 июня 2011 года на базе Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН в Москве и проведенного при поддержке РАН, РФФИ и (Department of Science and Technology, Индия – ДНТ). Кроме того, автор анализирует достижения первых двусторонних проектов РФФИ-ДНТ в области гликонаук, посвященных поиску фукоиданмодифицирующих ферментов, а также синтезу и изучению свойств гликоконъюгатных производных в качестве агентов, способных образовывать трансмембранные ионные каналы. Данные исследования привели к получению значимых научных результатов, которые свидетельствуют о целесообразности продолжения и расширения совместных работ в указанных направлениях.

В этом номере читатели также найдут статьи наших зарубежных партнеров, в частности статью Мишеля Тарарина, директора представительства CNRS в России и некоторые другие материалы по международной научной деятельности фонда.

Надеюсь, что это не последняя наша встреча с читателями Вестника.

А.Г. Габиров

Член-корреспондент РАН,
Председатель Экспертного совета
по международным научным
проектам РФФИ

Международные связи РФФИ

Основное предназначение РФФИ – обеспечение развития фундаментальных научных исследований в России – выполняется с учетом того, что фундаментальные научные знания имеют международный характер, т.к. не могут принадлежать ни открывающим их ученым, ни финансирующим их деятельность государствам и даже частным организациям. Открытый характер результатов фундаментальных исследований определяет формирование их единого массива, к которому имеет доступ практически каждый. Современная фундаментальная наука фактически функционирует в формате не столько национальной, сколько глобальной исследовательской системы.

В этих условиях, чтобы выйти вперед или даже оставаться в числе научных лидеров, нужно не только принимать непосредственное участие в передовых исследованиях, но и максимально активно участвовать в международном научном сотрудничестве. Страна, не способная обеспечить своим ученым возможности равноправного участия в глобальной науке, лишается шансов на полноценное использование современного уровня развития науки. В мире сложилась ситуация, когда успех национальной фундаментальной науки прямо зависит от объема и качества ее внешних связей. РФФИ в своей деятельности неизменно демонстрировал понимание этой реальности и различных форм ее выражения, таких как растущая мобильность ученых, кооперация в работе над сложными и комплексными научными проблемами, коллективное использование мегаустановок научной инфраструктуры, строительство и содержание которых требует мобилизации сил и средств многих стран. Объединение ресурсов в целях ведения научных исследований на современном уровне – главный довод в пользу международного научного сотрудничества.

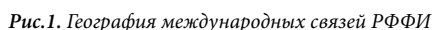
За годы существования РФФИ его внешние связи с однопрофильными зарубежными организациями выстроились в систему, отражающую современную практику международного научного сотрудничества.

В 2013 г. РФФИ профинансировал участие российских ученых почти в 800 международных исследовательских проектах, провел 22 международных конкурса, на которые поступили и прошли экспертизу около 1,5 тысяч заявок. По сравнению с аналогичными показателями 10-летней давности, масштабы международной деятельности Фонда выросли примерно в три раза!

Возрастают они и в сравнении с общим объемом финансирования Фондом фундаментальных исследований. В 2013 г. на долю международных проектов пришлось около 8% всех поступивших в фонд заявок и 5% рекомендованных к поддержке проектов (их отбор проходит в более жесткой конкуренции, чем во внутренних конкурсах). Удельный вес финансирования международных проектов составил более 6% общих расходов Фонда на поддержку фундаментальной науки в России. В 2014 г. расходы РФФИ на эти цели должны составить более 0,5 млрд руб. по сравнению с 90 млн руб. 10 лет тому назад.

Международная деятельность РФФИ осуществляется в тесном сотрудничестве с его зарубежными партнерами: государственными и негосударственными научными фондами и другими структурами, оказывающими поддержку национальным научным кадрам и организациям. В настоящее время РФФИ поддерживает двусторонние связи более чем с 35 однопрофильными национальными организациями из 28 стран: 10 из Европы, 8 из стран Азии, из Африки (ЮАР и Египет), Северной Америки (США и Канада), из 5 стран на постсоветском пространстве. По мере роста международной активности Фонда, этот список не только удлинялся, но и оптимизировался ввиду того, что из числа партнеров по разным причинам выбывали те, сотрудничество с которыми переставало отвечать интересам сторон или одной из них.

Нынешний состав зарубежных партнеров РФФИ отражает возможность взаимодействия с большинством ведущих научных фондов, в числе которых Национальный научный фонд США, Государственный фонд естественных наук Китая, Немецкое исследовательское сообщество, Национальный Совет научных исследований Франции, Исследовательские советы Великобритании. Практически ежегодно появляются новые партнеры, в т.ч. в тех странах, где они уже есть. В планах Фонда – выйти на пер-

Табл.1. Распределение по странам международных двусторонних проектов РФФИ (2013 г.)

Начало данному направлению положило сотрудничество, налаженное с Европейским центром ядерных исследований (ЦЕРН) и участие в

Объединении финансирующих науку организаций стран Балтики (БОНУС). В дальнейшем к ним прибавились другие европейские проекты, а также объединения и проекты глобального характера.

В числе партнеров РФФИ по многосторонним программам значатся не только многие из зарубежных организаций, с которыми параллельно налажено сотрудничество на двусторонней основе, но и такие, прямые связи с которыми не отвечают потребностям или возможностям Фонда. В мире насчитывается в настоящее время несколько сотен финансирующих науку национальных организаций, и далеко не со всеми из них нужно и можно поддерживать отношения сотрудничества. Наибольший интерес РФФИ вызывают возможности, открываемые сотрудничеству на многосторонней основе в рамках научных проектов и программ Евросоюза, комплексных региональных программ (по Арктике, в Азиатско-Тихоокеанском регионе) или решения глобальных проблем современности (энергетической, экологической, связанных с освоением космоса и мирового океана, борьбой с природными катаклизмами).

Особое место в международном научном сотрудничестве занимает взаимодействие финансирующих науку организаций (научных фондов и др.) в интересах налаживания координации их деятельности, выработки общих норм, регулирующих грантовую поддержку научных исследований, открытого доступа к их результатам и решения других объединяющих их вопросов. С этой целью создаются объединения таких организаций регионального и глобального уровня. К категории последних относятся Объединение исследовательских советов стран «восьмерки» (G8 HORCs) и Гло-

НАЗВАНИЕ	ПРОЕКТЫ	ФИНАНСИ- РОВАНИЕ (млн руб.)
ASPERA (европейская программа изучения космических частиц)	2	6,1
CERN (европейский центр ядерных исследований)	18	8,8
EMBL (европейская молекулярно-биологическая лаборатория)	6	6,0
ERA.Net RUS (присоединение России к европейскому исследовательскому пространству)	9	7,7
G8 HORC's Initiative (инициатива фондов стран «восьмерки» по совместному финансированию исследований)	5	9,0
BONUS (объединение финансирующих науку стран Балтии)	2	2,0
Трехсторонние исследования Россия-Беларусь-Украина	4	1,2
Итого	46	40,8

Табл.2. Участие РФФИ в международных многосторонних программах

бальный исследовательский совет (Global Research Council – GRC), в которых РФФИ принимает участие. Задачу активизации своего участия в международном многостороннем научном сотрудничестве РФФИ готовится решать путем не только присоединения к уже действующим другим объединениям такого рода, но и инициирования создания подобных объединений.

А.Н. Шаров,
кандидат экономических наук,
начальник управления
международных связей РФФИ

Публикационная эффективность международных проектов

Российский фонд фундаментальных исследований с 1995 г. проводит международные исследовательские конкурсы и в настоящее время является заметным участником мирового научного процесса. Эффективность поддержки РФФИ международных научных коллективов наиболее наглядно может быть продемонстрирована на примере анализа данных научных статей, опубликованных по результатам проектов, получивших поддержку РФФИ.

№ п/п	Страна	Кол-во статей	Доля от общего количества
1	Германия	912	12,386 %
2	США	703	9,548 %
3	Франция	642	8,719 %
4	КНР	404	5,487 %
5	Украина	368	4,998 %
6	Япония	359	4,876 %
7	Англия	229	3,110 %
8	Италия	224	3,042 %
9	Беларусь	192	2,608 %
10	Польша	146	1,983 %
11	Австрия	136	1,847 %
12	Тайвань	133	1,806 %
13	Финляндия	130	1,766 %
14	Нидерланды	103	1,399 %
15	Испания	103	1,399 %
16	Индия	97	1,317 %
17	Бельгия	93	1,263 %
18	Канада	85	1,154 %
19	Израиль	82	1,114 %
20	Швейцария	79	1,073 %

Табл.1. Распределение публикации по результатам международных конкурсов по странам-партнерам (Топ-20)е

В одной из крупнейших мировых реферативных баз данных научных публикаций Web of Science за 2009–2013 гг. было опубликовано 7480 статей (рис. 1), в сведениях о финансировании которых указан номер международного проекта РФФИ. Учитывая, что далеко не все авторы и редакции журналов корректно заполняют и передают данные о финансовой поддержке, можно считать, что полученная оценка является оценкой снизу.

Среднее количество цитирований на одну статью для международных публикаций при поддержке РФФИ составляет 3,97 цитирования на статью, что превышает аналогичный показатель для всех статей, опубликованных при поддержке РФФИ (3,10) за последние пять лет.

География международных конкурсов РФФИ охватывает свыше 25 стран. Разнообразие соавторов российских ученых в рамках публикаций по результатам международных проектов Фонда красноречиво это подтверждает (см. табл. 1). Проводимые совместно с Немецким научно-исследовательским сообществом, Объединением им. Гельмгольца, Европейской лабораторией по молекулярной биологии, фондами-организаторами программы «ASPERA»

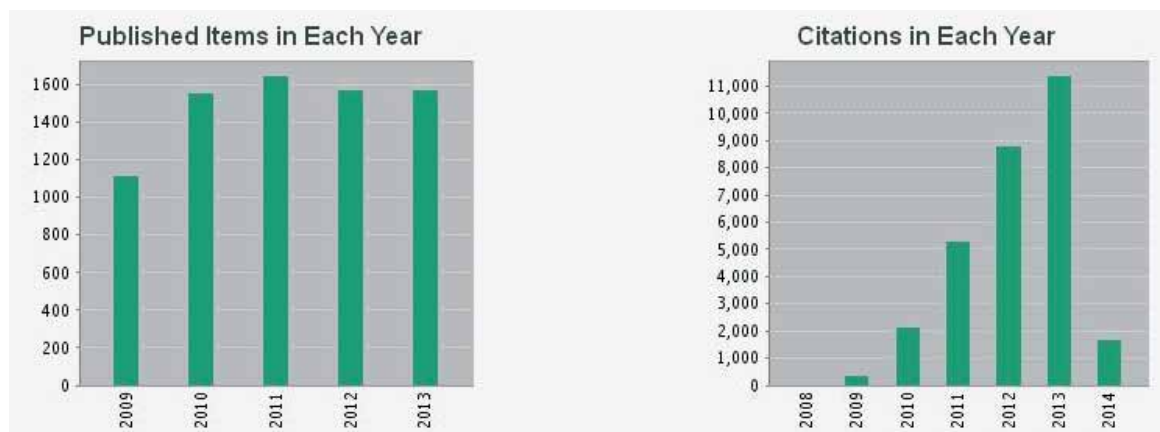


Рис.1. Распределение публикаций по результатам международных конкурсов РФФИ и их цитирований по годам по данным Web of Science

международные конкурсы РФФИ обеспечивают лидерство немецких ученых среди соавторов ученых из России. Свыше 700 статей опубликованы совместно с американскими исследователями (Национальный научный фонд США, Национальные институты здоровья США, Американский фонд гражданских исследований и развития в области энергетики), 642 публикации подготовлены совместно с учеными из Франции (Национальный центр научных исследований Франции).

Особенность международных конкурсов РФФИ – свобода ученого в выборе направления фундаментального исследования. Благодаря этому, Фонду удается поддерживать исследования по очень широкому спектру наук. В первой десятке наиболее популярных направлений исследований по научному классификатору Web of Science ожидаемо приведены в основном те области знаний, в которых традиционно сильны российские исследователи. Физические науки представлены «прикладной физикой» – 544 публикации, «физикой конденсированных сред» – 523 статьи, «астрономией и астрофизикой» – 480 статей. Также активны представители математических наук (общая математика – 524 статьи, прикладная математика – 388 статей) и химических наук (физическая химия – 452 публикации, науки о материалах – 412). Двадцать наиболее широко представленных направлений наук по результатам публикаций в рамках международных конкурсов РФФИ приведены в *табл. 2*.

Среди всех международных проектов РФФИ выделяется ряд особенно продуктивных с точки зрения количества опубликованных статей исследований. Так, более 60 публикаций ссылаются на проекты 09-02-92114 «Макроскопическое квантовое туннелирование в сверхпроводящих, электромагнитных и наномеханических системах» и 12-02-92100 «Макроскопические квантовые эффекты

№ п/п	Страна	Кол-во статей	Доля от общего количества
1	Физика, междисциплинарные исследования	774	10,512 %
2	Прикладная физика	544	7,388 %
3	Математика	534	7,252 %
4	Физика конденсированных сред	523	7,103 %
5	Астрономия и астрофизика	480	6,519 %
6	Физическая химия	452	6,139 %
7	Науки о материалах, междисциплинарные исследования	412	5,596 %
8	Прикладная математика	388	5,270 %
9	Физика, частицы и поля	352	4,781 %
10	Математическая физика	347	4,713 %
11	Химия, междисциплинарные исследования	343	4,658 %
12	Оптика	343	4,658 %
13	Биохимия, молекулярная биология	335	4,550 %
14	Неорганическая и ядерная химия	263	3,572 %
15	Органическая химия	256	3,477 %
16	Механика	256	3,477 %
17	Атомная, молекулярная и химическая физика	246	3,341 %
18	Науки о Земле, дисциплинарные исследования	228	3,097 %
19	Физика жидкостей, плазмы	217	2,947 %
20	Ядерная физика	177	2,404 %

Табл.2. Распределение публикации по результатам международных конкурсов РФФИ по научным отраслям классификатора Web of Science

№ п/п	№ гранта	Кол-во статей	Доля от общего количества
1	09-02-92114	67	0,910 %
2	12-02-92100	61	0,828 %
3	09-02-91005-ANF	36	0,489 %
4	09-01-93107	31	0,421 %
5	08-01-90006	29	0,394 %
6	09-01-92440-CE	29	0,394 %
7	09-02-93105-CNRSI	29	0,394 %
8	11-02-90445	29	0,394 %
9	09-02-90493-Ukr	28	0,380 %
10	09-01-91332	26	0,353 %
11	10-01-93112	26	0,353 %
12	09-03-91337	25	0,340 %
13	11-02-91066-CNRS-a	23	0,312 %
14	09-02-12359	22	0,299 %
15	12-01-91155	21	0,285 %
16	10-01-91055	20	0,272 %
17	10-02-92109-Yaf-a	20	0,272 %

Табл.3. Гранты по международным конкурсам РФФИ, на которые ссылаются более 20 статей в Web of Science

В завершении обзора отметим наиболее значимые публикации по результатам многосторонних исследований при поддержке РФФИ. Как и в случае с наиболее «продуктивными» грантами, такие статьи обычно публикуются по результатам исследований крупных международных исследовательских групп, что, однако, не умаляет роль участвующих в них российских ученых. Наибольшее количество цитирований за последние пять лет (281) приходится на статью «Heavy quarkonium: progress, puzzles, and

210 раз была процитирована публикация «Fluorescent Proteins and Their Applications in Imaging Living Cells and Tissues» в журнале *Physiological Reviews*. Статья была подготовлена при поддержке РФФИ в рамках совместного с Королевским Обществом конкурса, проект № 09-04-92603 «Генетически кодируемые кальциевые сенсоры на основе флуоресцентных белков» под руководством доктора биологических наук. Д.М. Чудакова, заведующего лабораторией Института биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН.

А.П. Локтев
кандидат экономических наук,
начальник управления
издательских проектов
и публикационных программ РФФИ

Палеосейсмологические и археосейсмологические исследования по международным проектам РФФИ *

Корженков А.М., Рогожин Е.А., Шен Дж., Деев Е.В., Муралиев А.М.,
Фортунa А.Б., Чаримов Т.А., Юдахин А.С., Мажейка Й.

Нами была прослежена зона потенциальных очагов землетрясений из Джунгарского Тянь-Шаня до южного обрамления Иссык-Кульской впадины. В 2013 г. были проведены полевые палеосейсмологические и археосейсмологические исследования в южном Прииссыккулье (Кыргызстан), которые выявили очень сильные сейсмические события, произошедшие в недалеком геологическом прошлом. По замеренным вертикальным амплитудам одноактных смещений в сейсмогенном уступе Тегерекского разлома было установлено, что магнитуда породивших их землетрясений составляла $M=7,0-7,5$. Возраст подвижек средне- или/и раннеголоценовый. Сейсмогенные конволюции, обнаруженные в отложениях раннеголоценовой озерной террасы, свидетельствуют о многочисленных событиях сейсмических сотрясений большой интенсивности (не менее $I=8$ баллов). Двукратное разрушение стен средневековых Караханидских крепостей, произошедшее в период времени VIII-X века н.э., соответствует интенсивности сотрясений $I=8-9$ баллов по макросейсмической шкале MSK-64. Следовательно, сильнейшие землетрясения происходили здесь раз от нескольких сотен лет или раз в одну тысячу лет. Полученные данные должны быть учтены при составлении новой Карты сейсмической опасности Кыргызстана.

Ключевые слова: археосейсмология, палеосейсмология, оценка сейсмической опасности, Тянь-Шань, Иссык-Куль, Караханиды, повторяемость землетрясений.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 13-05-91168-ГФЕН_а, 14-05-00091а)

Палеосейсмологические и археосейсмические методы являются переносимыми и востребованными во всех

развитых странах при работах по оценке сейсмической опасности [1–7 и многие другие]. Широко используются методы «тренинга» – исследование строения зон активных разломов в траншеях, геолого-геоморфологический метод выявления палео-сейсмодислокаций, а также метод экстраполяции результатов «тренинга» на смежные области и большие глубины на основе применения георадарного просвечивания – получения глубинной модели строения на основе приповерхностного радиолокационного зондирования. Главными



КОРЖЕНКОВ
Андрей Михайлович
доктор геолого-минералогических наук, заведующий лабораторией Института физики Земли имени О.Ю. Шмидта РАН.



РОГОЖИН
Евгений Александрович
доктор геолого-минералогических наук, профессор, заместитель директора по науке Института физики Земли имени О.Ю. Шмидта РАН.



ШЕН Джун
доктор геолого-минералогических наук, профессор, заведующий отделом Института по предотвращению катастроф в Китае.



ДЕЕВ
Евгений Викторович
кандидат геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник Института нефтегазовой геологии и геофизики имени А.А.Трофимукa СО РАН.



АБДИЕВА
Светлана Викторовна
кандидат сельскохозяйственных наук, старший научный сотрудник Кыргызско-Российского славянского университета имени Б.Н.Ельцина.



ФОРТУНА
Алла Борисовна
кандидат геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник Кыргызско-Российского славянского университета имени Б.Н.Ельцина.



МУРАЛИЕВ
Абдирашит Миркамолевич
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Кыргызско-Российского славянского университета имени Б.Н.Ельцина.



ЧАРИМОВ
Тулген Абдышевич
старший научный сотрудник Кыргызско-Российского славянского университета имени Б.Н.Ельцина.



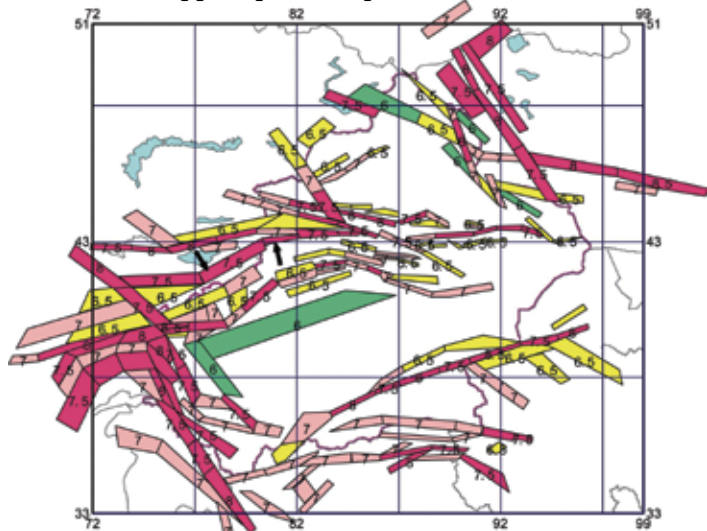
ЮДАХИН
Александр Сергеевич
научный сотрудник Кыргызско-Российского славянского университета имени Б.Н. Ельцина.



МАЖЕЙКА Йонас
доктор физических наук, профессор, заведующий лабораторией Государственного исследовательского института «Центр Естественных Наук» Литвы.

Интересные результаты были получены осенью 2013 г. при проведении совместных работ российскими и китайскими участниками последнего проекта в приграничной области Киргизии и КНР в сейсмогенных структурах Джунгарского и Северного Тянь-Шаня. Здесь авторами статьи были обнаружены и изучены следы древних землетрясений, позволяющие пролить свет на нерешенный вопрос о трассировании сейсмогенерирующих структур с территории Западного Китая в район озера Иссык-Куль.

На территории северо-западного Китая в Восточ-



- деформации в траншее, пройденной через стену в средневековой крепости в урочище Каджи-Саз,

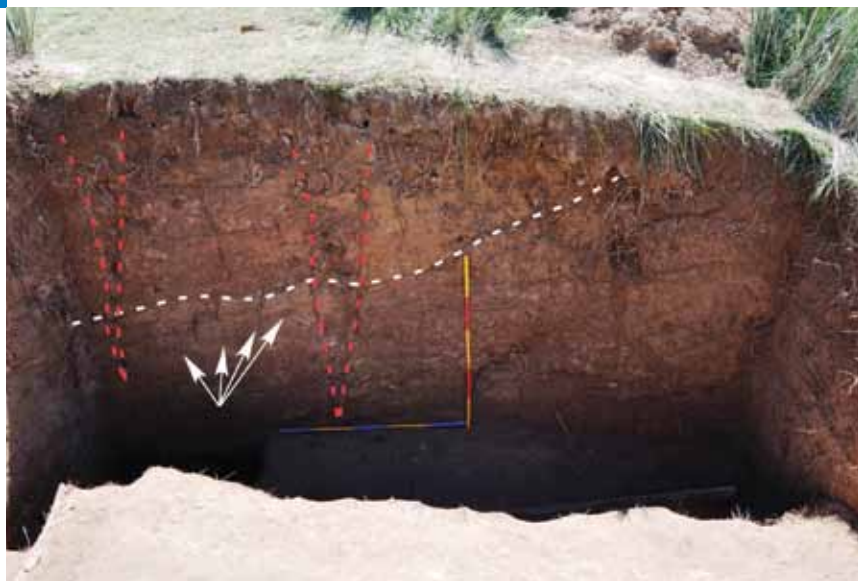


Рис. 6. Южная стенка траншеи, пройденной через восточную стену западной средневековой Каджи-Сазской крепости. Стрелками показаны трещины, образовавшиеся во время первого землетрясения в старой части стены. Белая штриховая линия указывает границу между старой и более поздней частями стены. Красный штрих маркирует клинья, сформировавшиеся во время второго землетрясения. Клинья пробивают наскавозь старую и новую части стены. Очевидно, что оба разрушительные землетрясения произошли в период между VIII–X вв. н. э.



Рис. 7. Стены Тоссорской средневековой крепости. Вид изнутри на юго-запад. На остатках стен крепости современные захоронения. На заднем плане видны адыры – предгорья хребта Терской Ала-Тоо. Линия горизонта – наиболее высокая часть хребта Тегерек



Рис. 8. Фото южной стенки траншеи, пройденной в восточной стене Тоссорской средневековой крепости. Вид на юг. Видны деформации, относящиеся к двум сейсмическим событиям



Рис. 9. Разрез верхней части раннеголоценовой озерной террасы к западу от села Тоссор. В небольшой пачке отложений мощностью в 4 м видны 5 конволютивных горизонтов, соответствующие тому же числу сильных землетрясений

тельном землетрясении верхняя часть первоначальной стены была сильно повреждена, в связи с чем она была удалена при ремонте, и новые слои глины легли на нижнюю – лучше сохранившую часть. Следы растрескивания видны в верхней части старого фрагмента стены. Однако и старая, и новая части стен были пробиты насквозь клиновидными трещинами второго сильного землетрясения.

Археосейсмологическое исследование средневековой крепости на западной окраине села Тоссор. В 20 км на ВСВ от описанных Каджи-Сазских крепостей на западной окраине села Тоссор вблизи южного берега Иссык-Куля находится еще одна средневековая Караханидская крепость (рис. 7).

В южной стенке траншеи, пройденной в восточной стене крепости, нами были выявлены значительные деформации (рис. 8), относящиеся к двум сейсмическим событиям. Во время первого землетрясения стена была сильно повреждена, ее обломки отлетели на восток на значительное расстояние, превышающее изначальную высоту стены. Этот факт свидетельствует о сильных сейсмических колебаниях, так как при обычном статическом разрушении подавляющая часть обломков должна была упасть на расстоянии, не превышающем $1/3$ высоты стены. Во время второго сейсмического толчка стена сильно растрескалась, что привело к образованию значительной клиновидной трещины, внутрь которой провалились обломки верхней части стены.

Исследование озерного клифа к западу от села Тоссор. Нами был обследован озерный уступ – клиф раннеголоценовой террасы абсолютной высотой 1630 м над уровнем озера Иссык-Куль. Этот уступ протягивается в западном направлении от села Тоссор. Разрез слагающих террасу отложений может быть разделен по генезису на прибрежно-озерные, устьевые и аллювиальные. В этих отложениях нами были выявлены до 5 горизонтов сейсмоген-

стей: первичной, остатки которой сохранились внизу, и более поздней верхней части. Видно, что стена была отремонтирована. По-видимому, при первом значи-

ных конволюций, зачастую даже не разделенных недеформированными прослоями (рис. 9). Этот факт свидетельствует о наличии нескольких периодов сильнейших сейсмических сотрясений и малых временных интервалах между сильными землетрясениями, а также о близости источников сейсмических колебаний.

Заключение

Проведенные палеосейсмологические и археосейсмологические исследования на южном обрамлении впадины оз. Иссык-Куль позволяют заключить, что в недалеком геологическом прошлом здесь имели место очень сильные сейсмические события. По амплитуде одноактных смещений в сейсмогенном уступе Тегерекского разлома можно заключить, что магнитуда породивших их землетрясений могла составить 7,0–7,5. Возраст подвижек средне- или/и раннеголоценовый. Сейсмита, обнаруженные в отло-

жениях раннеголоценовой озерной террасы на южном борту Иссык-Кульской впадины, говорят о многочисленных актах сейсмических сотрясений большой интенсивности (не менее 8 баллов). Двукратное разрушение стен Караханидских крепостей, произошедшее в период времени VIII–X вв. н.э., соответствует интенсивности сотрясений 8–9 баллов по макросейсмической шкале MSK-64. Следовательно, сильнее землетрясения происходили здесь раз в нескольких сотен лет или раз в одну тысячу лет. Поставленный в начале статьи вопрос, таким образом, можно решить на основании анализа собранных материалов. Высокомagnitudeная сейсмогенерирующая зона, включающая ПОЗ Джунгарского Тянь-Шаня, вполне может быть прослежена до южного обрамления Иссык-Кульской впадины.

Из всех изученных объектов авторами были отображены образцы на радиоуглеродное датирование. После получения результатов анализа представится возможность уточнить эти предварительные оценки.

Авторы благодарят В. Кольченко и Д. Лужанского
за их помощь при полевых исследованиях
и при анализе полученных результатов.

Литература ●

1. *Archaeoseismology*. Ed. S. Stiros and R.E. Jones.
British School at Athens. Fitch Laboratory Professional Paper 7. – 1996. – 268 p.
2. *Palaeoseismology*. Ed. J.P. McCalpin. - San Diego: Academic Press, 1996. – 588 p.
3. *Nikonov A.A.*
On the methodology of archaeroseismic research on historical monuments // Proceed. of the Intern. Symp. on engineering geology of ancient works, monuments and historical sites. Rotterdam, 1988a. – Vol. 3. – P. 1315-1320.
4. *Nikonov A.A.*
Reconstruction of the main parameters of old large earthquakes in Soviet Central Asia using the paleoseismogeological method // Tectonophysics. 1988b. – Vol. 147, No. 3/4. – P. 297–313.
5. *Korzhnikov A.M., Mazar E.*
Structural reconstruction of seismic events: Ruins of ancient buildings as fossil seismographs // Science and New Technologies. – 1999, No. 1. – P. 62–74.
6. *Корженков А.М.*
Сейсмогеология Тянь-Шаня (в пределах территории Кыргызстана и прилегающих районов). – Бишкек: Илим. – 2006. – 290 с.
7. *Рогожин Е.А.*
Очерки региональной сейсмотектоники. – М.: ИФЗ РАН. – 2012. – 340 с.
8. *Солоненко В.П.*
Палеосейсмогеология // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1973. – № 9. – С. 3–16.
9. *Имаев В.С., Имаева Л.П., Козьмин Б.М.*
Сейсмодислокации в сейсмических поясах Якутии // Геотектоника. – 1995, № 1. – С. 79–92.
10. *Дэмбэрэл С., Имаев В.С., Рогожин Е.А., Смекалин О.П., Улзийбат М., Чинизубов А.В.*
К уточнению сейсмической опасности г.Улан-Батор (Монголия) // Вопросы инженерной сейсмологии. – 2013. – Т. 40, №1. – С. 19-32.
11. *Рогожин Е.А., Ларьков А. С., Дэмбэрэл С., Баттулга Б.*
Повторяемость сильных землетрясений в зоне активного разлома Ховд на Монгольском Алтае // Геотектоника. – 2013. – № 5. – С. 36–47.
12. *Рогожин Е.А., Шен Юун, Чен Кюифу, Шен Ксюхей.*
Палеосейсмодислокации в потенциальном очаге сильных землетрясений на Джунгарском Тянь-Шане // Вопросы инженерной сейсмологии. – 2014. – Т. 41, №1. – С. 5–18.
13. *Xu X, Deng Q.*
Nonlinear characteristics of paleoseismicity in China. J. Geoph. Res. – 1996. – Vol. 101, No. B3. – P. 6209–6231.

Palaeoseismological and Archaeoseismological Investigations on RFBR International Projects *

Evgeny V. Deev –
PHD, senior researcher, A.A. Trofimuk
Institute of Petroleum Geology and Geo-
physics SB RAS, Russia, 630090, Novosi-
birsk, Akademika Koptyugina Pros., 3,
e-mail: deeev@ngs.ru

Alla B. Fortuna –
PHD, senior researcher, Institute of
Communications and Information
Technologies, Kyrgyz-Russian Slavic
University, Kievskaya str. 44, Bishkek,
720000, Kyrgyzstan,
e-mail: alla-fortuna0@rambler.ru

Jonas Mazeika –
Doctor of Science, Professor, State Re-
search Institute Nature Research Centre,
Akademijos str. 2, LT-08412,
Vilnius, Lithuania,
e-mail: mazeika@geo.lt

Jun Shen –
Doctor of Science, Professor, Head of Department of earthquake sciences, Institute of
disaster prevention of China, Xueyuanjie, Yanjiao, Sanhe, Heibei province,
065201, China,
e-mail: shenjuneq@qq.com, shenjuneq@263.net

Keywords: archaeoseismology, paleoseismology, seismic hazard assessment, the Tien Shan, Issyk-Kul Lake, Karakhanides, earthquake reoccurrence.

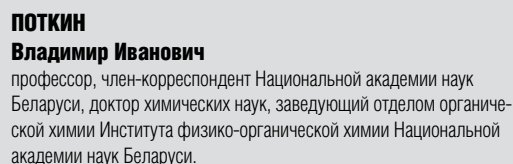
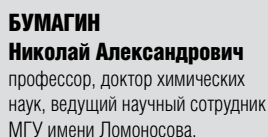
1. *Archaeoseismology*. Ed. S. Stiros and R.E. Jones. British School at Athens. Fitch Laboratory Professional Paper 7. 1996.
2. *Palaeoseismology*. Ed. J.P. McCalpin. - San Diego: Academic Press, 1996
3. *Nikonov A.A.* Proceed. of the Intern. Symp. on engineering geology of ancient works, monuments and historical sites. Rotterdam, 1988a, 3: 1315-1320.
4. *Nikonov A.A.* Tectonophysics. 1988b, 147, 3/4: 297-313.
5. *Korzhenkov A.M., Mazor E.* Science and New Technologies. 1999, 1: 62-74.
6. *Korzhenkov A.M.* Seismogeologiya Tyan'-Shanya. Bishkek, Ilim, 2006.
7. *Rogozhin E.A.* Ocherki regional'noi seismotektoniki. Moscow, OIFZ RAN, 2012.
8. *Solonenko V.P.* Izvestiya AN SSSR. Fizika Zemli. 1973, 9: 3-16
9. *Imaev V.S i dr.* Geotektonika. 1995, 1: 79-92
10. *Demberel S. i dr.* Voprosy inzhenernoi seismologii. 2013, 40, 1: 19-32
11. *Rogozhin i dr.* Geotektonika. 2013, 5: 36-47
12. *Rogozhin i dr.* Voprosy inzhenernoi seismologii. 2014, 41, 1: 5-18.
13. *Xu X, Deng Q. J.* Geoph. Res. 1996, 101, B3: 6209-6231.

№ 1 (81) январь-март 2014 г.

Бумагин Н.А., Поткин В.И.

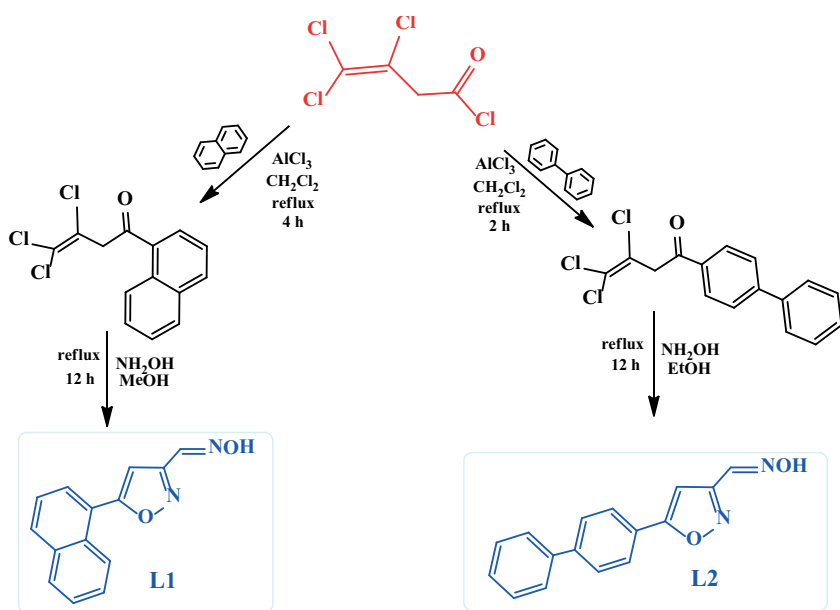
Ключевые слова: изоксазолы, комплексы палладия, мезопористые оксидные и углеродные носители, гомогенный и гетерогенный катализ, реакции кросс-сочетания, водные реакционные среды.

кросс-сочетания, является природа лиганда в комплексе палладия, используемого в качестве катализатора. С учетом современных требований по защите окружающей среды вполне объяснима тенденция вместо токсичных, легко окисляющихся кислородом воздуха и дорогих, традиционных триорганодифосфинов использовать другие типы лигандов. В качестве таких лигандов предложены азотсодержащие соединения различных классов, но 1,2-азольные лиганды изучены мало. Недавно нами было показано, что производные изоксазола и изотиазола способны образовывать комплексы с Pd(II), которые проявляют высокую каталитическую активность в реакциях кросс-сочетания в водных средах («зеленая химия») [4–6]. Инкапсулирование изоксазольных и изотиазольных комплексов палладия в матрицу силикагеле-



В настоящей работе с целью разработки фундаментальных основ экологически безопасных каталитических нанотехнологий синтеза лекарственных препаратов, природных соединений, жидких кристаллов, новых материалов, гербицидов и красителей разработаны методы нековалентной модификации углеродных и оксидных носителей – силикагеля, оксида алюминия и титана, направленно синтезированными 1,2-азольными лигандами. Дизайн лигандов выполнен таким образом, чтобы целевая молекула наряду с электроноакцепторным азольным кольцом содержала электронодонорный фрагмент. Предполагалось, что наличие двух противоположных по природе координационных центров в составе лиганда позволит стабилизировать палладий в разных степенях окисления и избежать преждевременного образования Pd-черни и дезактивации катализатора в условиях гомогенного катализа. В случае гетерогенного катализа введение в молекулы 1,2-азолов 1-нафтильного и 4-бифенильного заместителей должно способствовать, по нашим расчетам, удерживанию лигандов в матрице оксидного носителя и более прочному связыванию с поверхностью углеродных носителей при гетерогенизации за счет π - π стекинга. На основе этих предпосылок в рамках общего синтетического подхода (рис. 1), разработанного белорусскими коллегами, были получены новые азольные лиганды – соответствующие оксимы 5-(нафталин-1-ил)- и 5-[(1,1'-бифенил)-4-ил]изоксазол-3-карбальдегидов (L^1 и L^2).

В результате расчетов установлено, что изоксазольные лиганды в комплексах координируются с палладием по бидентатно-циклическо-



24

му типу атомами азота гетероцикла и экзоциклической оксимной группы с образованием пятичленного металацикла. В комплексе $L1PdCl_2$ нафтильный фрагмент развернут на $48,1^\circ$ относительно остальной части молекулы, которая практически плоская. В комплексе $L2PdCl_2$ удаленный фенильный остаток также повернут на 48° относительно плоскости молекулы, тогда как во фрагменте изоксазол-фенил выход бензольного кольца из общей плоскости не превышает $0,2^\circ$.

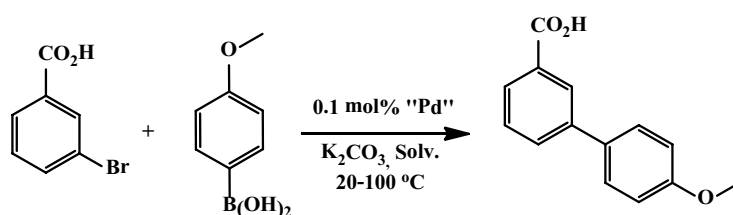
В узле PdN_2Cl_2 выход атомов из плоскости не превышает $1,7^\circ$ для комплекса L1PdCl_2 и $0,14^\circ$ для комплекса L2PdCl_2 . Структурные характеристики гетероциклических и оксимных фрагментов лигандов для обоих комплексов очень близки и незначительно отличаются от соответствующих параметров для комплексов 5-(2,5-диметилфенил) изоксазол-3-карбальдегидоксима с дихлоридом меди(II), определенных методом РСА. В частности, отличия в длинах связей гетероцикла составляют не более $0,05 \text{ \AA}$.

Для испытания комплексов LiPdCl_2 и L2PdCl_2 в качестве катализаторов реакции Сузуки были получены их устойчивые суспензии в метаноле (0,01 M). Исходя из стоящих перед нами задач по адаптации новых катализаторов к водным средам и разработке основ экологически безопасных процессов, при выборе растворителей для реакции мы ориентировались на воду или водно-спиртовые среды. В качестве модельной реакции Сузуки была выбрана реакция склонной к протодеборированию 4-метоксифенилборной кислоты с 3-бромбензойной кислотой. Испытания проводили в 50% водном метаноле при 20°C и 75 °C или в воде при 100°C в присутствии 0,1 мол% комплексов палладия и карбоната калия в качестве основания. Все изученные реакции осуществляли на воздухе в отсутствие инертной атмосферы. При внесении катализатора в реакционную смесь уже при

комнатной температуре через 2–3 мин. наблюдалось полное растворение суспензий с видимым изменением исходного цвета комплексов, и реакции осуществлялись в гомогенных условиях. Результаты испытания каталитической активности комплексов представлены в *табл. 1*.

Таблица 1.

Данные по испытанию комплексов палладия $L1PdCl_2$ и $L2PdCl_2$ в реакции 3-бромбензойной кислоты с 4-метоксифенилборной кислотой¹



Опыт	Pd	T ² , °C	Время, мин	Выход ^{3,4} , %
1	L1PdCl ₂	20	15	99
2	L1PdCl ₂	75	2	100
3	L1PdCl ₂	100	1	98
4	L2PdCl ₂	20	20	100
5	L2PdCl ₂	75	2	99
6	L2PdCl ₂	100	1	100
7	Na ₂ PdCl ₄	20	10 4 ч	89 92
8	Na ₂ PdCl ₄	100	5	99

1. $ArBr$ (0,5 ммоль), $Ar'B(OH)_2$ (0,6 ммоль), K_2CO_3 (1,25 ммоль), по 2,5 мл H_2O и $MeOH$ или 5 мл H_2O

2. Указаны данные при 20°C и 75°C в водном метаноле, при 100°C в воде

3. Выход по данным спектров ЯМР ^1H относительно 0,5 ммоль тетрахлорэтана

4. Наблюдалось образование 4,4'-диметокси-1,1'-бифенила в следовых количествах (1–2%)

Как следует из полученных данных, комплексы L1PdCl₂ и L2PdCl₂ при повышенной температуре (75°C или 100°C) проявляют высокую каталитическую активность. Реакции завершаются за 1–2 мин. с образованием целевой 4'-метокси[1,1'-бифенил]-3-карбоновой кислоты с выходом 98–100 % (опыты 2, 3, 5 и 6), и до окончания реакций ни в одном случае не наблюдалось образования палладиевой черни. После окончания реакции происходило осаждение весьма крупных агрегатов Pd, поэтому за ходом реакций легко следить визуально. Анализ реакционных смесей методом ТСХ в момент выделения черни всегда показывал отсутствие арилгалогенида. Сам раствор при этом оставался практически бесцветными, что косвенно свидетельствует о низком содержании коллоидного (наноразмерного) палладия в растворе и продуктах реакций. Палладиевая чернь легко отделяется от продуктов реакции простым фильтрованием или

В качестве источника окиси титана использовался тетраизопропилат титана. Алкоголяты титана значительно легче взаимодействуют с водой, чем алкоксиды кремния, поэтому кислотный катализ стадии гидролиза не потребовался. Не использовался также и катализатор гелеобразования. Золь-гель процесс с участием $\text{Ti}(\text{i-PrO})_4$ проводили при температуре $5\text{--}10^\circ\text{C}$ при таком же соотношении реагентов, что и в случае получения золь-гель силикагеля.

Важно отметить, что в ходе оптимизации золь-гель процесса мы обнаружили, что азольные лиганды, будучи введенными золь-гель методом в матрицу силикагеля или оксида титана, удерживаются в ней достаточно прочно и не переходят в раствор. Так, оксим 5-(нафталин-1-ил)изоксазол-3-карбальдегида (лиганд L^1), инкапсулированный в силикагель золь-гель методом в количестве 0,3 ммоль/г, практически не экстрагируется кипящим метанолом в течении 2 ч (потеря веса не превышала 1% от веса исходного лиганда). Однако если нанесение провести методом обычной пропитки при постепенном испарении растворителя, то с такого образца азольный модификатор смывается спиртом в течение нескольких минут уже при комнатной температуре практически нацело. Прочное удерживание 1,2-азольных лигандов в матрице силикагеля, полученного золь-гель методом, открывает еще один путь получения композитных материалов для катализа. Этот подход основан на процессе обмена лигандов, находящихся в координационной сфере комплексов Pd(II) или Pd(0), на другие более координирующиеся лиганды. Данный метод широко используется для получения комплексов различных переходных металлов. Следует отметить, что комплексы палладия с 1,2-азольными лигандами получены нами именно таким способом – обменом хлоридных лигандов в Na_2PdCl_4 . Обмен лигандами в случае комплексов Pd(0) протекает не так однозначно, поскольку далеко не все

лиганды, координирующиеся по палладию в степени окисления ноль, способны его стабилизировать в достаточной степени. Например, молекулы диметилформамида (ДМФА) и диметилсульфоксида (ДМСО) легко образуют устойчивые комплексы с Pd(II) – $(\text{HCONMe}_2)_2\text{PdCl}_2$, $(\text{Me}_2\text{SO})_2\text{PdCl}_2$. Однако при растворении в этих растворителях комплекса Pd(0) с π -акцепторным олефиновым лигандом, Pd(dba)_2 (dba – дибензилиденацетон), в результате быстрого обмена лигандами dba быстро переходит в раствор, а получающиеся комплексы Pd(0) с ДМФА и ДМСО неустойчивы и разлагаются с образованием мелкодисперсной Pd-черни. Аналогичный процесс происходит также при действии на Pd(dba)_2 1,2-азольных лигандов в растворе. Если азольный лиганд гетерогенизирован на поверхности носителя, то первичный обмен лигандами с Pd(dba)_2 приводит к осаждению атомом палладия на азольные лиганды. Далее на этих атомах палладия, как центрах кристаллизации, происходит образование кластеров палладия определенного размера. Таким образом, формирование наночастиц палладия будет происходить на поверхности модифицированного 1,2-азолами силикагеля, а не в растворе, как в большинстве современных методов получения мелкодисперсных переходных металлов. Поэтому ожидалось, что таким путем можно добиться высокой дисперсности нанесенного палладия, а образующиеся кластеры палладия будут прочно связаны с носителем (рис. 2).

Каталитические композиты на основе наночастиц палладия и модифицированного азолами силикагеля были получены по методике, аналогичной получению образцов с азольными комплексами палладия (моль-

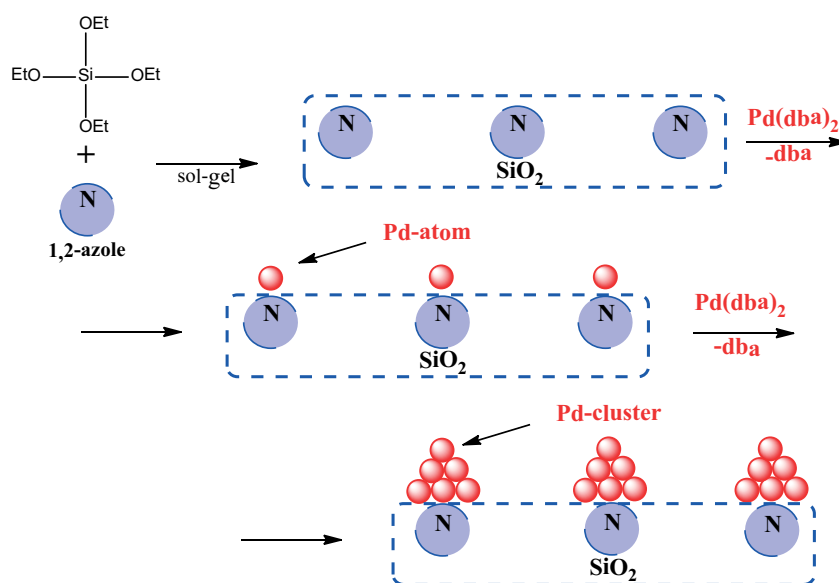


Рис.2. Схема осаждения наночастиц Pd на модифицированный 1,2-азолами золь-гель силикагель

Данные, полученные нами ранее на заключительном этапе проекта РФФИ 11-08-00353-а по эффективному катализу реакций кросс-сочетания Na_2PdCl_4 , гетерогенизированным на доступной Al_2O_3 для хроматографии, побудили нас испытать сорбент этого типа для нанесения азольных лигандов и палладия. В качестве носителя была выбрана доступная окись алюминия для хроматографии с размером зерен

Для испытания в качестве носителей углеродных материалов первоначально планировалось осуществить разработку методов иммобилизации 1,2-азольных комплексов палладия на углеродные нанотрубки, нановолокна, терморасширенный графит и активированный уголь. Однако результаты предварительных исследований в рамках совместного проекта РФФИ с украинской группой (грант 13-08-90409-Укр-ф а) по нанесению

нанодисперсного палладия на углеродную ткань (УТ), выпускаемую промышленно в больших объемах и поэтому очень дешевую, побудили нас из практических соображений изучить именно этот углеродный носитель. Из большого ассортимента УТ мы выбрали образец ткани «Бусофит Т-055» производства СПО «Химволокно» (г. Светлогорск, Беларусь), используемой в качестве материала фильтров для очистки промышленных стоков от примесей органических веществ и обладающей высокой сорбционной емкостью. Бусофит обладает высокой прочностью, устойчив к истиранию и имеет удельную поверхность более 1000 м²/г. Однако этот носитель является микропористым, и для облегчения процессов массообмена во время катализа он был дополнительно подвергнут активации (увеличение размеров пор) действием концентрированной щелочи при нагревании. Процесс нанесения азольного лиганда L¹ и палладия проводили методом пропитки по следующей методике: к 1 г УТ, разрезанной на кусочки (5х5 мм), прибавили 1 мл 0,1 М (0,1 ммоль) раствора L¹ в метаноле. Увлажненную ткань сначала высушили при комнатной температуре на воздухе (~30 мин.), затем при 80°C в течение 1 ч. После этого к модифицированному азолом носителю прибавили 1 мл (0,1 ммоль) 0,1 М раствора Na₂PdCl₄ в метаноле. После высушивания получили 1,041 г (~100%) L1PdCl₂/УТ. По данным атомно-абсорбционной спектроскопии, образец содержит 1 вес % Pd (0,1 ммоль/г). Исследование L1PdCl₂/УТ методом РФЭС показало наличие окисленной формы палладия.

Следует отметить, что разработанный метод с использованием минимального объема пропитывающего раствора одинаково хорошо работает не только в случае углеродной ткани, но и углеродных нанотрубок, нановолокон и активированного угля.

Испытания каталитической активности полученных композитов

$\text{LPdCl}_2@\text{MO}_2$, $\text{PdNP/LI}@\text{SiO}_2$, $\text{L1PdCl}_2/\text{SiO}_2$, $\text{L2PdCl}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ и $\text{L1PdCl}_2/\text{YT}$ проверка возможности их многократного использования проводилась в реакциях Сузуки, Хека и Соногаширы. Для корректности сравнения эффективности 1,2-азольного лиганда в гомогенном и гетерогенном катализе для каждого процесса были выбраны одинаковые модельные реакции и идентичные условия их проведения.

В качестве модельной реакции Сузуки, как и в гомогенном варианте катализа (см. табл. 1), была выбрана реакция 4-метоксифенилборной кислоты с 3-бромбензойной кислотой. Испытания оксидных и углеродных композитов (0,1 мол% Pd) проводили в водной среде без добавок органического растворителя при температуре 100°C при использовании карбоната калия в качестве основания. В этих условиях 3-бромбензойная кислота под действием основания быстро превращается в соль, и в реакцию кросс-сочетания вступает 3-бромбензоат калия. Все изученные реакции осуществлялись на воздухе в отсутствие инертной атмосферы. Полученные результаты испытаний представлены в таблице 2.

Прежде всего, необходимо отметить, что испытанные гетерогенные катализаторы, как на основе азольных комплексов палладия, так и наночастиц палладия, проявляют очень высокую активность: все реакции завершались в данных условиях за 15 мин. (продолжительность реакции не оптимизировалась!) с образованием целевого продукта кросс-сочетания, 4'-метокси [1,1'-бифенил]-3-карбоновой кислоты, с высоким выходом. В ходе реакций с участием инкапсулированных и нанесенных комплексов палладия уже на 1-м рецикле первоначально практически бесцветные образцы $\text{LPdCl}_2@\text{MO}_2$, $\text{L2PdCl}_2/\text{SiO}_2$ и $\text{L1PdCl}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ постепенно темнели и превращались в серые порошки, внешне похожие на образец на основе наночастиц палладия PdNP/L1@SiO_2 .

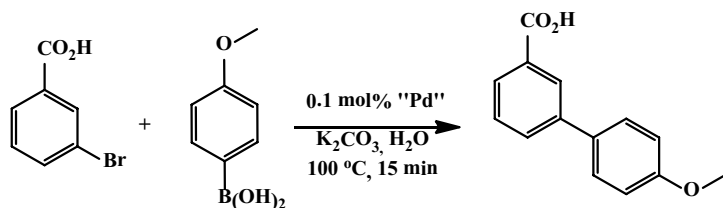
Разработанные гетерогенные катализаторы на основе азольных лигандов оказались пригодными для многократного использования. Регенерацию катализаторов проводили путем центрифугирования реакционных смесей и двухкратной промывкой катализатора водой и спиртом. Как видно из полученных данных (табл. 2), активность катализаторов после 10 рециклов остается на одном уровне. Анализ реакционной смеси методом атомно-абсорбционной спектроскопии после завершения реакции и отделения катализатора центрифугированием или фильтрованием не выявил в растворе наличия палладия в диапазоне 1 м.д. (в пределах чувствительности метода). Этот результат косвенно указывает на то, что в ходе каталитического процесса необратимой смывки переходного металла с твердого носителя в раствор не происходит. При использовании традиционных гетерогенных катализаторов процесс смывки очень

заметен, и количество палладия в растворе после завершения реакции нередко превышает 20 м.д. Возможно, что в случае мезопористых носителей с инкасулированными и нанесенными азольными комплексами палладия процесс перехода палладия в раствор, участие в каталитическом цикле кросс-сочетания и его последующее осаждение на подложку (по азольным центрам) происходят обратимо. Поскольку азольные лиганды удерживаются в порах оксидного носителя достаточно прочно, то изменения количества центров кристаллизации («зародышей») по ходу реакций не происходит, и размер кластеров меняется незначительно. Можно предположить, что именно поэтому активность разработанных каталитических композитов не меняется даже после 10 рециклов. Сравнение сопоставимых данных по гомогенному и гетерогенному катализу (табл. 1 и 2) косвенно подтверждает предположение о квазигетерогенном характере новых катализаторов.

В реакции Хека 3-бромбензойной кислоты с акриловой кислотой и в реакции Соногаширы 3-бром-

Таблица 2.

*Данные по многократному использованию
LPdCl₂@MO₂, PdNP/LI@SiO₂, L2PdCl₂/SiO₂,
L1PdCl₂/Al₂O₃ и L1PdCl₂/УТ в реакции 3-бромбензой-
ной кислоты с 4-метоксифенилборной кислотой¹*



Рецикл	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Pd	Выход ² , %									
L1PdCl ₂ @SiO ₂	93	94	91	92	97	93	93	96	95	93
L2PdCl ₂ @SiO ₂	96	92	94	95	94	96	96	94	94	95
L1PdCl ₂ @TiO ₂	91	94	96	96	94	94	92	95	98	96
L2PdCl ₂ @TiO ₂	94	94	95	96	97	98	97	96	92	94
PdNP/L ¹ @SiO ₂	97	94	93	94	95	96	99	94	96	98
L2PdCl ₂ /SiO ₂	92	96	92	93	94	92	93	95	93	94
L1PdCl ₂ /Al ₂ O ₃	95	97	92	93	96	97	95	95	97	96
L1PdCl ₂ /YT	95	96	97	97	98	97	97	95	93	96

1. 0,5 ммоль Ar-Br, 0,6 ммоль Ar'B(OH), 1,25 ммоль K₂CO₃, 5 мл воды, 100°C, 15 мин.

2. Препаративные выходы (выходы по данным ¹H ЯМР спектроскопии ~100%)

бензойной кислоты с фенилацетиленом синтезированные композиты $\text{LPdCl}_2/\text{MO}_2$, PdNP/L1/SiO_2 , $\text{L2PdCl}_2/\text{SiO}_2$, $\text{L1PdCl}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ и $\text{L1PdCl}_2/\text{YT}$ также показали высокую каталитическую активность, которая сохранялась на постоянном уровне после 10 рециклов в реакции каждого типа.

Поскольку новые гетерогенные катализаторы совершенно устойчивы и выдерживают нагревание в водной среде в течение 10 рециклов, планировалось оптимизировать полученные на модельных реакциях данные для получения практически важных соединений в условиях, позволяющих сократить количество нежелательных отходов, отказаться от использования органических растворителей в качестве реакционной среды и тем самым уменьшить вредное воздействие на природу при масштабном применении реакций кросс-сочетания. Поскольку все разработанные каталитические композиты продемонстрировали одинаково высокую эффективность, то при выборе для этих целей катализатора мы исходили из синтетической доступности азольных лигандов, стоимости оксидного материала носителя и технологичности его синтеза. По этим критериям в качестве объекта испытаний был выбран композит $\text{L1PdCl}_2@\text{SiO}_2$ на основе оксима 5-(нафталин-1-ил) изоксазол-3-карбальдегида и мезопористого силикагеля, получаемого по разработанному нами модифицированному золь-гель методу. Тестирование композита проводилось на трех типах реакций кросс-сочетания с целью синтеза соединений, имеющих практическое значение, а также дополнительной оптимизации каталитической системы с привлечением «проблемных» субстратов.

Проблемными в реакции Сузуки являются, как отмечалось выше, арилборные кислоты, склонные к протодеборированию. В результате часть арилборной кислоты подвергается гидролизу с образованием соответствующего арена, т.е. расходуется нецелевым образом. Как правило, снижение температуры проведения реакции позволяет уменьшить этот процесс до минимума. По этой причине разработка для реакции Сузуки каталитических систем, работающих при невысокой температуре, а оптимально, при комнатной температуре, является в настоящее время

очень актуальной задачей (JACS, 130, 6686, 2008; Chem. Sci., 4, 916, 2013). Однако при невысокой температуре большинство арилборных кислот плохо растворимы в воде даже в присутствии оснований средней силы (карбонаты и фосфаты щелочных металлов), а применение сильных оснований – щелочей – при наличии в субстратах чувствительных функциональных групп нежелательно. По этой причине была предпринята попытка замены воды на водно-органический растворитель, при этом мы ориентировались на растворитель, минимально отличающийся по составу от молекулы воды. Таким растворителем, очевидно, является метанол. Оказалось, что в смеси вода-метанол (1:1 по объему) при комнатной температуре хорошо растворимы все компоненты реакционной смеси: арилгалогенид, арилборная кислота и карбонат калия. Температура кипения такой смеси составляет ~ 75 °C. При этой температуре при катализе $\text{L1PdCl}_2@\text{SiO}_2$ (0,1 мол% Pd) модельная реакция Сузуки 4-метоксифенилборной кислоты с 3-бромбензойной кислотой завершалась за 1-2 мин. с образованием продукта кросс-сочетания с количественным выходом. Такой мощный эффект активации по сравнению с проведением реакции в воде (100°C, 15 мин.) побудил нас провести испытания катализатора при комнатной температуре. Тот факт, что реакция протекала при комнатной температуре, особого удивления не вызвал, в литературе известно несколько примеров эффективного проведения реакции Сузуки на гетерогенном катализаторе при невысоких температурах [J. Phys. Chem. C, 115, 15772, 2011; Pd-nanoparticles @porous SiO_2 yolk-shell, катализатор типа «желток в оболочке» (не ядро-оболочка); 0,1 мол% Pd, ДМФА-вода (20:1), 20°C, 6 ч, 100 %]. Необычной оказалась продолжительность процесса кросс-сочетания на $\text{L1PdCl}_2@\text{SiO}_2$ (0,1 мол% Pd) – всего 20 мин. Регенерированный катализатор был использован повторно в синтезах

5-арилсалициловых кислот и их гетероциклических аналогов из соответствующих арилбромидов и арилборных кислот. Полученные результаты представлены на *рис. 4*. Среди синтезированных биариллов и гетероаналогов арилированные салициловые кислоты, тиофены и фураны.

Так, из 2,4-дифторфенилборной кислоты и 5-бромсалициловой кислоты при катализе регенерированным $\text{LiPdCl}_2 @ \text{SiO}_2$ с количественным выходом была получена 2',4'-дифтор-4-гидрокси[1,1'-бифенил]-3-карбоновая кислота (дифлунизал) – нестероидное противовоспалительное лекарственное средство (НПВС) с анальгетическим и жаропонижающим действием значительно более эффективное, чем аспирин.

Высокая каталитическая активность композита $\text{LiPdCl}_4 @ \text{SiO}_2$ в водном метаноле позволила значи-

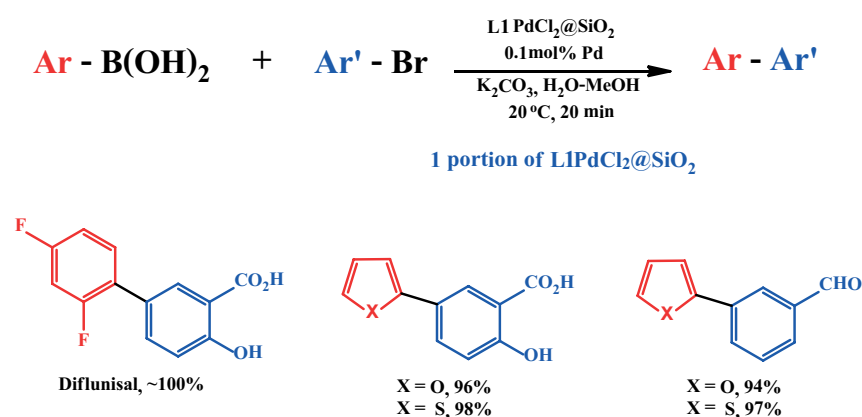


Рис.4. Катализ реакции Сузуки композитом $L1PdCl_2@SiO_2$ при комнатной температуре

тельно интенсифицировать процесс кросс-сочетания и в реакции Хека арилбромидов с акриловой кислотой, бутилакрилатом и стиролом. Все представленные на *рис. 5* синтезы выполнены на одной порции катализатора после регенерации. В отличие от процесса в воде, в данном случае для активации катализатора при первом использовании добавки формиата натрия не требуются. Роль активатора-восстановителя в этих условиях выполняет метанол.

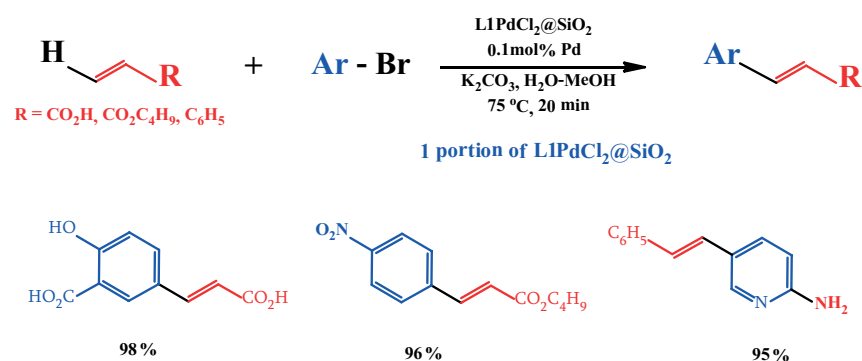
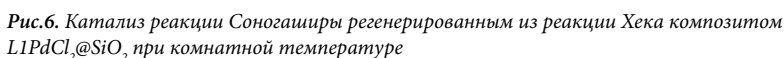


Рис.5. Катализ реакции Хека композитом $LiPdCl_4@SiO_2$ в водном метаноле



Таким образом, выполненное совместное исследование позволило на основе азольных лигандов разработать несколько типов новых гомогенных и многофазовых гетерогенных катализаторов, которые проявляют высокую эффективность в реакциях кросс-сочетания с привлечением широкого круга арилгалогенидов, арилборных кислот, терминальных олефинов и ацетиленов, включая гетероциклические аналоги. Полученные фундаментальные данные могут быть использованы в экономических и экологически безопасных технологиях тонкого органического синтеза.

1. *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions* / ed. F. Diederich, P. J. Stang. New York: Wiley-VCH, 1998. – P. 203.
2. *Topics in Current Chemistry – Cross-Coupling Reactions* / ed. N. Miyaura. Heidelberg: Springer, 2002. – Vol. 219. – P. 131.
3. *Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis* / ed. E. Negishi. New York: John Wiley and Sons, 2002. – Vol. 1. – P. 1051.
4. Поткин В.И., Бумагин Н.А., Зеленковский В.М., Петкевич С.К., Зубенко Ю.С., Ливанцов М.В., Белов Д.С.
Синтез и структура комплексов палладия(II) с оксимом 5-(п-толил)изоксазол-3-карбальдегида и 4,5-дихлоризоксазол-3-карбоксилатным фрагментом // Доклады НАН Беларуси. – 2011. – Т. 55. – С. 52–57.
5. Potkin V.I., Bumagin N.A., Petkevich S.K., Lyakhov A.S., Rudakov D.A., Livantsov M.V., Golantsov N.E.
5-(p-Tolyl)isoxazol-3-amine-Palladium(II) Complex- Preparation, Structure, and Catalytic Application in the Suzuki-Miyaura Reaction in Water // Synthesis. – 2012. – Vol. 44. – PP. 151–157.
6. Бумагин Н.А., Петкевич С.К., Клецков А.В., Ливанцов М.В., Голанцов Н.Е., Поткин В.И.
Изоксазол-3-ил(изотиаол-3-ил)-1,2,4-триазолы, тетразолы и 1,3,4-оксадиазолы: синтез, комплексы с палладием, использование в катализе // Химия гетероциклических соединений. 2013. – № 10. – С. 1633–1649.
7. Поткин В.И., Бумагин Н.А., Петкевич С.К., Клецков А.В., Зубенко Ю.С., Голанцов Н.Е., Ливанцов М.В., Белов Д.С., Веселов И.С.
Катализаторы на основе комплексов палладия(II) с изоксазолами и изотиазолами для реакции Сузуки // Доклады НАН Беларуси. – 2013. – Т. 57. – С. 67–73.

Homogeneous and Heterogeneous Catalysts with 1,2-Azole Ligands for Cross-Coupling Reactions in Aqueous Media *

Vladimir I. Potkin –

Corresponding Member of National Academy of Sciences of Belarus,
Professor, doctor of chemical science, Head of organic chemistry
Department, The Institute of Physical Organic Chemistry of the
National Academy of Sciences of Belarus 220072,
Belarus, Minsk, Surganov Str., 13
potkin@ifoch.bas-net.by

Convenient methods for synthesis of functionally substituted 1,2-azoles were developed, and highly active homogeneous and heterogeneous palladium catalysts based on them were developed for cross-coupling reactions in aqueous media. Distinctive features of the new catalysts are the highest catalytic activity, reusability without loss of activity and ability to work effectively in aqueous media. There have been developed methods for the synthesis of isoxazole ligands and their complexes with Pd(II), methods of non-covalent functionalization of mesoporous oxide and carbon supports with azoles, methods of Pd(II) and Pd(0) (Pd nanoparticles) deposition on the resulting hybrid materials. It has been shown that the application water or aqueous methanol as reaction media leads to a significant intensification of catalytic process compared to conventional organic solvents – catalytic reactions carried out with almost quantitative yields, their duration is reduced by an order or more. It was found that in 50% aqueous methanol, the effectiveness of new heterogeneous catalysts is so high that the reactions are completed in 20-30 minutes, even at room temperature with high yields. The quantity of introduced Pd catalyst does not exceed 0.1 mol%, i.e. 1000 times less than the quantity of reagents. The absence of by-products makes it possible to exclude from the process laborious and expensive chromatographic methods of isolation and purification of target compounds.

References

1. *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions* / ed. F. Diederich, P. J. Stang. New York: Wiley-VCH, 1998. – P. 203.
2. *Topics in Current Chemistry – Cross-Coupling Reactions* / ed. N. Miyaura. Heidelberg: Springer, 2002. – Vol. 219. P. 131.
3. *Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis* / ed. E. Negishi. New York: John Wiley and Sons, 2002. – Vol. 1. – P. 1051.
4. **Potkin, V. I., Bumagin, N. A., Zelenkovskii, V. M., Petkevich, S. K., Zubenko, Yu. S., Livantsov, M. V., Belov, D. S.** Synthesis and structure of palladium(II) complexes with 5-(p-tolyl)-isoxazole-3-carbaldehyde oxime and 4,5-dichloroisothiazole-3-carboxylate fragment // Doklady Natsional'noi Akademii Nauk Belarusi. 2011. – Vol. 55. – PP. 52–57.
5. **Potkin V.I., Bumagin N.A., Petkevich S.K., Lyakhov A.S., Rudakov D.A., Livantsov M.V., Golantsov N.E.** 5-(p-Tolyl)isoxazol-3-amine-Palladium(II) Complex- Preparation, Structure, and Catalytic Application in the Suzuki-Miyaura Reaction in Water // Synthesis. – 2012. – Vol. 44. – PP. 151–157.
6. **Bumagin N.A., Petkevich, Kletskov A.V., Livantsov M.V., Golantsov N.E. Potkin V.I.** Isoxazol-3-yl(Isothiazol-3-yl)-1,2,4-Triazoles, Tetrazoles, and -1,3,4-Oxadiazoles: Synthesis, Palladium Complexes, and Catalytic Applications // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2014. – Vol. 49. PP. 1515–1529.
7. **Potkin V.I., Bumagin N.A., Petkevich, Kletskov A.V., Zubenko Yu.S., Golantsov N.E., Livantsov M.V., Belov D.S., Veselov I.S.** Catalysts based on coordination compounds of palladium (II) with substituted isoxazoles and isothiazoles for the Suzuki reaction // Doklady Natsional'noi Akademii Nauk Belarusi. – 2013. – Vol. 57. – PP. 67–73.

33

Гетерогенность и периодичность в проблемах динамической оптимизации *

Вельов В.М., Давыдов А.А.

В заметке кратко изложены основные направления исследований, проведенных в рамках выполнения совместного российско-австрийского проекта, и сформулирован ряд полученных фундаментальных результатов. Указаны возможные области применения этих результатов.

Ключевые слова: динамическая оптимизация, оптимальное управление, гетерогенность, принцип максимума, периодичность.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-01-91004-АНФ-а).

Математическое моделирование процессов различной природы приводит к анализу управляемых динамических систем, в которых одна или несколько переменных имеют характерную черту неоднородности. Эта черта – важная особенность большинства современных моделей популяционных, экономических и социальных процессов. В человеческой популяции, например, параметрами неоднородности могут быть возраст, предпочтения, состояние здоровья, достаток и т.п. В чисто экономическом контексте неоднородность может отражать разнообразие существующих технологий или продуктов. Понятно, что это разнообразие зависит от инвестиций в научные исследования и опытные разработки, что в итоге приводит к динамическим моделям изучаемых процессов, в которых сама область неоднородности становится управляемой. Аналогичные модели возникают и в развивающейся с недавних пор пространственной экономике.

Анализ и оптимизация управляемых динамических систем с присущей им неоднородностью были одними из основных направлений исследований в рамках совместного австрийско-российского проекта «Внутренняя неоднородность и периодичность в проблемах динамической оптимизации» (проект 10-01-91004-АНФ-а). В части из этих моделей неоднородность представляла собой «возраст» агентов, который в конкретных приложениях может иметь различное смысловое значение. Одна из моделей систем с возрастной структурой, которые изучались в проекте, задается следующей сильно нелинейной системой уравнений:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial a} \right) y(t, a) &= f(t, a, y(t, a), z(t), u(t, a), v(t)) \\ y(t, 0) &= \varphi(t, z(t), v(t)), \quad y(0, a) = y_0(a) \\ z(t) &= \int_0^{\omega} h(t, a, y(t, a), u(t, a), v(t)) da \\ &\quad u(t, a) \in U, \quad v(t) \in V \end{aligned}$$

где $t \in [0, T]$ – время, а a – возраст, $y(t, a)z(t)$, – характеристики состояния системы, $v(t)$ – управления, удовлетворяющие заданным ограничениям. Промежуток $[0, T]$ управления процессом может быть как конечным так и бесконечным, а функционал качества управления этой системой может иметь вид

$$\int_0^T \int_0^\omega g(t, a, y(t, a), z(t), u(t, a), v(t)) da dt$$

Цель управления – максимизация этого функционала.

Одним из центральных результатов современной математической теории оптимального управления является открытый в конце 50-х гг. XX в. Л.С.Понтрягиным и его учениками знаменитый принцип максимума, доставляющий общее необходимое условие оптимальности управления. Однако серьезные трудности при анализе многих экономических задач оптимального управления связаны с тем обстоятельством, что такие задачи, например, задачи анализа процессов экономического роста, естественно формулируются как задачи оптимального управления на бесконечном интервале времени. Появление бесконечного интервала планирования приводит к различным «патологическим» эффектам в соотношениях принципа максимума для таких задач. В частности, здесь могут нарушаться

**ВЕЛЬОВ**

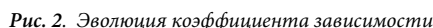
Владимир Михайлович

профессор, кандидат физико-математических наук, глава исследовательского объединения ORCOS, Венский технологический университет, Австрия.

**ДАВЫДОВ**

Алексей Александрович

доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой Владимирского государственного университета имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых.



Другим важным классом задач проекта является анализ моделей, для которых области неоднородности систем эндогенны и зависят от управляющей

$$y(t, Q(t)) = \varphi(t, v(t)), \quad u(t, q) \in U, \quad v(t) \in V, \quad t \in [0, T].$$

В первых двух классах процесс моделировался управляемой системой

[illegible]

Heterogeneity and Periodicity in Dynamic Optimization Problems *

Vladimir M. Veliov –

Professor, PhD, Head of Research Unit ORCOS,
Vienna University of Technology, Argentinierstrasse
8,1040 Vienna, Austria
e-mail: veliov@tuwien.ac.at

Alexey A. Davydov –

Professor, Doctor of Physico-mathematical Sciences, Head of
Department, Vladimir State University named
after Alexander and Nikolay Stoletovs
600000, Vladimir, Gorkogo 87, Russia
e-mail: davydov@vlsu.ru

Abstract

This note presents a short review of the research conducted within a bilateral Austrian-Russian project. Some main results on control of heterogeneous systems are briefly presented and several fields of application are indicated.

Keywords: Dynamic optimization, optimal control, heterogeneity, maximum principle, periodicity.

References

1. **Aseev S., Veliov V.M.**
Maximum principle for problems with dominating discount. Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems, ser. B, 19(1–2): 43–63, 2012
2. **Aseev S., Veliov V.M.**
Needle variations in infinite-horizon optimal control. To appear in Contemporary Mathematics (AMS), 2014. Research Report 2012-04, ORCOS, TU Wien, 2012
3. **Prskawetz A., Tsachev T., Veliov V.M.**
Optimal education in an age-structured model under changing labor demand and supply. Macroeconomic Dynamics, 16 (2): 1–15, 2012.
4. **Kuhn M., Wrzaczek S., Prskawetz A., Feichtinger G.**
Externalities in a life-cycle model with endogenous survival. Journal of Mathematical Economics, 47: 627–641, 2011.
5. **Simon C., Skritek B., Veliov V.M.**
Optimal immigration age-patterns in populations of fixed size. J. Math. Anal. and Appl., 405(1): 71–89, 2013.
6. **Belyakov A., Veliov V.M.**
Constant versus periodic fishing: age structured optimal control approach. To appear in Mathematical Modelling of Natural Phenomena, 2014. Research Report 2014–01, ORCOS, TU Wien, 2014.
7. **Belyakov A., Tsachev T., Veliov V.M.**
Optimal control of heterogeneous systems with endogenous domain of heterogeneity. Applied Mathematics and Optimization, 64: 287–311, 2011.
8. **Skritek B., Tsachev T., Veliov V.M.**
Optimality conditions and the Hamiltonian for a distributed optimal control problem on controlled domain. Applied Mathematics and Optimization, to appear in 2014, DOI 10.1007/s00245-014-9237-5.
9. **Belyakov A.O., Davydov A., Veliov V.M.**
Optimal cyclic exploitation of renewable resources. Research Report 2013-07, ORCOS, TU Wien, 2013
10. **Davydov A., Shutkina T.**
Uniqueness of a cycle with discounting that is optimal with respect to the average time profit// MMJ. - Vol. 17 (2011). - No.2. - PP. 80-87.
11. **Davydov A., Shutkina T.**
Generic Profit Singularities of One-Parameter Cyclic Processes with Discount//Journal of Mathematical Sciences, December 2013. - Vol. 195, Issue 3. - PP. 288–298.
12. **Davydov A.A., Platov A.S.**
Optimal Stationary Solution in Forest Management Model by Accounting Intra-Species Competition// MMJ. - Vol. 12 (2012). - No. 2. - 269–273
13. **Panesh A.A., Platov A.S.**
Optimization of size-structured population with interacting species //Journal of Mathematical Sciences, January 2013. - Vol. 188, Issue 3. - PP. 293–298.

*

The work was financially supported by RFBR (project № 10-01-91004-ANF-a).

Цифровое структурно-литологическое и геолого-динамическое моделирование россыпных месторождений тяжелых минералов *

Лаверов Н.П., Чиждова И.А., Гожик П.Ф., Хрущев Д.П., Галецкий Л.С., Ковальчук М.С.,
Ремезова Е.А., Свивальнева Т.В., Лаломов А.В., Лобанов К.В., Бочнева А.А.,
Чефранов Р.М., Чефранова А.В., Александрикова М.А.



ЛАВЕРОВ
Николай Павлович

академик, доктор геолого-минералогических наук, научный руководитель Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



ЧИЖОВА
Ирина Александровна

доктор геолого-минералогических наук, ведущий научный сотрудник, Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



ГОЖИК
Петр Феодосиевич

академик НАН Украины, доктор геолого-минералогических наук, директор Института геологических наук НАН Украины.



ХРУЩЕВ
Дмитрий Павлович

профессор, доктор геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник Института геологических наук НАН Украины.



ГАЛЕЦКИЙ
Леонид Станиславович

профессор, доктор геологических наук, заведующий отделом геологии полезных ископаемых Института геологических наук НАН Украины.



КОВАЛЬЧУК
Мирон Степанович

доктор геолого-минералогических наук, заведующий отделом литологии Института геологических наук НАН Украины.



РЕМЕЗОВА
Елена Александровна

доцент, доктор геологических наук, старший научный сотрудник Института геологических наук НАН Украины.



СВИВАЛЬНЕВА
Татьяна Вячеславовна

младший научный сотрудник Института геологических наук НАН Украины.



ЛАЛОМОВ
Александр Валерианович

доктор геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



ЛОБАНОВ
Константин Валентинович

доктор геолого-минералогических наук, заместитель директора Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



БОЧНЕВА
Анна Александровна

кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



ЧЕФРАНОВ
Роман Михайлович

кандидат геолого-минералогических наук, младший научный сотрудник Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



ЧЕФРАНОВА
Анна Викторовна

кандидат геолого-минералогических наук, младший научный сотрудник Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.



АЛЕКСАНДРИКОВА
Марина Андреевна

инженер Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии.

*

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-04-90413-Укр_а).

Получены результаты, которые имеют общую значимость для украинской и российской сторон, а именно:

- разработаны принципы цифрового структурно-литологического (с геолого-динамическим наполнением) моделирования намеченных геолого-промышленных типов россыпей тяжелых минералов (первичный интеллектуальный продукт научной разработки);
- построены экспериментальные образцы моделей типовых перспективных геологических объектов (первый этап внедрения разработки);
- разработаны основы создания целевых экспертных систем, предназначенных для информационно-аналитического обеспечения прогнозирования, поисков, геологической разведки и эксплуатации намеченных геолого-промышленных типов россыпных месторождений (экспертная система разрабатывается как конечный продукт для пользователя).

Ключевые слова: россыпные месторождения тяжелых минералов, структурно-литологическое моделирование, геолого-динамическое моделирование, логико-информационное моделирование, цифровые модели, прогнозирование россыпных месторождений, экспертные системы.

Следует также отметить что, поскольку титаноциркониевая промышленность России и Украины связаны единым технологическим циклом (добыча сырья сконцентрирована на Украине, а его переработка – в России), то совместное исследование

Все вышесказанное подтверждает актуальность проведенного исследования.

- Построение экспериментальных образцов моделей типичных перспективных геологических объектов.

В качестве простейших моделей перспективных участков используются логико-информационные модели, получаемые в результате логико-информа-

корректировками введенного массива информации.

Получены модели по ряду месторождений намеченных типов.

Сбор геологического материала и математический анализ данных

Для построения опытных моделей россыпей были изучены опубликованные и фоновые источники по редкометалльно-титановым россыпям Украины и России (14 источников).

Описаны разрезы продуктивных отложений Малышевской и Краснокутской россыпей Украины (6 разрезов), и месторождения Центральное, Тамбовская область (8 разрезов).

На объектах Самотканского россыпного района Украины (Малышевская и Краснокутская россыпи) и месторождении Центральное (Тамбовская область) были проведены полевые работы с отбором образцов и установлением их фациальной принадлежности (рис. 1).

Отобраны 74 пробы из четырех литолого-фациальных типов отложений (аллювиально-дельтовый, литоральный, мелководно-морской и дюнно-эоловый).

Составлены генерализованные планы и разрезы с использованием предшествующих и новых полученных данных, которые послужили основой для составления модели месторождения.

Для точной реконструкции палео-
фациальных обстановок, необходимо
исследование состава россыпных ас-
социаций и типоморфизма россыпе-
образующих минералов. Для аналити-
ческих работ были выбраны пробы
по наиболее представительным разре-
зам, с максимальным разнообразием
литолого-фациальных типов отложе-
ний. Всего проанализировано: грану-
лометрическим анализом – 64 пробы,
разделение в тяжелой жидкости – 42
объединенные пробы по грануломе-
трическим классам (0,05–0,1 мм и 0,1–
0,25 мм) из разных лито-фациальных
зон, полуколичественный минерало-
гический анализ (42 пробы), фотогра-
фии на электронном микроскопе (рис.
2) (200 зерен основных россыпеобра-

зующих минералов: ильменита, рутила, циркона и лейкоксена) с определением энерго-дисперсионных спектров (230 определений). Для исследования внутренней структуры подготовлены образцы россыпных минералов в полированных шашках (рис. 3) для исследования на микрозонде (80 зерен).

Аналитическое исследование образцов позволило установить литолого-фациальные особенности продуктивных отложений, необходимые для составления геолого-динамических моделей россыпеобразования россыпей в различных фациально-гидродинамических обстановках.

Был проведен статистический анализ полученных результатов, выявлены вариации исследуемых параметров в различных литолого-фациальных зонах, определены комплексные критерии для различных зон.

**Опытные образцы структурно-литологических
(с геолого-динамическим наполнением) моделей
россыпных месторождений тяжелых минералов.**

Полученные закономерности легли в основу структурно-литологической (с геолого-динамическим наполнением) трехмерной модели месторождения Центральное. Методы практического применения моделей изложены в монографии [4].

Корреляционный анализ показал удовлетворительную сходимость фактических и расчетных данных: коэффициент корреляции составил 0,74 для прибрежно-морского комплекса и 0,62 для эолового; предельное значение для доверительной вероятности 0,99 равно 0,25. Таким образом, предлагаемая модель может быть использована для прогнозирования структуры комплексных редкометалльно-титановых прибрежно-морских (с элементами эоловой переработки) россыпей.

Разработанная методология построения структурно-литологических (с геолого-динамическим наполнением) моделей россыпных месторождений тяжелых минералов позволила получить опытные образцы, которые показали высокий уровень их прогнозной функции. Ниже приведены примеры структурно-литологической (с геолого-динамическим наполнением) трехмерной модели титано-циркониевого россыпного месторождения Центральное (Тамбовская область) (рис. 4–6).

Логико-информационные модели россыпных месторождений

Описательные многофакторные многопризнаковые модели золотых россыпных объектов (на примере россыпей золота юго-восточной части Алданского щита) проанализированы логико-информационными методами и получены модели перспективных участков с целью их дальнейшего использования при построении

по трем объектам: титано-циркониевым, золотоносным, касситеритовым россыпям на территории России и Украины.

5. Разработаны теоретические основы создания целевых гибридных экспертных систем, предназначенных для информационно-аналитического обеспечения прогнозирования, поисков, геологической разведки и эксплуатации намеченных геолого-промышленных типов россыпных месторождений.
6. Полученные теоретические результаты обеспечат принципиальную оптимизацию информационно-аналитической и прогнозной функции результирующей комплексной структурно-литологи-

ческой (с геолого-динамическим наполнением) модели и, соответственно, результативность целевых экспертных систем, которые будут создаваться на основе таких моделей как конечный продукт для пользователя.

Дальнейшее развитие предложенного метода моделирования возможно в направлении увеличения мерности моделей, включения в них дополнительных характеристик россыпей и факторов россыпеобразования, использования новых цифровых алгоритмов и статистических моделей, адаптированных к процессам формирования россыпей.

По результатам работ подготовлена коллективная монография “Цифровое структурно-литологическое геолого-динамическое моделирование россыпных месторождений тяжелых минералов” (в печати).

На разных этапах работы по проекту с украинской стороны принимали участие С.П. Василенко, Ю.В. Кирпач, Е.А. Кравченко, Ю.В. Крошко, Л.С. Романюк, Ю.С. Цымбал.

Литература

1. **Быховский Л.З., Тигунов Л.П.**
Титановое сырье России // Российский химический журнал. – 2010. – Т. LIV, № 2. – С. 73–86.
2. **Рихванов Л.П.**
Титан-циркониевые пески месторождений Западной Сибири – как потенциальный источник металлов для развития ядерно-энергетического комплекса / Л. П. Рихванов // Россыпи и месторождения кор выветривания: современные проблемы исследования и освоения. — Новосибирск, 2010. – С. 591–595.
3. **Хрущев Д.П., Лобасов А.П.**
Принципы разработки цифровых структурно-литологических моделей осадочных формационных подразделений // Геологический журнал. – 2006. – № 213. – С. 90–102.
4. **Лаломов А.В., Таболич С.Э.**
Локальные геолого-динамические факторы формирования комплексных прибрежно-морских россыпей тяжелых минералов. – М.: ГЕОС. – 2013. – 223 с.
5. **Чижова И.А.**
Особенности построения интеллектуальных экспертных систем для прогнозной экспресс-оценки перспективных площадей // Электронная Земля: использование информационных ресурсов и современных технологий для повышения достоверности научного прогноза на основе моделирования решений в интегральных информационных полях / Под ред. Ю.М.Арского, Е.П.Велихова, А.Б.Жижченко, Н.П.Лаврова, А.И.Савина. – М.: ВИНТИ РАН. – 2009. – С. 323–331.
6. **Чижова И.А.**
Логико-информационное моделирование при прогнозно-металлогеническом анализе перспективных площадей // Труды Учреждения Российской академии наук Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН: новая серия / Учреждение Российской академии наук Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН. – М. – 1995 – Вып. 4: Современные проблемы рудной геологии, петрологии, минералогии и геохимии – М.: ИГЕМ РАН. – 2010. – С. 59–84.

English ██████████

Digital structural-litological and geological-dynamic modeling of heavy mineral placer deposits *

Nikolay P. Laverov –

Academician, Doctor of geology science,
Supervisor of the Institute, Institute of Geol-
ogy of Ore Deposits, Petrography, Mineral-
ogy and Geochemistry of Russian Academy
of Science (IGEM RAS) 119017, Moscow,
Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: laverov@igem.ru

Irina A. Chijova –

Doctor of geology science, leading researcher, Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry of Russian Academy of Science (IGEM RAS)
119017, Moscow, Staromonetny
per. 35, Russia
e-mail: tchijova@igem.ru

Alexander V. Lalomov –

Doctor of geology science, senior researcher, Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry of Russian Academy of Science (IGEM RAS) 119017, Moscow, Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: lalomov@mail.ru

Konstantin V. Lobanov –

Doctor of geology science, Deputy director,
Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry of
Russian Academy of Science (IGEM RAS)
119017, Moscow, Staromonetny
per. 35, Russia
e-mail: lobanov@igem.ru

Anna A. Bochneva –

PhD in geology, Scientific researcher, Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry of Russian Academy of Science (IGEM RAS)
119017, Moscow, Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: bochneva@mail.ru

Roman M. Chefranov –

PhD in geology, Scientific researcher,
Institute of Geology of Ore Deposits,
Petrography, Mineralogy and Geochem-
istry of Russian Academy of Science
(IGEM RAS) 119017, Moscow,
Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: roman_chefr@mail.ru

Petr F. Gozhik –

Academician, Doctor of geology science,
Head of the Institute of Geological Sciences
of NAS of Ukraine, Ukraine, Kiev 55b, Oles
Honchar St., 01601, Ukraine
e-mail: info@igs-nas.org.ua

Dmitriy P. Khrushchov –

Professor, Doctor of geology science,
Senior Researcher, Institute of Geological
Sciences of NAS of Ukraine, Ukraine, Kiev
55b Oles Honchar St., 01601, Ukraine
e-mail: khrushchov@hotmail.com

Leonid S. Galetskiy –

Professor, Doctor of geology science,
Chief of the mineral deposits geology
department, Institute of Geological
Sciences of the National Academy
of Sciences of Ukraine; 55 B, Oles'
Gonchar St., Kiev, 01601, Ukraine
e-mail: remezova-e@mail.ru

Miron S. Kovalchuk –

Doctor of geology science, Head of the
Lithology department, Institute of Geological
Sciences of the National Academy of
Sciences of Ukraine; 55 B, Oles' Gonchar St.,
Kiev, , 01601a, Ukraine
e-mail: kms1964@ukr.net

Elena A. Remezova –

Associated Professor, Doctor of Geological Sciences, senior researcher, Institute of Geological Sciences of the National Academy of Sciences of Ukraine; 55 B, Oles' Gonchar St., Kiev, 01601, Ukraine
e-mail: remezova-e@mail.ru

Tatiana V. Svivalnieva –

Junior scientist, Institute of Geological
Sciences of the National Academy of
Sciences of Ukraine; 55 B, Oles' Gon-
char St., Kiev, 01601, Ukraine
e-mail: sylvia@ukr.net

Anna V. Chefranova –

PhD in geology, Scientific researcher, Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry of Russian Academy of Science (IGEM RAS)
119017, Moscow, Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: achefra@mail.ru

Marina A. Alexandrikova –

engineer, Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography,
Mineralogy and Geochemistry of Russian
119017, Moscow, Staromonetny per. 35, Russia
e-mail: astera_2000@mail.ru

* *The work was financially supported by RFBR (project № 12-04-90413-Ukr_a).*

Abstract

The main research target is to develop the principles of digital predictive structural-lithological (with geological and dynamic content) modeling of heavy mineral placer deposits (titanium, zirconium, tin, gold, etc.), as the basis for the creation of innovative targeted expert systems for information and analytical support to all phases of research and work aimed at forecasting, prospecting, exploration and exploitation of deposits.

The results, equally important for Russia and Ukraine, are the following:

- there have been developed the principles of digital structural lithological (with geological and dynamic content) modeling for identified geological-industrial types of heavy mineral placer deposits (primary intellectual product of scientific development);
- there have been built models of typical experimental samples of promising geological objects (the first stage of development application);
- there have been developed the basis for the creation of targeted expert systems for information and analytical support to forecasting, prospecting, geological exploration and exploitation of planned geological-industrial types of placer deposits (the expert system is developed as the final product for the user).

The examples of the methodology application for model construction for the largest titanium-zirconium placer deposits in Russia (Centralnoe, Tambov region) and Ukraine (Malyshevskoe, Samotkanskoye placer district) are considered.

Keywords: heavy mineral placer deposits, structural-lithological modeling, geological-dynamic modeling, logical-information modeling, digital models, forecasting of placer deposits, expert systems.

References

1. **Bykhovsky L.Z., Tigunov L.P.**
Russia's raw titanium // Russian Chemical Journal. – 2010. – Vol. LIV, № 2. – P. 73–86.
2. **Rikhvanov L.P.**
Titanium-zirconium sands of the West Siberian deposits as a potential source of metals for the development of a nuclear power complex / L. P. Rikhvanov // Placers and deposits of weathering crusts: Contemporary problems of research and exploitation. — Novosibirsk, 2010. – P. 591–595.
3. **Khrushchov D.P., Lobasov A.P.**
Principles of digital structural-lithological modeling of sedimentary stratigraphic units // Geological Journal. – 2006. – № 213. – P. 90–102.
4. **Lalomov A.V., Tabolich S.E.**
Local dynamic geologic factors of formation of complex coastal heavy mineral placers. – M.: GEOS. – 2013. – 223 p.
5. **Chizhova I.A.**
Formation specifics of intellectual expert systems for forecasting express assessment of promising areas // The electronic Earth: Using information resources and modern technologies to increase precision of scientific forecast by means of modeling solutions in integral information fields / Editors: Arsky Yu.M., Velikhov E.P., Zhizhchenko A.B., Laverov N.P., Savin A.I. – M.: RAS All-Russian Institute for Scientific and Technical Information. – 2009. – P. 323–331.
6. **Chizhova I.A.**
Logic-information modeling for prospecting metallogenic analysis of promising areas // Research papers published by the RAS Institute for Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry: new series / RAS Institute for Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry (IGEM). – M. – 1995 – Issue 4: Current problems of ore geology, petrology, mineralogy and geochemistry – M.: IGEM RAS. – 2010. – P. 59–84.

Кочетков С.Н.

Ключевые слова: вирус иммунодефицита человека (ВИЧ), СПИД, микробициды, обратная транскриптаза, интеграза, депо-формы, ингибиторы.

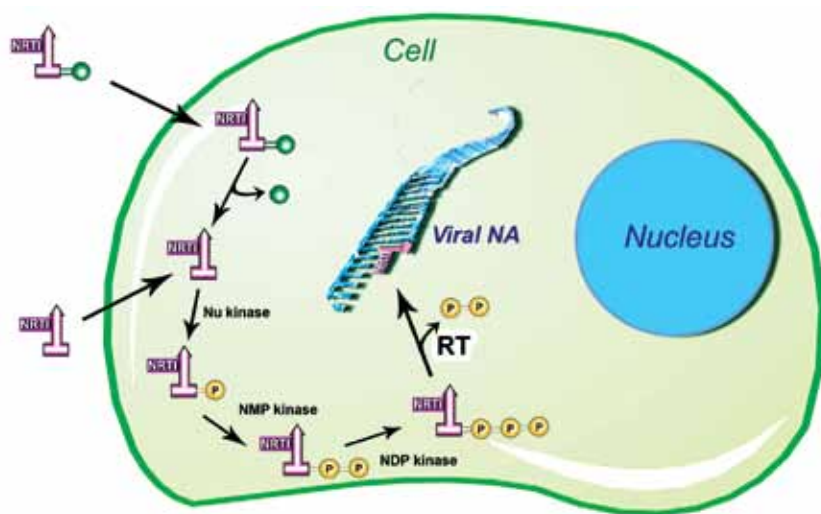
В настоящее время одобрено более 25 лекарственных препаратов различной природы, действие которых направлено на подавление ферментов вируса, участвующих в его репликации (обратная транскриптаза, протеаза, интеграз). Основным подходом в лечении ВИЧ-инфекции является т.н. высокоактивная антиретровирусная терапия (ВААРТ), состоящая в приеме трех или четырех препаратов в противоположность монотерапии, применявшейся ранее. Благодаря ВААРТ, большинство ВИЧ-инфицированных могут в настоящее время вести нормальный образ жизни [2]. Однако, несмотря на более чем тридцатилетние усилия ученых всего мира, совершенной терапии ВИЧ-инфекции до сих пор не существует, и проблема создания новых высокоэффективных и малотоксичных антиретровирусных агентов остается актуальной. Осложняющим моментом в лечении ВИЧ-инфицированных больных является ко-инфекция другими патогенами, например, вирусами герпеса туберкулеза, гепатита и др.



член-корреспондент РАН, профессор,
доктор химических наук, заведующий лабораторией.
Институт молекулярной биологии
имени В.А. Энгельгардта.

В отсутствие вакцин против ВИЧ, помимо поиска новых эффективных и малотоксичных лекарств, большое значение имеет создание препаратов, предотвращающих сексуальную передачу ВИЧ и ко-патогенов от человека к человеку. В связи с этим, во всем мире большое внимание уделяется разработке противовирусных вагинальных микробицидов – средств местного применения, предотвращающих передачу вирусных инфекций половым путем. В состав анти-ВИЧ микробицида должны входить компоненты, во-первых, инактивирующие вирус во влагалище и, во-вторых, не повреждающие здоровую ткань, служащую барьером для ВИЧ. В настоящее время проводятся испытания микробицидов на основе различных классов соединений: нуклеозидных и нуклеотидных ингибиторов обратной транскриптазы (ОТ); соединений, блокирующих проникновение вируса в клетки, ингибиторов интегразы и др. Так, было показано, что ациклический нуклеозидный аналог тенофовир существенно уменьшает одновременно трансмиссию ВИЧ и вируса герпеса. В клинической практике находится другой нуклеозидный аналог – 5F-L-2',3'-дидезокси3'-тиацитидин, подавляющий ВИЧ и препятствующий его трансмиссии. Недавно в лаборатории профессора Л. Марголиса (Eunice Kennedy Shriver National Institute of Child Health and Human Development, National Institutes of Health, далее NICHD) в экспериментах на тканевых образцах шейки матки было показано, что депо-форма известного антигерпетического препарата ацикловира подавляет трансмиссию как ВИЧ, так и вируса герпеса [3–5]. По предварительным данным, соединение также уменьшает количество вируса *in vivo* и замедляет начало заболевания. Следует отметить, что, несмотря на прогресс в создании микробицидов, многие известные ингибиторы репликации вирусов в культуре клеток оказались неэффективными для предотвращения трансмиссии ВИЧ.

Другим типом кандидатных соединений, полученных в этой лаборатории, являлись метилен-бисфосфонаты – аналоги неорганического пирофосфата, способные подавлять активности как обратной транскриптазы, так и интегразы ВИЧ. В лаборатории Л.Марголиса (NICHD) была создана система *ex vivo* на основе лимфоидной ткани, которую можно инфицировать ВИЧ в контролируемых лабораторных условиях, причем степень инфицирования можно контролировать методом проточной цитфлуориметрии. Эта система в настоящее время является наиболее адекватной для оценки эффективности кандидатных микробицидов. В группе М.Б. Готтих (НИИ Физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, МГУ им. М.В. Ломоносова,



далее НИИФХБ) было обнаружено, что короткие модифицированные олигонуклеотиды, содержащие объемные гидрофобные заместители, способны с высокой избирательностью подавлять активность интегразы ВИЧ как *in vitro*, так и в инфицированных клетках. В лаборатории С.Ле Гриса (National Cancer Institute, National Institutes of Health, далее NCI) были получены модифицированные медь-содержащие пептиды, способные блокировать активность интегразы посредством внесения разрывов полипептидной цепи интегразы в месте ее взаимодействия с эффекторным клеточным белком LEDGF (lens epithelium-derived growth factor). Наконец, группа профессора А.П.Козлова (Научно-исследовательское учреждение «Биомедицинский центр», СПб) имела в своем распоряжении когорту больных СПИД, необходимых для дальнейших работ.

1. Синтезировать депо формы анти-ВИЧ препаратов AZT и 3ТС и антигерпетического препарата ацикловира в количествах, достаточных для испытаний в системе *ex vivo* (ИМБ РАН).
2. Синтезировать серию метилбензисфосфонатов и испытать их в системе *in vitro* с обратной транскриптазой ВИЧ дикого и мутантного типа, а также интегразой ВИЧ (ИМБ РАН).
3. Разработать схему синтеза и получить конъюгаты олигонуклеотидов с олигопептидами или низкомолекулярными веществами, способными координировать ионы меди и вызывать затем направленное расщепление пептидных связей в интегразе и ОТ (НИИФХБ).
4. Выделить генитальные жидкости у ВИЧ-инфицированных в количествах, необходимых для проведения испытаний *ex vivo* (Биомедицинский центр).
5. Отработать систему *ex vivo* на лимфоидной ткани, инфици-

Из приведенных на рис. 5 кривых подавления репликации ВИЧ-1 депо-формами АЗТ видно, что соединения 1 и 3 подавляли развитие вируса на 50% при концентрациях ниже 3 μM . Оценочное значение ED₅₀ для соединения 2 составило более 10 μM . Данные, полученные для соединений 1 и 2, и их соотношение соответствуют эффекту, показанному этими соединениями на различных культурах клеток, а для соединения 1 и клиническим данным [12]. Эффективность соединения 3, впервые тестируемого на анти-ВИЧ активность, коррелировало с данными о его химическом и ферментативном гидролизе с образованием АЗТ, ЗТС, соединения 2 и 5'-аминокарбонилфосфоната ЗТС. Соединение 4 (Н-фосфонат ацикловира) не показало высокой активности и подавляло развитие вируса на 50% при концентрациях близких к 10 μM , что по данным [5] соответствовало ED₅₀ для ацикловира. Значимое различие в эффективности препарата при концентрациях выше 30 μM через 9 суток после инфицирования на тканях, взятых от разных доноров, может быть обусловлено как эффективностью развития инфекции, индивидуальной для каждого образца культуры ткани, так и скоростью образования монофосфата ацикловира, связанных с наличием у донора вирусов группы герпеса или анти-

Полученные данные и их сравнение, как между собой, так и с имеющимися результатами исследований на культурах тканей и лентивирусной системе, предполагают возможность дальнейшего использования культуры ткани для поиска и разработки анти-ВИЧ препаратов, в том числе, для создания микробицидов. Следует отметить, что дальнейшие исследования соединения 3 в культуре ткани в настоящее время близки к завершению, и соответствующая статья направлена в печать [8].

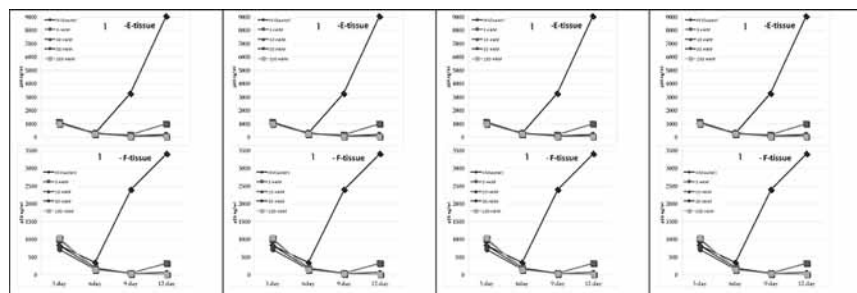


Рис. 5. Развитие ВИЧ-инфекции на культурах ткани двух доноров в присутствии (А) соединения 1 (ткани Е, F); (В) соединения 2 (ткани С, D); (С) соединения 3 (ткани С, D), (D) соединения 4 (ткани Е, F). Кривые HIV – контроль без препарата. 3 kM, 10 mkM, 30 mkM, 100 mkM – концентрации соединения

Получение конъюгатов олигонуклеотидов с олигопептидами, способными координировать ионы меди и вызывать направленное расщепление пептидных связей в интегразе и обратной транскриптазе ВИЧ

Ранее в лаборатории одного из координаторов проекта С.Ле Гриса (NCI) были получены модифицированные медь-содержащие пептиды, содержащие фрагмент Gly-Gly-His (ATCUN), и способные блокировать активность интегразы посредством внесения разрывов полипептидной цепи фермента в месте ее взаимодействия с эффекторным клеточным белком LEDGF [13]. В то же время в НИИФХБ было показано, что олигонуклеотид состава GGTTTTTGTGT, содержащий хлорированный аналог флуоресцеина (HEX) на 5'-конце, связывается с интегразой ВИЧ-1 и эффективно ингибирует ее каталитическую активность как *in vitro*, так и в инфицированных клетках [14]. Для создания на основе этого олигонуклеотида необратимого ингибитора интегразы ВИЧ было решено ввести в его состав ATCUN пептид (amino terminal Cu(II) and Ni(II) binding). Ранее было показано, что ATCUN-пептиды обладают очень высоким сродством к ионам Cu^{2+} и Ni^{2+} ($KD \sim 10^{-16} \text{ M}$) [15] получающиеся комплексы таких пептидов с ионами Cu^{2+} могут вызывать окислительную деструкцию белков [16]. В первую очередь необходимо было отработать методику синтеза конъюгатов олигонуклеотидов с ATCUN-пептидами, а затем проверить, способны ли эти конъюгаты катализировать окислительную деструкцию интегразы. В качестве ATCUN-пептида был выбран трипептид Gly-Gly-His. Было опробовано три метода получения конъюгатов олигонуклеотидов с этим пептидом: присоединение аминокислотных блоков к иммобилизованному олигонуклеотиду с аминокислотным линкером; синтез 2'-дезоксинуридиневого фосфорами

дитного производного с присоединенным пептидом; циклоприсоединение между ATCUN-пептидом с азидной группировкой и алкин-содержащим олигонуклеотидом. Однако только использование третьего подхода позволило получить соединение HEX-GG(T*)TTTTGTGT, конъюгат олигонуклеотидного ингибитора с Gly-Gly-His (рис. 5A), с высоким выходом (90–95%) и без значительных потерь при снятии защитных группировок.

Дальнейшая работа проводилась участником проекта (С.П.Королев) в лаборатории С.Ле Гриса. Проводились эксперименты по изучению способности соединения HEX-GG(T*)TTTTGTGT ингибировать каталитическую активность и вызывать окислительную деструкцию интегразы ВИЧ-1. В первую очередь было изучено, влияет ли введение ATCUN-пептида в состав олигонуклеотидного ингибитора на его ингибирующую способность. Оказалось, что соединение HEX-GG(T*)TTTTGTGT ингибировало активность интегразы с несколько меньшей эффективностью

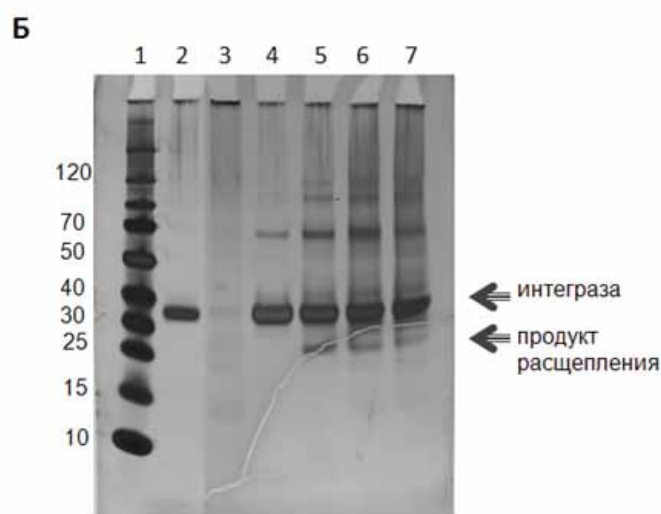
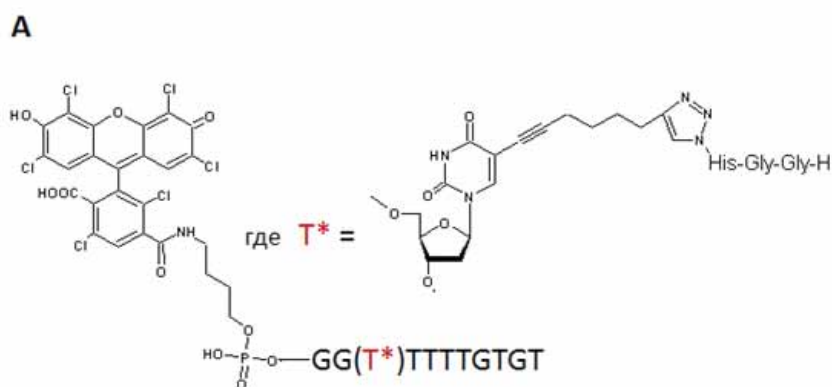


Рис. 5. Структура АТCUN-содержащего ингибитора интегразы ВИЧ-1 HEX-GG(T*) TTTTGTGT (А) и анализ продуктов расщепления интегразы в присутствии этого ингибитора электрофорезом по Лэммли (Б). Маркеры масс белка (массы в КДа указаны слева от геля) – дорожка 1, интеграза в присутствии H₂O₂ и аскорбиновой кислоты, но без ионов Cu²⁺ (2), интеграза в присутствии H₂O₂ аскорбиновой кислоты и свободных ионов Cu²⁺ (3), интеграза в присутствии H₂O₂ аскорбиновой кислоты и возрастающих концентраций комплекса ингибитора HEX-GG(T*)TTTTGTGT с ионами Cu²⁺: 0,25 микроМ (4), 1 микроМ (5), 2,5 микроМ (6) и 5 микроМ (7)

English

Approaches to Development of the New Generation of Anti-Hiv Drugs *

Sergey N. Kochetkov –

RAS corresponding member, Doctor of chemical science, professor,
Head of Laboratory, Engelhardt Institute of Molecular Biology,
Russian Academy of Sciences, 32 Vavilov st., 119991 Moscow, Russia
e-mail kochet@eimb.ru

Abstract

HIV infection afflicting humanity in the past two decades, has a special place among the most socially significant diseases. Despite the fact that in the last decade a significant progress in the treatment of HIV-infected people has been achieved and more than 25 antivirals targeting viral suppression were created, it is hard to say that AIDS has been defeated. An efficient anti-HIV-1 strategy should include prevention of transmission and/or suppression of both HIV-1 and its copathogens. Therefore the development of microbicides that prevent transmission of HIV-1 and coinfecting viruses, especially from men to women, is now one of the most important goals of HIV research. However until recently, microbicide candidates successfully tested in cell cultures were proved inefficient in vivo. The aim of RFBR-NIH project 12-04-91450- NIZ_a in the framework of collaboration between two NIH and three Russian laboratories, was to create a new effective and low-toxic compounds capable of further serve components microbicides. We have obtained such compounds and performed the first biological tests in human tissue ex vivo that allow to hope to obtain in the near future anti-HIV drugs of new type.

Keywords: human immunodeficiency virus (HIV), AIDS, microbicides, reverse transcriptase, integrase, depot, inhibitor.

References

- Center for Prevention and Control of AIDS and infectious diseases
<http://www.medportal.dv.ru>.
- Rathbun C.R.
in Antiretroviral Therapy for HIV Infection (Ronald A Greenfield, Chief Editor) <http://emedicine.medscape.com/article/1533218-overview>.
- Vanpouille C., Lisco A., Margolis L.
Acyclovir: a new use for an old drug. *Curr Opin Infect Dis.* 2009, 22(6), 583–587.
- Grivel J.C., Margolis L.
Use of human tissue explants to study human infectious agents. *Nature Protocols.* 2009, 4(2), 256–269.
- Vanpouille C., Lisco A., Introini A., Grivel J.C., Munawwar A., Merbah M., Schinazi R.F., Derudas M., McGuigan C., Balzarini J., Margolis L.
Exploiting the anti-HIV-1 activity of acyclovir: suppression of primary and drug-resistant HIV isolates and potentiation of the activity by ribavirin. *Antimicrob Agents Chemother.* 2012, 56(5), 2604–2611.
- Skoblov Y., Karpenko I., Shirokova E., Popov K., Andronova V., Galegov G., Kukhanova M.
Intracellular metabolism and pharmacokinetics of 5'-hydrogenphosphonate of 3'-azido-2',3'-dideoxythymidine, a prodrug of 3'-azido-2',3'-dideoxythymidine. *Antiviral Research.* 2004, 63, 107–113.
- Khandazhinskaya A.L., Jasko M.V., Yanvarev D.V., Shipitsin A.V., Khalizev V.A., Shram S.I., Skobov Y.S., Shirokova E.A., Kukhanova M.K.
5'-Aminocarbonyl Phosphonates as New Zidovudine Depot Forms: Antiviral Properties, Intracellular Transformations, and Pharmacokinetic Parameters. *Drug Metabolism and Disposition.* 2009, 37(3), 494–501.
- Vanpouille C., Khandazhinskaya A., Karpenko I., Zicari S., Barreto-de-Souza V., Frolova S., Margolis L., Kochetkov S.
A new antiviral: chimeric AZT-3TC phosphonate efficiently inhibits HIV-1 in human tissues ex vivo. *J. Med. Chem.*, в печати
- Skoblov Y.S., Karpenko I.L., Jasko M.V., Kukhanova M.K., Andronova V.L., Galegov G.A., Sidorov G.V., Myasoedov N.F.
Cell metabolism of acyclovir phosphonate derivatives and antihypers-virus activity of their combinations with alpha2-interferon. *Chem Biol Drug Des.* 2007, 69(6), 429–434.
- Zakirova N.F., Shipitsyn A.V., Jasko M.V., Prokofjeva M.M., Andronova V.L., Galegov G.A., Prassolov V.S., Kochetkov S.N.
Bioorg Med Chem. 2012, 20(19), 5802–5809.
- Biancotto A., Brichacek B., Chen S., Fitzgerald W., Lisco A., Vanpouille C., Margolis L., Grivel J.-C.
A highly sensitive and dynamic immunofluorescent cytometric bead assay for the detection of HIV-1 p24. *J. Virol. Meth.*, 2009, 157, 98–101.
- Khandazhinskaya A., Matyugina E., Shirokova E.
Anti-HIV therapy with AZT prodrugs: AZT phosphonate derivatives, current state and prospects. *Expert Opin Drug Metab Toxicol.* 2010, 6(6), 701–714.
- Hayouka Z., Hurevich M., Levin A., Benyamini H., Iosub A., Maes M., Shalev D.E., Loyter A., Gilon C., Friedler A.
Cyclic peptide inhibitors of HIV-1 integrase derived from the LEDGF/p75 protein. *Bioorg Med Chem.* 2010, 18(23), 8388–8395.
- Agapkina J., Zatsepin T., Knyazhanskaya E., Mouscadet J.-F., Gottikh M.
Structure-activity relationship studies of HIV-1 integrase oligonucleotide inhibitors. *ACS Med. Chem. Lett.*, 2011, 2, 532–537.
- Torreilles J., Guerin M.C., Slaoui-Hasnaoui A.
Nickel (II) complexes of histidyl-peptides as Fenton-reaction catalysts. *Free Radic Res Commun.* 1990, 11, 159–166.
- Mal T.K., Ikura M., Kay L.E.
The ATCUN domain as a probe of intermolecular interactions: application to calmodulin-peptide complexes. *J. Am. Chem. Soc.* 2002, 124, 14002–14003.

*

The work was financially supported by RFBR (project 12-04-91450-NIZ_a)

Репарация апуриновых/апиримидиновых сайтов: участие поли (АДФ-рибозо)полимераз 1, 2 и мультифункционального белка YB-1 *

Пестряков П.Е., Фомина Е.Э., Кутузов М.М., Ходырева С.Н., Курми П., Шрайбер В., Овчинников Л.П., Лаврик О.И.

Апуриновые/апиримидиновые сайты (АП-сайты) являются одними из наиболее часто возникающих повреждений ДНК, обладающих значительной цитотоксичностью и мутагенным потенциалом. В работе представлены результаты исследования роли представителей семейства поли(АДФ-рибозо)полимераз: PARP1 и PARP2, а также мультифункционального белка YB-1 в процессе репарации АП-сайтов. Описаны представления о механизмах исправления повреждений этого типа. Приведены закономерности взаимодействия PARP1, PARP2 и YB-1 с поврежденной ДНК и влияние рассматриваемых белков на активность ключевых ферментов эксцизионной репарации оснований.

Ключевые слова: повреждения ДНК, апуриновые/апиримидиновые сайты, АП-сайты, кластерные повреждения ДНК, репарация ДНК, эксцизионная репарация оснований, регуляция путей репарации ДНК.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 13-04-93107-НЦНИЛ а, № 14-04-31392 мол а)

ДНК является основным хранилищем генетической информации в клетке. В то же время ряд факторов, оказывающих негативное влияние на организм человека (повышенный уровень загрязнения окружающей среды, ультрафиолетовое и ионизирующее излучение, ксенобиотики), повреждают структуру ДНК. Далеко не полный перечень процессов, приводящих к нарушениям структуры ДНК, включает в себя окисление, алкилирование, дезаминирование азотистых оснований, образование разрывов и апуриновых/апириимидиновых сайтов (АП-сайтов). Ферментативные системы распознавания и устранения повреждений ДНК, репарации, специализируются на удалении специфических повреждений различной структуры. Один из самых востребованных

путей репарации – эксцизионная репарация оснований (ЭРО), исправляет такие повреждения ДНК, как модифицированные основания, одноцепочечные разрывы, АП-сайты.

АП-сайты являются одними из наиболее легко возникающих повреждений ДНК, которые появляются спонтанно как под действием эндогенных факторов, так и в ходе экзогенного повреждающего воздействия. Количество АП-сайтов, возникающих в ДНК одной клетки в течение дня, может достигать 50000 повреждений. Наличие АП-сайтов приводит к блокирова-



ПЕСТРЯКОВ
Павел Ефимович

кандидат химических наук, научный сотрудник,
Институт химической биологии и фундаментальной
медицины СО РАН.



ФОМИНА
Елизавета Эдуардовна

аспирант, Институт химической биологии
и фундаментальной медицины СО РАН.



КУТУЗОВ
Михаил Михайлович

кандидат химических наук, науч-
ный сотрудник, Институт химиче-
ской биологии и фундаментальной
медицины СО РАН.



ХОДЫРЕВА
Светлана Николаевна

доцент, доктор биологических наук,
ведущий научный сотрудник, Институт
химической биологии и фундамен-
тальной медицины СО РАН.



КУРМИ Патрик

профессор, доктор наук, заведующий лабораторией структуры и активности нативных и патологических биомолекул, Национальный институт здоровья и медицинских исследований. Франция.



ШРАЙБЕР Валери

профессор, доктор наук,
заведующий группы стабильности
генома и биологии опухолей,
Институт биотехнологии. Универ-
ситет Страсбурга. Франция.



ОВЧИННИКОВ
Лев Павлович

академик РАН, доктор биологических наук, руководитель группы регуляции биосинтеза белка Института белка РАН.



ЛАВРИК Ольга Ивановна

член-корреспондент РАН, доктор химических наук, профессор, зав. лабораторией биоорганической химии ферментов, Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН.

дений в составе кластеров в целом ингибируется присутствием дополнительных повреждений, расположенных поблизости. Величина эффекта строго определяется природой, взаимной ориентацией и расстояниями между повреждениями. Как уже было отмечено, присутствие в ДНК повреждений, не прошедших репарацию, как приводит к прямой цитотоксичности за счет блокирования процессов матричного биосинтеза, так и ведет к закреплению мутаций в геноме при копировании ДНК, что подчеркивает очевидную значимость быстрой и эффективной репарации. С другой стороны, репарация АП-сайтов в «функционально активной» форме ДНК, например, в репликационных вилках и транскрипционных «пузырьках», т.е. в местах расплетения двойной спирали ДНК, сопряжена с риском формирования двуцепочечных разрывов ДНК. К схожим последствиям может привести неконтролируемое расщепление АП-сайт-содержащей цепи ДНК в кластерных повреждениях, расположенных в противоположных цепях молекулы [5, 6]. Двуцепочечные разрывы ДНК обладают крайне высокой цитотоксичностью и являются одними из наиболее сложных повреждений для процессов репарации, проходящей в этом случае, как правило, по пути рекомбинации или негомологичного соединения концов, поэтому потенциально ведущей к потере генетической информации и генетической нестабильности [7].

Возможность возникновения таких нерядовых ситуаций наводит на мысль о том, что при отсутствии напротив АП-сайта неповрежденной комплементарной матрицы для репаративного синтеза и последующего лигирования концов ДНК должен включаться механизм, регулирующий инициацию репарации и разрезание поврежденной цепи ДНК в зависимости от структуры ДНК в области повреждения [5, 6]. Поиск путей, определяющих эффективность репарации ДНК в этих случаях, новых потенциальных участников этих процессов и дополнительных путей репарации сложных и нетривиальных повреждений ДНК, появляющихся в условиях генотоксического стресса, является мировым трендом в современной биохимии, поскольку имеет прямое отношение к разработке наиболее эффективных путей химиотерапии и радиотерапии для подавления роста раковых клеток и лечения других серьезных патологий человека.

Значительную роль в обеспечении стабильности генетической информации и выживаемости клетки в условиях генотоксического стресса играют поли(АДФ-рибозо)полимеразы, в числе которых важное место занимают белки PARP1 и PARP2 [8, 9]. PARP1 является одним из ключевых белков, регулирующих эксцизионную репарацию оснований, для которого показано непосредственное участие в си-

стеме детекции разрывов ДНК [8]. При взаимодействии с поврежденной ДНК в присутствии NAD⁺ активированный PARP1 модифицирует белки-мишени репарационной машины (включая себя самого), синтезируя разветвленную поли(АДФ-рибозную) цепь (PAR), ковалентно связанную с белком-акцептором. Считается, что одна из функций такой ферментативной активности – сигнальная, имеющая целью обозначить с помощью разветвленного полимера PAR место повреждения в цепи ДНК. С другой стороны, модификация белков репарации, несомненно, позволяет регулировать их ферментативную активность и координировать сборку репаративных ансамблей, так как отрицательно заряженный полимер PAR облегчает диссоциацию PARP1 и других белков из комплекса с ДНК, обеспечивая своеобразную «ротацию» белков в месте повреждения ДНК. Ферментативная активность другого представителя поли(АДФ-рибозо) полимераз – PARP2, также стимулируется взаимодействием с поврежденной ДНК [9]. Кроме того, свидетельством участия PARP1 и PARP2 в процессах репарации АП-сайтов служат результаты исследований, в ходе которых было показано, что и PARP1, и PARP2 специфически взаимодействуют не только с разрывами в одноцепочечной ДНК, но и с ДНК, содержащей интактный или даже предварительно расщепленный АП-сайт [10, 11, 12]. В отношении расщепленного АП-сайта оба белка проявляют 5'-dRP лиазную активность, а PARP1, кроме того, способен к расщеплению нативного АП-сайта в ДНК [10]. Оба белка в отсутствие NAD⁺ ингибируют репаративный синтез ДНК, катализируемый ДНК-полимеразой β , а также активность FEN1. В то же время у этих двух белков есть своего рода ниши в пространстве репарации. PARP2 менее эффективно конкурирует с APE1 за взаимодействие с АП-сайтом. Отмечена более низкая поли(АДФ-рибозо) полимеразная активность PARP2,

по сравнению с PARP1, что отражается в формировании недостаточно протяженных полимеров PAR. В частности из-за этого поли(АДФ-рибозил)ирование, катализируемое PARP2, не приводит к восстановлению ферментативной активности ДНК-полимеразы β и FEN1. PARP2, кроме АП-сайт-содержащей ДНК, эффективно взаимодействует с ДНК-структурами, содержащими шпильки, флэпы и выступающие одноцепочечные участки [11]. При этом сродство PARP2 к различным ДНК-структурам не коррелирует с уровнем активации поли(АДФ-рибозо)полимеразной активности этого белка. Так, наибольшее сродство PARP-2 проявляет к ДНК, содержащей флэп, в то время как его ферментативная активность достигает максимума в присутствии ДНК, содержащей 5'-выступающий одноцепочечный участок [11]. Результаты исследований позволяют говорить о том, что, кроме совместного с PARP1 участия в регуляции процесса репарации поврежденной ДНК, PARP2 вполне может быть координатором этого процесса с другими процессами метаболизма ДНК, такими как репликация и рекомбинация.

Y-box-связывающий белок YB-1 выполняет в клетке множество функций, так или иначе связанных с метаболизмом нуклеиновых кислот. Хорошо изучена его роль в процессах упаковки РНК в цитоплазме, непосредственное участие в процессах транскрипции и трансляции [13]. О возможном участии этого фактора в репарации ДНК до сих пор свидетельствовали важные, но разрозненные факты. Известно, что большие количества YB-1 в условиях генотоксического стресса перемещаются в ядро из цитоплазмы, где этот белок преимущественно и локализован. Была показана избирательность YB-1 в отношении связывания поврежденной и интактной ДНК. О роли белка в процессах репарации свидетельствуют факты его физического взаимодействия с ключевыми

факторами практически всех путей репарации, в том числе, с ферментами APE1, ДНК-гликозилазами семейства Nei, представляющими собой основные ферменты первого этапа путей репарации ДНК в клетке [13]. В пользу специфического участия YB-1 в системе ЭРО свидетельствует формирование непосредственных контактов белка с поврежденными звеньями в ДНК. Ковалентные аддукты белка с ДНК, сформированные с образованием оснований Шиффа между аминокетонами белка и альдегидными группировками таких повреждений, как АП-сайт, а также остаток 5-формилуридина (возможный продукт окисления тимина), зафиксированы методом боргидридной сшивки [14]. Подобные интермедиаты в ходе реакции β -элиминирования образуют некоторые ферменты репарации, например, ДНК-гликозилаза NEIL1 и ДНК-полимераза β . В отличие от этих белков YB-1 не обладает значимой АП-лиазной активностью, однако, дальнейшие исследования подтвердили способность этого белка модулировать активности ферментов при репарации АП-сайта в зависимости от архитектуры участка ДНК. Поскольку репарация АП-сайтов в клетке инициируется образованием разрыва ДНК, то в качестве возможных партнеров YB-1 следует рассматривать ферменты, расщепляющие АП-сайты: APE1, NEIL1 и тирозил-ДНК-фосфодиэстеразу 1 (Tdp1) [2, 15]. Среди субстратов системы репарации при исследовании влияния YB-1 использовались ДНК, содержащие как одиночный АП-сайт, так и кластерные повреждения, представляющие собой АП-сайт в сочетании с некомплементарной парой оснований, либо с расположенным в +1 положении остатком 5-формилуридина. Можно предположить, что при репарации таких кластеров используется как активность систем ЭРО, так и репарации неспаренных оснований. Как отмечалось ранее, субстратная специфичность модельных ДНК существенно зависит от структуры кластерного повреждения. Например, введение дополнительно к АП-сайту в ДНК-субстрат некомплементарной пары оснований оказывает ингибирующий эффект на APE1, а в случае введения пары, содержащей 5-формилуридин, наоборот отмечается стимулирование работы фермента [16]. Анализ скоростей реакции расщепления поврежденной ДНК, катализируемой NEIL1, показывает, что для этого фермента репарации структуры, содержащие кластерные повреждения, расщепляются более эффективно, то есть, обладают лучшими субстратными свойствами по сравнению с одиночным АП-сайтом. Наличие в реакционной смеси YB-1 стимулирует АП-эндонуклеазную активность APE1, причем зависимость имеет колоколообразный характер [16]. Ярко выраженный эффект стимуляции активности APE1 белком YB-1 наблюдается на самом «неоптимальном»

Работы по изучению роли УВ-1 в репарации АП-сайтов, находящихся в составе кластерных повреждений, были продолжены на модельной системе «классического» пути ЭРО, реконструированной из очищенных белков и ДНК, содержащей кластерное повреждение. Как и следовало ожидать, в такой системе инициация репарации модельной ДНК с АП-сайтом и остатком 5-формулиридина в +1 положении противоположной цепи, происходит более эффективно в присутствии УВ-1. В этой же системе было

Как уже отмечалось выше, особое внимание исследователей привлекают механизмы регуляции эксцизионной репарации в «функционально активной» форме ДНК – в местах расплетания ее двойной спирали. Можно предположить, что задача убережет ДНК от двухцепочечных разрывов частично обеспечивается довольно низкой каталитической активностью на одноцепочечных субстратах основного фермента, расщепляющего АП-сайты в клетке – APE1 [16]. Тем не менее, APE1, NEIL1 и Tdp1 способны к расщеплению АП-сайтов, расположенных в олигонуклеотидах, моделирующих одноцепочечные фрагменты ДНК (как одноцепочечные олигонуклеотиды, так и ДНК, содержащие локальные области некомплементарности, так называемые «пузыри») [17]. Было показано, что YB-1 способен ингибировать расщепление АП-сайтов в одноцепочечных фрагментах ДНК этими ферментами, при этом размер некомплементарного участка, как и положение в нем АП-сайта, не имеют решающего значения [17]. Наблюдаемый эффект может играть важную роль в клеточной регуляции репарации. В том случае, когда клетка подвергается интенсивному воздействию ДНК-повреждающих агентов, в ДНК возникает большее количество АП-сайтов, чем в норме. При этом АП-сайты, образовавшиеся в тех участках, где двойная спираль ДНК не расплетена, требуют немедленной репарации, а расщепление АП-сайтов в одноцепочечных фрагментах ДНК является потенциально опасным. Как было от-

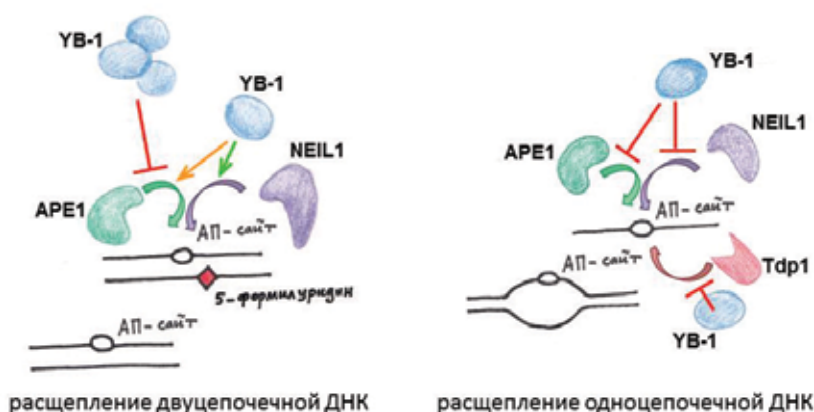


Рис. 3. Влияние белка YB-1 на процесс репарации АП-сайта, находящегося в двуцепочечном или одноцепочечном участке ДНК.

Схематично показаны ДНК-структуры, моделирующие поврежденную ДНК: двуцепочечная ДНК, кластерное повреждение, одноцепочечная ДНК и ДНК, содержащая участок неспаренных оснований. АП-сайт в структуре ДНК изображен овалом, поврежденное основание – красным ромбом. Фигурными стрелками показана активность ферментов, участвующих в расщеплении той или иной поврежденной ДНК-структуры. Количество схематически изображенных молекул YB-1 соответствует низкой (1 молекула) либо высокой (3 молекулы) концентрации этого белка. Стрелками обозначено стимулирующее действие YB-1, Т-образными стрелками - ингибирующее действие этого белка на активность соответствующего фермента

• **•**

- English |||

Apurinic/apyrimidinic sites (AP sites) are the most frequently occurring lesions in DNA, possessing significant cytotoxicity and mutagenic potential. Here we show results of the study that examines the role of poly(ADP-ribose)polymerases PARP1, PARP2, and pleiotropic protein YB-1 in the process of AP site repair. Mechanisms of the AP site repair are reviewed. Interaction of PARP1, PARP2 and YB-1 with damaged DNA and influence of the proteins on the key enzymes of base excision repair machinery is described.

Keywords: DNA lesions, apurinic/apyrimidinic sites, AP sites, clustered DNA lesions, DNA repair, base excision repair, regulation of DNA repair.

References

1. **Lindahl T.**
Instability and decay of the primary structure of DNA // *Nature*. – 1993. – V. 362, № 6422. – P. 709–715.
2. **New players in recognition of intact and cleaved AP sites: Implication in DNA repair in mammalian cells / Khodyreva S.N., Lavrik O.I.; Selected Topics in DNA repair; Ed. C.C. Chen. – INTECH, Croatia: 2011. – P. 305–330.**
3. **Dianov G.L., Allinson S.L.**
DNA Base Damage Recognition and Processing // *Genome Dyn. Stab.* – 2007. – V. 1. – P. 287–314.
4. **Sung J.S., Demple B.**
Roles of base excision repair subpathways in correcting oxidized abasic sites in DNA // *FEBS J.* – 2006. – V. 273, № 8. – P. 1620–1629.
5. **Gulston M., de Lara C., Jenner T., Davis E., O'Neill P.**
Processing of clustered DNA damage generates additional double-strand breaks in mammalian cells post-irradiation // *Nucleic Acids Res.* – 2004. – V. 32, № 4. – P. 1602–1609.
6. **Yang N., Galick H., Wallace S.S.**
Attempted base excision repair of ionizing radiation damage in human lymphoblastoid cells produces lethal and mutagenic double strand breaks // *DNA Repair (Amst)*. – 2004. – V. 3, № 10. – P. 1323–1334.
7. **Jackson S.P.**
Detecting, signalling and repairing DNA double-strand breaks // *Biochem. Soc. Trans.* – 2001. – V. 29 – P. 655–661.
8. **Sukhanova M.V., Lavrik O.I., Khodyreva S.N.**
Poly (ADP-ribose)polymerase-1 as a regulator of protein-nucleic acid interactions in the processes responding to genotoxic action // *Mol. Biol. (Moscow)*. – 2004. – V. 38, № 5. – P. 834–847.
9. **De Vos M., Schreiber V., Dantzer F.**
The diverse roles and clinical relevance of PARPs in DNA damage repair: current state of the art // *Biochem. Pharmacol.* – 2012. – V. 84, № 2. – P. 137–146.
10. **Khodyreva S.N., Prasad R.N., Ilina E.S., Sukhanova M.V., Kutuzov M.M., Liu Y., Hou E.W., Wilson S.H., Lavrik O.I.**
Apurinic/aprimidinic (AP) site recognition by the 5'-drp/AP lyase in poly(ADP-ribose) polymerase-1 (PARP-1) // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. – 2010. – V. 107, № 51. – P. 22090–22095.
11. **Kutuzov M.M., Khodyreva S.N., Amé J.C., Ilina E.S., Sukhanova M.V., Schreiber V., Lavrik O.I.**
Interaction of PARP-2 with DNA structures mimicking DNA repair intermediates and consequences on activity of base excision repair proteins // *Biochimie*. – 2013. – V. 95, № 6. – P. 1208–1215.
12. **Kutuzov M.M., Ilina E.S., Sukhanova M.V., Pyshnaya I.A., Pyshnyi D.V., Lavrik O.I., Khodyreva S.N.**
Interaction of poly(ADP-ribose) polymerase 1 with apurinic/aprimidinic sites within clustered DNA damage // *Biochemistry (Moscow)*. – 2011. – V. 76, № 1. – P. 147–156.
13. **Eliseeva., Kim E.R., Guryanov S.G., Ovchinnikov L.P., Lyabin D.N.**
Y Box Binding Protein 1 (YB 1) and Its Functions // *Biochemistry (Moscow)*. – 2011. – V. 76, № 13. – P. 1402–1433.
14. **Pestryakov P., Zharkov D.O., Grin I., Fomina E.E., Kim E.R., Hamon L., Eliseeva I.A., Petruseva I.O., Curmi P.A., Ovchinnikov L.P., Lavrik O.I.**
Effect of the multifunctional proteins RPA, YB-1, and XPC repair factor on AP site cleavage by DNA glycosylase NEIL1 // *J. Mol. Recognit.* – 2012. – V. 25, № 4. – P. 224–233.
15. **Lebedeva N.A., Rechkunova N.I., El-Khamisy S.F., Lavrik O.I.**
Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1 initiates repair of apurinic/aprimidinic sites // *Biochimie*. – 2012. – V. 94. – P. 1749–1753.
16. **Pestryakov P.E., Khodyreva S.N., Curmi P.A., Ovchinnikov L.P., Lavrik O.I.**
Effect of multifunctional protein YB-1 on the AP site cleavage by AP endonuclease 1 and tyrosyl phosphodiesterase 1 // *Biopolymers and Cell*. – 2012. – V. 28, № 4. – P. 317–321.
17. **Fomina E.E., Pestryakov P.E., Zharkov D.O., Curmi P.A., Kretov D., Ovchinnikov L.P., Lavrik O.I.**
Inhibition of abasic site cleavage in single-stranded DNA by multifunctional protein YB-1 (unpublished).

**Новые слоистые бескислородные железосодержащие
сверхпроводники и их аналоги: управление физическими
свойствами путем изо- и гетеровалентного замещения ***

Вурмель С., Лебедев О., Морозов И.В., Болталин А.И., Шевельков А.В.

Открытие новых высокотемпературных сверхпроводников на основе слоистых пниктидов и халькогенидов железа (Fe-СП) является одним из важнейших достижений в области физики и химии твердого тела начала XXI в. В ходе выполнения международного проекта ERANET проведено исследование представителей бескислородных семейств этих сверхпроводников – ферроарсенидов и ферроселенидов щелочных металлов $AFeAs$ ($A=Li, Na$), KFe_2As_2 и $A_xFe_{(2-y)}Se_2$ ($A=K, Rb$). Получен ряд продуктов замещения в катионных подрешетках щелочного металла ($K \rightarrow Na$) и железа ($Fe \rightarrow 3d$ и $4d$ элементы), причем, образцы $(Na,K)Fe_2As_2$, $(Na,K)_xFe_{2-y}Se_2$, $K(Fe, TM)_2As_2$ и $Na(Fe, TM)As$ ($TM=Cr, Mn, Rh$ и Ru) синтезированы впервые. Все соединения получены в виде монокристаллов, что позволило провести всестороннее исследование их структурных особенностей и физических свойств, в том числе, и с использованием таких методов, как внутренняя андреевская спектроскопия и фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES). Необычное сочетание магнитных свойств и сверхпроводимости, характерное для Fe-СП, впервые изучено методом мессбауэровской спектроскопии на примере $NaFeAs$. Показано, что такое поведение объясняется фазовым расслоением на сверхпроводящие (СП) и магнитоупорядоченные домены. Сочетание СП свойств и антиферромагнетизма, характерное для ферроселенидов щелочных металлов, также связано с их многофазной природой. Впервые проведенное исследование микроструктуры образцов $Rb_xFe_{2-y}Se_2$ методами электронной микроскопии высокого разрешения позволило выявить несколько новых вариантов сверхструктурного упорядочения вакансий в катионных подрешетках и установить структурные особенности СП образца. Показано, что однотипное замещение оказывает различное влияние на кристаллическое строение и СП свойства изученных соединений. Так, замещение железа в слое проводимости на d-элементы, располагающиеся в 9 и 10 группах периодической таблицы Менделеева (Co, Rh, Ni, Pd), приводит к возрастанию T_c в случае $Na(FeTM)As$ с достижением максимума при уровне допирования $x \approx 0,025$, в то время как СП свойства образцов $K(Fe, TM)_2As_2$ при таком замещении быстро исчезают, что, по-видимому, объясняется различной природой сверхпроводящей щели в этих соединениях. Замещение в слой зарядового резервуара ферроарсенида калия $(Na,K)Fe_2As_2$ приводит к закономерному сближению слоев и постепенному понижению T_c , тогда как аналогичное замещение в ферроселениде $(Na,K)_xFe_{2-y}Se_2$ практически не влияет на T_c и параметры кристаллической ячейки.

Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники на основе слоистых пниктидов и халькогенидов железа, двухщелевые сверхпроводники, замещение в катионной и анионной подрешетке, синтез монокристаллов, сверхструктурное упорядочение, магнитные и транспортные свойства, удельная теплоемкость, электронная микроскопия высокого разрешения, Андреевская спектроскопия, мессбауэровская спектроскопия.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-03-91674-ЭРА_а)

Только что завершился международный междисциплинарный научный проект, два года назад получивший финансирование в рамках программы



ВУРМЕЛЬ
Сабин
доктор физико-математических наук, координатор проектов.
Институт физики твердого тела имени Лейбница.
Дрезден. Германия



ЛЕБЕДЕВ
Олег
доктор физико-математических наук, директор по исследованиям Лаборатории кристаллографии и наук о материалах. Франция.

"ERA.Net RUS" (ЭРА_a – Конкурс многосторонних исследовательских проектов) под названием «Новые слоистые бескислородные железосодержащие сверхпроводники и их аналоги: управление физическими свойствами путем изо- и гетеро-валентного замещения» (английское название "New Layered Intermetallic



МОРОЗОВ
Игорь Викторович
доктор химических наук, доцент.
Химический факультет
МГУ имени М.В. Ломоносова.



БОЛТАЛИН
Александр Иванович
кандидат химических наук,
доцент. Химический факультет
МГУ имени М.В. Ломоносова.



ШЕВЕЛЬКОВ
Андрей Владимирович
доктор химических наук, профес-
сор. Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова.

Надо сказать, что благодаря развитию информационных ресурсов

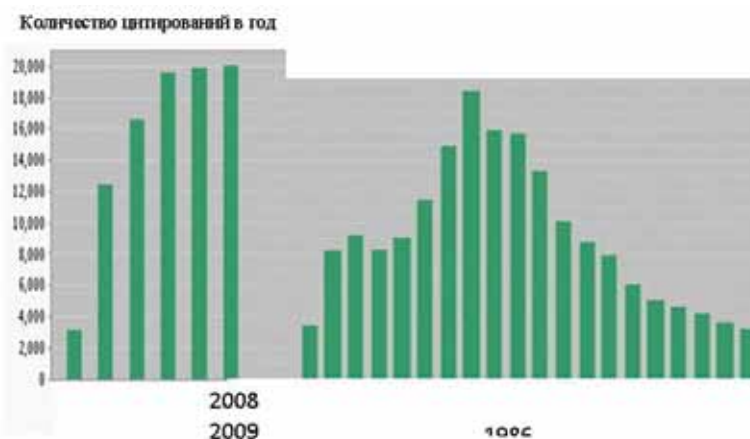


Рис. 1. Сопоставление динамики цитирования статей по медьсодержащим (а) и железосодержащим (б) сверхпроводникам, начиная с года их открытия (по данным Web of Science). Графики динамики цитирования (citation report) построены по поисковому запросу: а) TOPIC: (superconduct*) AND TOPIC: (copper OR Cu) AND YEAR PUBLISHED: (1986-1994) б) TOPIC: (superconduct*) AND TOPIC: (iron OR Fe) AND YEAR PUBLISHED: (2008-2013)

Кратко рассмотрим строение новых высокотемпературных сверхпроводников. Несмотря на разнообразие химического состава, все известные сверхпроводники на основе пниктидов и халькогенидов железа обладают структурным сходством, состоящим в наличии проводящих слоев $[\text{FeX}]$ ($\text{X}=\text{As}, \text{Se}$ или другой пниктоген или халькоген), располагающихся перпендикулярно оси с тетрагональной элементарной ячейки. Эти слои $[\text{FeX}]$ образованы плоской квадратной сеткой из атомов железа, над и под которой в шахматном порядке располагаются атомы X, координируя сразу по 4 атома железа и обеспечивая каждому из них тетраэдрическое

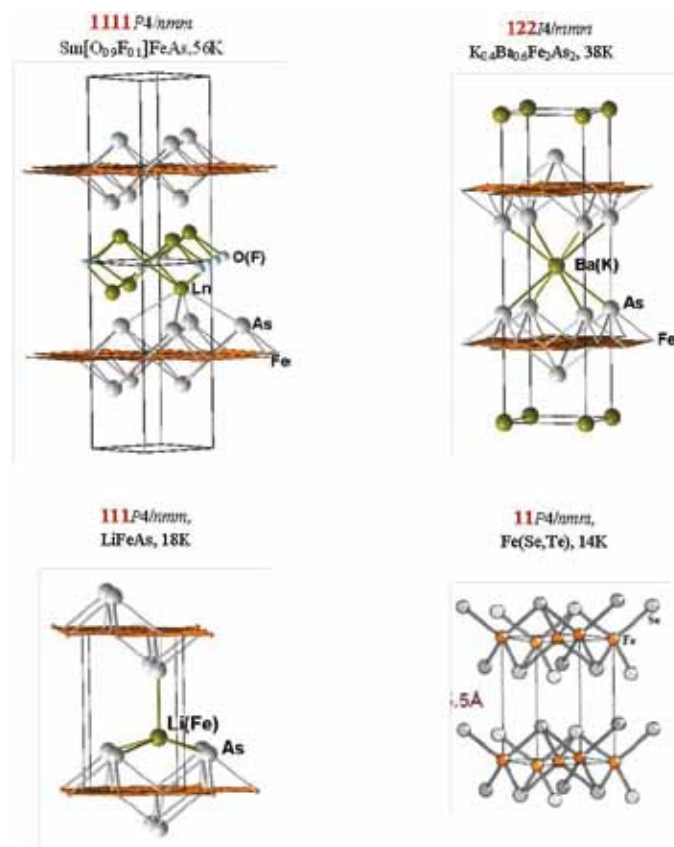


Рис. 2. Схема кристаллического строения представителей четырех основных семейств слоистых железосодержащих сверхпроводников. Рядом с названиями семейств указаны символ пространственной группы и максимальная температура перехода в СП состояние, достигнутая при обычном давлении и оптимальном допировании для конкретных представителей. Для FeSe (семейство 11) атомы Fe показаны оранжевыми шарами, на остальных рисунках размещению атомов Fe соответствуют оранжевые плоскости.

окружение. Тетраэдры $[\text{FeX}_4]$ объединяются в слой $[\text{FeX}]$ за счет общих ребер, однако, помимо прочных связей Fe-X в слоях образуются и связи Fe-Fe длиной 2,7–2,8 Å. Взаимодействия между атомами железа в проводящих слоях $[\text{FeX}]$ играют ключевую роль в проявляемых свойствах, в частности, объясняют проводимость металлического типа при температурах выше T_c , склонность к антиферромагнитному упорядочению и, собственно, сверхпроводящие свойства.

Слои [FeX] разделены между собой так называемыми слоями зарядового резервуара, природа которых может существенно различаться, что и приводит к большому разнообразию этих сверхпроводников. Так, в случае семейства 111 состава AFeAs слой зарядового резервуара состоит из атомов щелочного металла ($A=Li, Na$), в семействе 122 состава AFe_2As_2 между слоями [FeAs] размещаются атомы щелочноземельного элемента или европия ($AE=Ca, Sr, Ba, Eu$), а в семействе 1111 ($LnOFeAs$) слои проводимости разделены флюоритоподобными слоями [LnO], где $Ln=La-Gd$ (рис. 2). Только в семействе 11 на основе тетрагональной модификации селенида железа $Fe_{1+\delta}Se$ слои [FeSe] располагаются непосредственно один над другим со смещением на половину диагонали [110], и все же, между слоями размещается незна-

чительное количество ($\delta \approx 0,02$) атомов железа. Помимо указанных семейств, известно значительное количество Fe-СП со слоями зарядового резервуара другого состава, причем, их перечень ежегодно пополняется. Приведем лишь несколько примеров: $(\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_5)_x(\text{Fe}_2\text{As}_2)_y$ ($T_c = 30,2$ К, семейство 32225), $(\text{Ca}_6(\text{Sc}, \text{Ti})_5\text{O}_{14})_x(\text{Fe}_2\text{As}_2)_y$ (42 К, семейство 652214), $(\text{Sr}_2\text{VO}_3)_x(\text{FeAs})_y$ ($T_c = 37,2$ К, семейство 21113), $(\text{Ca}_{10}\text{Pt}_4\text{As}_8)_x(\text{Fe}_2\text{As}_2)_y$ ($T_c = 26$ К, семейство 10–4–8), $(\text{Ba}_2)_x(\text{Ti}_2\text{OAs}_2)_y(\text{Fe}_2\text{As}_2)_z$ ($T_c = 21$ К, семейство 22241) [4]. Особо следует отметить открытие в конце 2010 г. ферроселенидов щелочных металлов состава $\text{A}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ ($\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{Tl}$, T_c около 30 К) [5, 6], так как представители данного семейства отличаются наличием вакансий в катионных подрешетках, а также фазовым разделением на микро- и наноуровне. В 2012 г. был разработан весьма перспективный подход «мягкой химии», позволяющий интеркалировать в межслоевое пространство селенида железа щелочные и щелочноземельные металлы совместно с молекулами растворителя. Необычные продукты интеркаляции, например, $\text{A}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2(\text{NH}_3)_y$ ($\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{Eu}$ and Yb) [7], $\text{Li}_x(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_y\text{Fe}_{2-z}\text{Se}_2$ [8] демонстрируют T_c до 45 К.

Важная особенность рассматриваемых соединений состоит в том, что для перехода в СП состояние особое значение играет допирование слоя проводимости электронами или дырками. Действительно, в подавляющем большинстве недопированных Fe-СП (так называемых «parent compounds») формальная степень окисления железа равна двум, и они, как правило, не проявляют СП свойств, а при охлаждении претерпевают структурный переход и переход в магнитоупорядоченное состояние с модулированной магнитной структурой типа волн спиновой плотности (SDW), имеющее антиферромагнитный характер [9]. Допирование слоя проводимости достигается за счет частичного гетеровалентного замещения в слое зарядового резервуара (например,

Следует отметить, что экспериментальная работа осложнялась неустойчивостью ряда ферроарсенидов и ферроселенидов на воздухе, а также способностью реакционных смесей, содержащих щелочные металлы, разрушать кварцевое стекло. Поэтому для успешного синтеза было необходимо тщательно изолировать реакционные смеси и продукты синтеза от кислорода и влаги воздуха, что достигалось при работе в перчаточном боксе в атмосфере аргон-

Остановимся теперь на полученных результатах.

Из всех изученных соединений, пожалуй, самым удобным объектом для исследования влияния замещения на структурные и СП свойства оказался ферроарсенид натрия NaFeAs . По своему поведению он напоминает неоптимально допированное вещество-родоначальник. Так, при охлаждении NaFeAs претерпевает структурный переход ($T_s \approx 55 \text{ K}$), а затем переходит в магнитное состояние типа SDW ($T_N \approx 46 \text{ K}$), и лишь при температуре около 10 K частично переходит в состояние сверхпроводимости, в котором объемная доля сверхпроводящей фракции составляет около 10%. К моменту начала нашей работы уже появились публикации о возможности частичного замещения железа в NaFeAs на кобальт и никель. В нашем исследовании мы существенно расширили список заместителей. Были получены серии поликристаллических и монокристалльных образцов $\text{NaFe}_{1-x}\text{M}_x\text{As}$ ($\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cr}, \text{Rh}, \text{Ru}$), установлены границы замещения (до $\sim 20\text{-}30 \text{ ат. \%}$ для 3d- и до $\sim 5\text{-}8 \text{ ат. \%}$ для 4d-элементов) и проведено систематическое исследование влияния замещения на структурные особен-

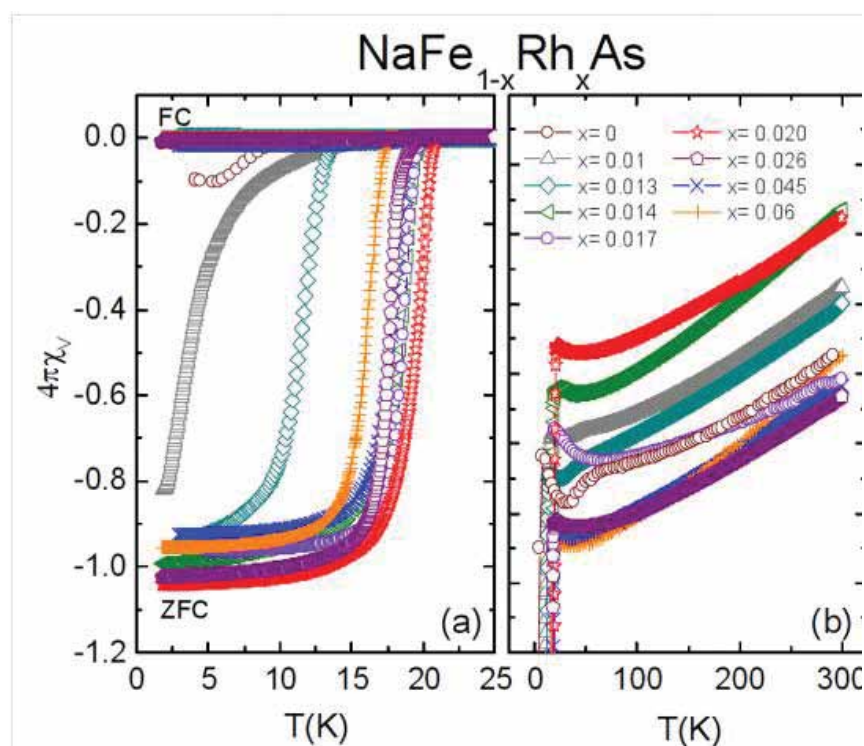


Рис. 3. Кривые магнитной восприимчивости образцов $\text{NaFe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{As}$, а) магнитное поле $H = 20$ Э, $H//ab$, охлаждение в режимах ZFC и FC. б) $H = 1$ Тл, $H//ab$, охлаждение в режиме ZFC.

соответствующие характеристические значения теории БКШ Δ_i/kT_c ($\sim 8, 2, 7-3, 3, \sim 1$), а также температурные зависимости $\Delta_i(T)$ (рис. 76). Детальный анализ полученных данных позволяет оценить степень анизотропии СП щелей в импульсном пространстве, внутри- и межзонные константы электрон-бозонного взаимодействия ($\lambda_{TL} \approx \lambda_{LG} \ll \lambda_{SL}, \lambda_{SL} < \lambda_{SS} < \lambda_{LL}, \lambda_{LT}$) и примерное отношение плотностей электронных состояний в трех зонах ($N_r \approx N_i \ll N_c$).

Существенные различия в проявляемых физических свойствах ферроарсенидов лития и натрия могут быть связаны с особенностями внутризонного и межзонного спаривания в этих соединениях. Так, изучение термодинамической природы перехода в сверхпроводящее состояние монокристаллов $\text{NaFe}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{As}$ методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) показало наличие одной СП щели, имеющей s-волновой характер, а величина параметра БКШ $\Delta/(k \cdot T_c) = 1,8 \div 2,1$ весьма близка к классическому значению (1,76). Однако в свете литературных данных о двухщелевом s± характере СП в NaFeAs , можно предположить, что в описанном эксперименте была изучена лишь одна из щелей, тогда как другая не была обнаружена.

Особенности LiFeAs проявляются не только в интересных физических свойствах, но и в уникальной способности к замещению катионов лития на 3d-элементы. Так, еще в 1968 г., когда был открыт ферроарсенид лития [22] (действительно, это вещество впервые синтезировали почти полвека назад, однако никому не пришло в голову изучить его СП свойства), авторы указали на возможность частичной замены лития на железо с образованием нестехиометричного продукта замещения $\text{Li}_{(1-x)}\text{Fe}_{(1+x)}\text{As}$. Оказалось, что даже небольшое замещение приводит к подавлению СП свойств и магнитному упорядочению [23]. Нами были синтезированы не только поликристаллические образцы, но и монокристаллы нестехио-

В отличие от NaFeAs и всех остальных ферроарсенидных СП, второй представитель семейства 111 – ферроарсенид лития, будучи веществом-родоначальником, тем не менее, не проявляет структурного и магнитного фазовых переходов, и ведет себя как оптимально допированный железосодержащий СП с температурой $T_c = 17$ К. Это означает, что ни допирование в слой проводимости, ни действие давления не приводят к увеличению T_c , а вызывают лишь ее снижение. Благодаря относительно простому электронному строению вблизи уровня Ферми и отсутствию примесей-допантов, ферроарсенид лития привлекает внимание исследователей в качестве удобного экспериментального объекта по отработке различных теоретических моделей. В ходе выполнения проекта были проведены детальные исследования СП состояния монокристаллов LiFeAs методом спектроскопии многократных андreeвских отражений в контактах типа сверхпроводник–нормальный металл–сверхпроводник (SNS-спектроскопия). Из экспериментальных данных (рис. 7а) были определены величины трех сверхпроводящих щелей, $\Delta_t = (5,1-6,5)$ мэВ, $\Delta_i = (3,8-4,8)$ мэВ и $\Delta_s = (0,9-1,9)$ мэВ (при $T < T_c$),

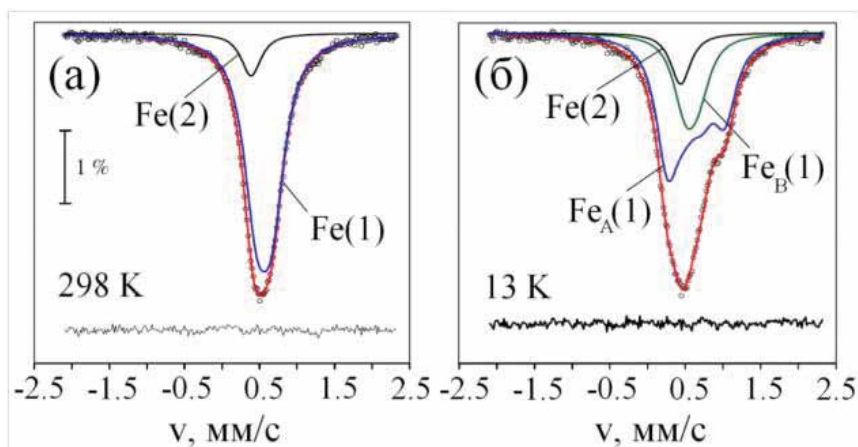


Рис. 5. ^{57}Fe мессбауэровский спектр образца NaFeAs при 298 К (а) и 13 К (б). Компонента $\text{Fe}(1)$ (89%) соответствует катионам железа в основной фазе NaFeAs выше температуры Нееля, компонента $\text{Fe}(2)$ (11%) - примесной фазе NaFe_xAs_2 или блокам сростания близкого состава. При $T < T_N$ компонента $\text{Fe}_A(1)$ отвечает атомам железа основной фазы, антиферромагнитно упорядоченным в неоднородном магнитном поле, $\text{Fe}_A(2)$ – атомам железа основной фазы, оставшимся в немагнитном окружении (могут входить в состав СП фазы).

метрического ферроарсенида лития. Показано, что по мере увеличения степени замещения x , слои проводимости сближаются, что можно объяснить усилением электростатического взаимодействия между ними.

KFe₂As₂: необычная природа сверхпроводимости

При замене катионов лития и натрия в слое зарядового резервуара на более крупные катионы $A=K, Rb$ и Cs происходит изменение стехиометрии и строения соответствующих слоистых ферроарсенидов, чему соответствует переход от семейства 111 к семейству 122. Неспособность катионов калия и его более тяжелых аналогов образовать ферроарсенид со структурой 111 связана с тем, что из-за относительно больших размеров этих катионов тетрагонально пирамидальные полиэдры $[AAs_5]$, присутствующие в структуре 111, и вполне подходящие для $A=Li, Na$, становятся неустойчивыми. В структуре 122 изменяется взаимное расположение слоев проводимости, в результате чего, катион K^+ координирует по четыре атома As из каждого слоя $[FeAs]$, образуя полиэдр $[KAs_8]$ в виде прямоугольного параллелепипеда (рис. 2).

Изменение стехиометрии приводит к тому, что в структуре KFe_2As_2 формальная степень окисления железа $\text{CO}(\text{Fe})=+2,5$, что существенно превышает $\text{CO}(\text{Fe})=+2$ в веществах родоначалъниках (для семейства 122 родоначалъником является AEFe_2As_2 , где $\text{AE}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) или, например, $\text{CO}(\text{Fe})=+2,2$ в $\text{K}_{0,4}\text{Ba}_{0,6}\text{Fe}_2\text{As}_2$, для которого достигается оптимальный уровень допирования дырочными носителями заряда. Таким образом, ферроарсенид калия – сверхпроводник с сильно «передопированным» дырочными носителями заряда проводящим слоем, и изучение влияния замещения на СП и другие свойства этого вещества представляет большой интерес.

В нашей работе мы впервые получили монокристаллические образцы $K(Fe_{1-x}TM_x)_2As_2$, ($TM=Co, Rh, Cr, Ru$)

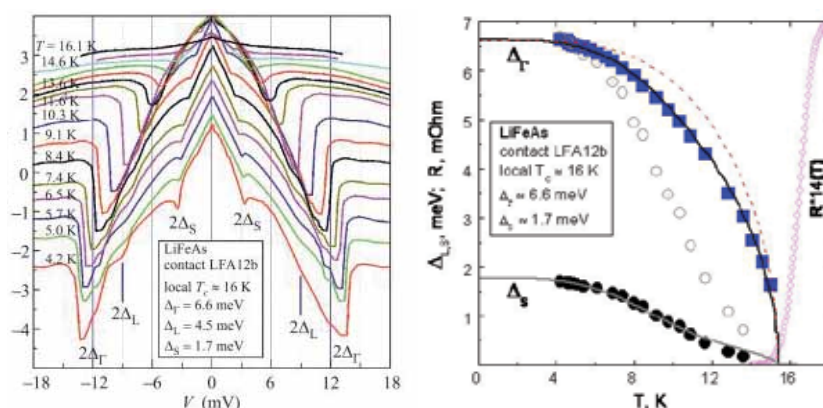
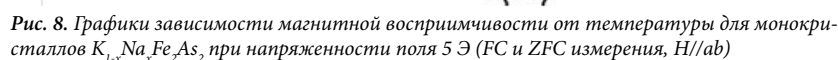
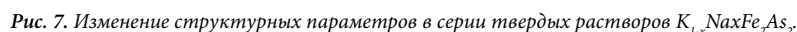


Рис. 6. Исследование образца LiFeAs методом внутренней андреевской спектроскопии (а) Спектры динамической проводимости SNS-контакта образца LiFeAs , измеренные в интервале температур $4,2\text{ K} \leq T \leq T^{\text{local}} \approx 16\text{ K}$. Характеристики сдвинуты вдоль вертикальной оси для удобства рассмотрения. Положения основных андреевских рефлексов отмечены как $2\Delta_{\text{p}}$, $2\Delta_{\text{c}}$ и $2\Delta_{\text{f}}$

(б) Температурные зависимости сверхпроводящих щелей в LiFeAs , построенные по данным рис. 7а: большой $\Delta_s(T)$ (квадраты) и малой $\Delta_s(T)$ (сплошные кружки). Нормированная зависимость $\Delta_s(T) \cdot \Delta_s(0)/\Delta_s(0)$ и резистивный переход образца LFA12 приведены открытыми кружками (темными) и светлыми, соответственно для сравнения. Сплошными линиями представлены теоретические температурные зависимости щелей, рассчитанные на основе двухщелевой БКШ-модели Москаленко и Сула; штриховая линия соответствует стандартной одощелевой БКШ-образной функции

с замещением в катионной подрешетке железа. Можно было ожидать, что по аналогии с NaFeAs , замещение на Co и Rh приведет к допированию проводящего слоя электронами и возрастанию T_c . Однако, уже при уровне замещения 1 ат.% значение T_c существенно понижается, а при уровне 5 ат.% сверхпроводимость полностью исчезает. Замещение железа на рутений и хром также приводят к быстрому подавлению СП свойств. Такое поведение контрастирует с куполообразной зависимостью T_c от степени замещения, наблюдаемой нами в $\text{NaFe}_{1-x}\text{TM}_x\text{As}$, и могло бы свидетельствовать о различной природе СП щели в ферроарсенидах щелочных металлов семейства 111 KFe_2As_2 .

Данное предположение подтвердилось в результате синтеза и исследования свойств образцов $K_{1-x}Na_xFe_2As_2$ с частичным замещением калия в слое зарядового резервуара на натрий. В нашей работе мы впервые установили возможность такого замещения, подобрали условия синтеза и методом «self-flux» вырастили монокристаллы $K_{1-x}Na_xFe_2As_2$ ($x < 0,5$) с различным уровнем замещения. Анализ рентгенограмм показал, что по мере увеличения x , параметры элементарной ячейки a и особенно c уменьшаются, что соответствует сближению слоев проводимости (рис. 7). Согласно данным монокристалльного рентгеноструктурного анализа, замещение калия на натрий приводит к заметному искажению тетраэдрических полиэдров $[FeAs_4]$ в слое проводимости, что является одним из эмпирических признаков уменьшения T_c . Действительно, измерение Т-зависимостей магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости (C_p) образцов $K_{1-x}Na_xFe_2As_2$ показало, что замещение калия на натрий ведет к по-



Семейство ферроселенидов щелочных металлов $AxFe_{2-y}Se_2$ (сокращенно 122Se) с температурой T_c около 30 К существенно отличается от всех остальных Fe-СП. Так, несмотря на сходство во взаимном расположении слоев с арсенидным семейством AFe_2As_2 (122As), в ферроселенидах катионные подрешетки железа и щелочного металла

На следующем этапе нашей работы было изучено влияние замещения в катионных подрешетках ферроселенида калия на СП свойства. Было показано, что уже при уровне замещения около 1% в слое проводимости ($\text{Fe} \rightarrow \text{Co}$) СП свойства образца $\text{K}_{x-y}(\text{Fe}, \text{Co})_{2-y}\text{Se}_2$ оказываются полностью подавлены. В отличие от замещения в катионной подрешетке железа, частичное замещение калия на

Литература

1. **Basov D.N., Chubukov A.V.**
Manifesto for a higher T_c [lessons from pnictides and cuprates] // Nature Physics 7, 272–276 (2011).
2. **Yoichi Kamihara, Takumi Watanabe, Masahiro Hirano, Hideo Hosono.**
// Iron-Based Layered Superconductor La[O1-xFx]FeAs (x = 0.05–0.12) with T_c = 26 K // J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 3296–3297.
3. <http://arxiv.org/> Сервер электронных препринтов arXiv.org, раздел "Superconductivity".
4. **Jiang Hao, Sun Yun-Lei, Xu Zhu-An, Cao Guang-Han.**
// Crystal chemistry and structural design of iron-based superconductors // Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087410.
5. **Guo J.G., Jin S.F, Wang G., Wang S.C., Zhu K.X., Zhou T.T., He M., Chen X L**
Phys. Rev. B 82 (2010) 180520.
6. **Dong Chi-Heng, Wang Hang-Dong, Fang Ming-Hu.**
// Exploration of iron-chalcogenide superconductors // Chin. Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087401.
7. **Ying Tian-Ping, Wang Gang, Jin Shi-Feng et al.**
// Exploring FeSe-based superconductors by liquid ammonia method // Chin. Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087412.
8. **Krzton-Maziopa A., Pomjakushina E.V., Pomjakushin Yu V. et al**
// Synthesis of a new alkali metal-organic solvent intercalated iron selenide superconductor with T_c ≈ 45 K // J. Phys.: Condens. Matter 24 (2012) 382202.
9. **Stewart G.R.**
// Superconductivity in iron compounds // Rev. Mod. Phys., 83, 4 (2011).
10. **Canfield P.C., Bud'ko S.L.**
// FeAs-Based Superconductivity: A Case Study of the Effects of Transition Metal Doping on BaFe2As2 // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2010. 1:27–50.
11. **Kasahara S., Shibauchi T., Hashimoto K., Ikada K. et al.**
// Evolution from non-Fermi- to Fermi-liquid transport via isovalent doping in BaFe2(As1-xPx)2 superconductors // Phys. Rev. B 81, 184519 (2010).
12. **Yanwei Ma**
// Progress in wire fabrication of iron-based superconductors // Supercond. Sci. Technol. 25 (2012) 113001.
13. **Putti M., Pallecchi I., Bellingeri E., Cimberle M.R. et al**
// New Fe-based superconductors: properties relevant for applications // Supercond. Sci. Technol. 23 (2010) 034003.
14. **Peng R., Xu H. C., Tan S.Y., Xia M. et al.**
// Critical role of substrate in the high temperature superconductivity of single layer FeSe on Nb:BaTiO3 // arXiv:1402.1357v1 [cond-mat. sup-con] (2014).
15. **Dagotto E.**
// Colloquium: The unexpected properties of alkali metal iron selenide superconductors // Reviews of modern physics 85 (2013) 849.
16. **Fujitsu S., Matsuishi S., Hosono H.**
// Iron based superconductors processing and properties // International Materials Reviews (2012) 57 311–327.
17. **Ивановский А.Л.**
// Новые высокотемпературные сверхпроводники на основе оксидов редкоземельных и переходных металлов и родственных фаз: синтез, свойства и моделирование. Успехи физических наук, т. 178, №12, с. 1273, (2008).
18. **Yu Shun-Li, Li Jian-Xin.**
// Spin fluctuations and unconventional superconducting pairing in iron-based superconductors // Chin. Phys. B Vol. 22, No. 8 (2013) 087411.
19. **Hirschfeld P.J., Korshunov M.M., Mazin I.I.**
// Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors // Rep. Prog. Phys. (2011) 74 124508.
20. **Kordyuk A.A.**
// Iron-based superconductors: Magnetism, superconductivity, and electronic structure (Review Article) // Low temperature physics 38 (2012) 888.
21. **Морозов И.В., Болталин А.И., Шевельков А.В., Казаков С.М., Рослова М.В., Овчинников А.В., Сон В.Б.**
// Реактор для твердофазного синтеза сверхпроводников, содержащих щелочные металлы. // Патент РФ на полезную модель № 113876, начало действия 18.04.2011).
22. **Juzaund R.K., Langer Z.**
// Ternary Phosphide and Arsenide des Lithiums mit Eisen, Kobalt oder Chrom Cu, Sb-Typ // Anorg. All. Chemie. B 361. (1965) 58.
23. **Pitcher M.J., Lancaster T., Wright J.D. et al**
// Compositional Control of the Superconducting Properties of LiFeAs // J. Am. Chem. Soc. (2010), 132, 10467.
24. **M. Roslova, F. Steckel, R. Beck, I. Morozov, S. Aswartham, D. Evtushinsky, Ch. G. F. Blum, M. Abdel-Hafiez, D. Bombor, A. Voss, A. Shevelkov, A. U. B. Wolter-Giraud, Ch. Hess, S. Wurmehl, and B. Büchner**
// Crystal growth and the electronic phase diagram of the 4d doped Na_{1-x}Fe_xRhAs in comparison with 3d Na_{1-δ}Fe_{1-x}Co_xAs prepared for publication.
25. **I. Presniakov, I. Morozov, A. Sobolev, M. Roslova, A. Boltalin, V. Son, O. Volkova, A. Vasiliev, S. Wurmehl and B. Büchner**
// Local structure and hyperfine interactions of Fe-57 in NaFeAs studied by Mossbauer spectroscopy // Journal of Physics-Condensed Matter. 2013. v. 25. Issue: 34 P 346003.
26. **Presniakov I., Morozov I., Sobolev A., Roslova M., Boltalin A., Son V., Volkova O., Vasiliev A.**
// A ⁵⁷Fe Mössbauer Study of Local Structure and Spin Arrangements in Antiferromagnetic NaFeAs // AIP Conference Proceedings, № 1489, p. 21–27 (2012).
27. **S.A. Kuzmichev, T.E. Shanygina, I.V. Morozov, A.I. Boltalin, M.V. Roslova, S. Wurmehl, B. Büchner**
// Investigation of LiFeAs by means of "Break-junction" Technique // JETP Letters, 95, № 10, p. 537–543 (2012).
28. **Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е., Болталин А.И., Морозов И.В.**
// Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящего LiFeAs: анизотропия параметров порядка и их температурное поведение // Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики", том 98, с. 816–825 (2013).
29. **S. Thirupathaiah, D. V. Evtushinsky, J. Maletz, V. B. Zabolotnyy, A. A. Kordyuk, T.K. Kim, S. Wurmehl, M. Roslova, I. Morozov, B. Büchner, and S. V. Borisenko.**
// A weak-coupling superconductivity in electron doped NaFe_{0.95}Co_{0.05}As is revealed by ARPES // Phys. Rev. B 86, 214508 (2012).
30. **V. Grinenko, D.V. Efremov, S.-L. Drechsler, S. Aswartham, D. Gruner, M. Roslova, I. Morozov, K. Nenkov, S. Wurmehl, A.U.B. Wolter, B. Holzapfel, and B. Büchner**
// Superconducting specific heat jump ΔC_T⁰ (β ≈ 2) for K_{1-x}NaxFe₂As₂ // Phys. Rev. B 89, 060504(R) (2014).
31. **Abdel-Hafiez, M.; Grinenko, V.; Aswartham, S.; Morozov I. M. Roslova, O. Vakaliuk, S. Johnston, D.V. Efremov, J. van den Brink, H. Rosner, M. Kumar, C. Hess, S. Wurmehl, A. U. B. Wolter, B. Büchner, E.L. Green, J. Wosnitza, P. Vogt, A. Reifemberger, C. Enss, M. Hempel, R. Klingeler, and S.-L. Drechsler**
// Evidence of d-wave superconductivity in K_{1-x}NaxFe₂As₂ (x = 0,01) single crystals from low-temperature specific-heat measurements // Physical Review B V. 87 (2013) 180507.
32. **Maria V. Roslova, Oleg I. Lebedev, Igor V. Morozov, Saicharan Aswartham, Sabine Wurmehl, Bernd Büchner, and Andrei V. Shevelkov**
// Diversity of Microstructural Phenomena in Superconducting and Non-superconducting Rb_xFe_{2-y}Se₂: A Transmission Electron Microscopy Study at the Atomic Scale // Inorg. Chem. 2013, 52, 14419–14427.
33. **M.V. Roslova, S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, Y.A. Ovchenkov, M. Liu, I.V. Morozov, A.I. Boltalin, A.V. Shevelkov, A.N. Vasiliev**
// Crystal growth, transport phenomena and two gap superconductivity

English

New Layered Intermetallic Iron-based Superconductors and Related Compounds: Controlling Physical Properties by Using Iso- and Heterovalent Substitutions*

Sabine Wurmehl –

PhD, group leader, The Leibniz Institute for Solid State and Materials Research Dresden, Helmholtzstraße 20 01069, Dresden, Germany
e-mail: boltalin@inorg.chem.msu.ru

Oleg Lebedev –

PhD, Research Director, laboratory of Cristallography and materials science, boulevard du Maréchal Juin, 6, 14050 Cae, France
e-mail: oleg.lebedev@ensicaen.fr

Igor V. Morozov –

doctor of chemical science, assistant professor, Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia
e-mail: morozov@inorg.chem.msu.ru

Alexander I. Boltalin –

PhD, assistant professor, Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia
e-mail: boltalin@inorg.chem.msu.ru

Andrei V. Shevelkov –

doctor of chemical science, professor, Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia
e-mail: shev@inorg.chem.msu.ru

Abstract

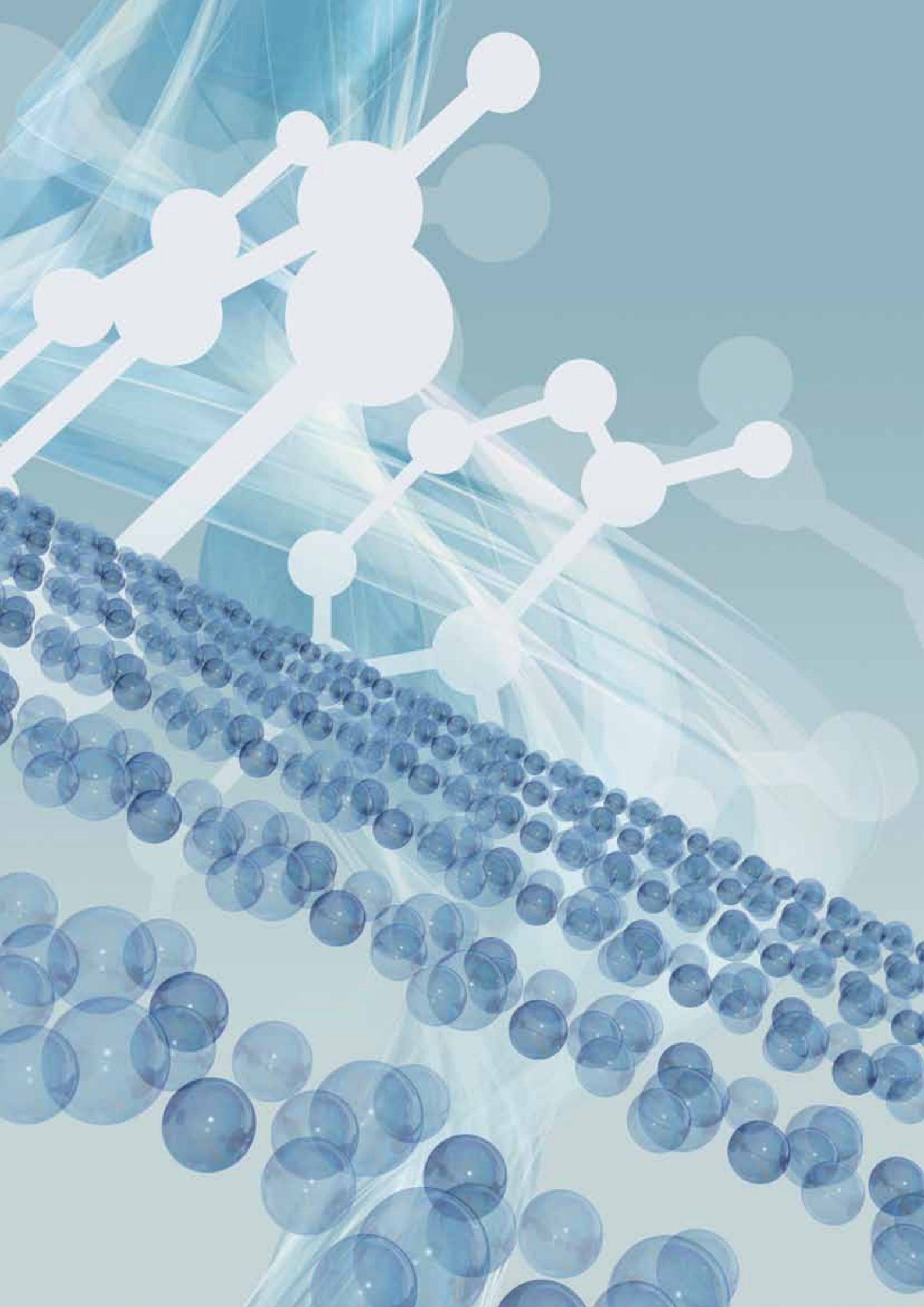
The discovery of the high-temperature superconductors based on layered iron pnictides and chalcogenides seems to be one of the major achievements in the field of solid state physics and chemistry in the 21st century. Several representatives of this family of compounds have been prepared and thoroughly investigated within the frames of the trilateral ERANET project, including AFeAs ($\text{A}=\text{Li}, \text{Na}$), KFe_2As_2 и $\text{A}_x\text{Fe}_{(2-y)}\text{Se}_2$ ($\text{A}=\text{K}, \text{Rb}$). A number of products of substitution in the cationic sublattice (Na for K ; $3d$ and $4d$ metals for Fe) were prepared, among them $(\text{Na}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$, $(\text{Na}, \text{K})\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$, $\text{K}(\text{Fe}, \text{TM})_2\text{As}_2$ и $\text{Na}(\text{Fe}, \text{TM})\text{As}$ ($\text{TM}=\text{Cr}, \text{Mn}, \text{Rh}$ и Ru) – for the first time. All compounds were synthesized as large single crystals, rendering their multifarious investigation. Their crystal structure, magnetic and transport properties were assessed by means of various methods, including Andreev spectroscopy and angle-resolution photoelectron spectroscopy (ARPES). The unusual magnetic behavior of NaFeAs was uncovered with the help of Moessbauer spectroscopy, which showed the segregation of the phase into superconducting and antiferromagnetic domains. The coexistence of these two properties is characteristic for all ferroselenides is associated with their intrinsic inhomogeneity, which was confirmed by high-resolution transmission electron microscopy, where the coexistence of several superstructural motifs due to partial ordering of vacancies in different sites was discovered. It is shown that substitution of iron by group 9 and 10 elements in $\text{Na}(\text{Fe}, \text{TM})\text{As}$ leads to increasing T_c , reaching the maximum values at 2.5% substitution. On contrary, the same type of substitution in $\text{K}(\text{Fe}, \text{TM})_2\text{As}_2$ evokes rapid disappearance of superconductivity. It is argued that the difference in the nature of the superconductor gap in the reason for such a difference. It is shown that the insertion of sodium into the A-site in $(\text{Na}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ naturally reduces the distance between the conducting $[\text{Fe}_2\text{As}_2]$ layers and decreases T_c , whereas the analogous substitution in $(\text{Na}, \text{K})\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ does not affect the unit cell parameters and, hence, T_c .

Keywords: High-temperature superconductors based on layered iron pnictides and chalcogenides, two-gap superconductors, substitution in the cation and anion sublattice, superstructural ordering, the synthesis of single crystals, magnetic and transport properties, specific heat, high resolution electron microscopy, Andreev spectroscopy, Moessbauer spectroscopy.

*

The work was financially supported by RFBR (projects No 12-03-91674-ERA_a)

1. **Manifesto for a higher Tc** [lessons from pnictides and cuprates] // Nature Physics 7, 272–276 (2011).
2. **Yoichi Kamihara, Takumi Watanabe, Masahiro Hirano, Hideo Hosono.** // Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}1-\text{xFx}]\text{FeAs}$ (x) 0.05-0.12) with $T_c = 26 \text{ K}$ // J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 3296–3297.
3. <http://arxiv.org/> Сервер электронных препринтов arXiv.org, раздел "Superconductivity".
4. **Jiang Hao, Sun Yun-Lei, Xu Zhu-An, Cao Guang-Han.** // Crystal chemistry and structural design of iron-based superconductors // Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087410.
5. **Guo J.G., Jin S.F, Wang G., Wang S.C., Zhu K.X., Zhou T.T., He M., Chen X L** Phys. Rev. B 82 (2010) 180520.
6. **Dong Chi-Heng, Wang Hang-Dong, Fang Ming-Hu.** //Exploration of iron-chalcogenide superconductors // Chin. Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087401.
7. **Ying Tian-Ping, Wang Gang, Jin Shi-Feng et al.** //Exploring FeSe-based superconductors by liquid ammonia method// Chin. Phys. B – Vol. 22, No. 8. – (2013) 087412.
8. **Krzton-Maziopa A., Pomjakushina E.V., Pomjakushin Yu V. et al** //Synthesis of a new alkali metal-organic solvent intercalated iron selenide superconductor with $T_c \approx 45 \text{ K}$ // J.Phys.:Condens. Matter 24 (2012) 382202.
9. **Stewart G.R.** // Superconductivity in iron compounds // Rev. Mod. Phys., 83, 4 (2011).
10. **Canfield P.C., Bud'ko S.L.** //FeAs-Based Superconductivity: A Case Study of the Effects of Transition Metal Doping on BaFe_2As_2 //Annu. Rev. Condens.Matter Phys. 2010. 1:27–50.
11. **Kasahara S., Shibauchi T., Hashimoto K., Ikada K. et al.** //Evolution from non-Fermi- to Fermi-liquid transport via isovalent doping in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{Px})_2$ superconductors// Phys. Rev. B 81, 184519 (2010).
12. **Yanwei Ma** //Progress in wire fabrication of iron-based superconductors // Supercond. Sci. Technol. 25 (2012) 113001.
13. **Putti M., Pallecchi I., Bellingeri E., Cimberle M.R. et al** //New Fe-based superconductors: properties relevant for applications//Supercond. Sci. Technol. 23 (2010) 034003.
14. **Peng R., Xu H. C., Tan S.Y., Xia M. et al.** //Critical role of substrate in the high temperature superconductivity of single layer FeSe on Nb:BaTiO_3 //arXiv:1402.1357v1 [cond-mat. sup-con] (2014).
15. **Dagotto E.** // Colloquium: The unexpected properties of alkali metal iron selenide superconductors //Reviews of modern physics 85 (2013) 849.
16. **Fujitsu S., Matsuishi S., Hosono H.** //Iron based superconductors processing and properties//International Materials Reviews (2012) 57 311–327.
17. **Ивановский А.Л.** // Новые высокотемпературные сверхпроводники на основе оксиселенидов редкоземельных и переходных металлов и родственных фаз: синтез, свойства и моделирование. Успехи физических наук, т. 178, №12, с. 1273, (2008).
18. **Yu Shun-Li, Li Jian-Xin.** // Spin fluctuations and unconventional superconducting pairing in iron-based superconductors // Chin. Phys. B Vol. 22, No. 8 (2013) 087411.
19. **Hirschfeld P.J., Korshunov M.M., Mazin I.I.** //Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors //Rep. Prog. Phys. (2011) 74 124508.
20. **Kordyuk A.A.** // Iron-based superconductors: Magnetism, superconductivity, and electronic structure (Review Article) //Low temperature physics 38 (2012) 888.
21. **Морозов И.В., Болталин А.И., Шевельков А.В., Казаков С.М., Рослова М.В., Овчинников А.В., Сон В.Б.** // Реактор для твердофазного синтеза сверхпроводников, содержащих щелочные металлы. // Патент РФ на полезную модель № 113876, начало действия 18.04.2011).
22. **Juzaund R.K., Langer Z.** // Ternare Phosphide und Arsenide des LithiumsmitEisen, KobaltoderChromimCu,Sb-Typ //Anorg.All.Chemie.B 361. (1965) 58.
23. **Pitcher M.J., Lancaster T., Wright J.D. et al** //Compositional Control of the Superconducting Properties of LiFeAs //J. Am. Chem. Soc. (2010), 132, 10467.
24. **M. Roslova, F. Steckel, R. Beck, I. Morozov, S. Aswartham, D.Evtushinsky, Ch.G. F. Blum, M. Abdel-Hafiez, D. Bombor, A.Voss, A.Shevelkov, A.U.B. Wolter-Giraud, Ch. Hess, S.Wurmehl, and B. Büchner** // Crystal growth and the electronic phase diagram of the 4d doped $\text{Na}_{1-x}\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{As}$ in comparison with 3d $\text{Na}_{1-x}\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ as prepared for publication.
25. **I. Presniakov. I.Morozov, A.Sobolev, M.Roslova, A.Boltalin, V. Son, O.Volkova, A.Vasiliev, S.Wurmehl and B Büchner** // Local structure and hyperfine interactions of Fe-57 in NaFeAs studied by Mossbauer spectroscopy // Journal of Physics–Condensed Matter. 2013. v. 25. Issue: 34 P 346003.
26. **Presniakov I., Morozov I., Sobolev A., Roslova M., Boltalin A., Son V., Volkova O., Vasiliev A.** // A ^{57}Fe Mössbauer Study of Local Structure and Spin Arrangements in Antiferromagnetic NaFeAs // AIP Conference Proceedings, № 1489, p. 21–27 (2012).
27. **S.A. Kuzmichev, T.E. Shanygina, I.V. Morozov, A.I. Boltalin, M.V. Roslova, S. Wurmehl, B. Büchner** // Investigation of LiFeAs by means of "Break-junction" Technique //JETP Letters, 95, № 10, p. 537–543 (2012).
28. **Kuzmichev S.A., Kuzmicheva T.E., Boltalin A.I., Morozov I.V.** // Spektroskopija mnogokratnyh andreevskih otrazhenij sverhprovodjashhego LiFeAs : anizotropija parametrov porjadka i ih temperaturnoe povedenie // Pis'ma v "Zhurnal jeksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki", tom 98, s. 816–825 (2013).
29. **S.Thirupathiah, D.V. Evtushinsky, J. Maletz, V.B. Zabolotnyy, A.A.Kordyuk, T.K. Kim, S. Wurmehl, M. Roslova, I. Morozov, B. Büchner, and S.V. Borisenko.** // A weak-coupling superconductivity in electron doped $\text{NaFe}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{As}$ is revealed by ARPES // Phys. Rev. B 86, 214508 (2012).
30. **V. Grinenko, D.V. Efremov, S.-L.Drechsler, S. Aswartham, D. Gruner, M. Roslova, I. Morozov, K. Nenkov, S. Wurmehl, A.U.B. Wolter, B.Holzapfel, and B. Büchner** // Superconducting specific heat jump $\Delta C \text{ at } T_c(\beta \approx 2)$ for $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ //Phys. Rev. B 89, 060504(R) (2014).
31. **Abdel-Hafiez, M.; Grinenko, V.; Aswartham, S.; Morozov I. M.Roslova, O. Vakaliuk, S. Johnston, D.V. Efremov, J. van den Brink, H.Rosner, M. Kumar, C. Hess, S. Wurmehl, A. U. B. Wolter, B. Büchner, E.L. Green, J. Wosnitza, P. Vogt, A. Reifemberger, C.Enss, M.Hempel, R.Klingeler, and S.-L.Drechsler** // Evidence of d-wave superconductivity in $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($x=0,01$) single crystals from low-temperature specific-heat measurements //Physical Review B V. 87 (2013) 180507.
32. **Maria V. Roslova, Oleg I. Lebedev, Igor V. Morozov, Saicharan Aswartham, Sabine Wurmehl, Bernd Büchner, and Andrei V. Shevelkov** // Diversity of Microstructural Phenomena in Superconducting and Non-superconducting $\text{Rb}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$: A Transmission Electron Microscopy Study at the Atomic Scale // Inorg. Chem. 2013, 52, 14419–14427.
33. **M.V. Roslova, S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, Y.A. Ovchenkov, M. Liu, I.V. Morozov, A.I. Boltalin, A.V. Shevelkov, A.N. Vasiliev** // Crystal growth, transport phenomena and two gap superconductivity



**Российско-индийское сотрудничество в области гликонаук
при поддержке РФФИ и ДНТ ***

Устюжанина Н.Е., Саксена Р.К., С. Саран С., Усов А.И., Билан М.И., Генинг М.Л.,
Талукдар П., Титов Д.В., Цветков Ю.Е., Кришина Г., Нифантьев Н.Э.

В статье рассмотрены результаты Российско-Индийского симпозиума по гликонаукам (13–16 июня 2011 г., Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва), проведенного при поддержке РАН, РФФИ и ДНТ, а также первых двусторонних проектов РФФИ-ДНТ в области гликонаук, посвященных поиску фукоиданмодифицирующих ферментов, а также синтезу и изучению свойств гликоконъюгатных производных в качестве агентов, способных образовывать трансмембранные ионные каналы. Данные исследования привели к получению значимых научных результатов, которые свидетельствуют о целесообразности продолжения и расширения совместных работ в указанных направлениях.

Ключевые слова: гликонауки, углеводы, олигосахариды, гликоконъюгаты, полисахариды, фукоидан, фукоиданаза, циклоолигоглюкозамин, ионный канал.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 11-03-92750 ИНД_з, 11-03-92694 ИНД_а и 12-03-92703 ИНД_а).

Более 20 лет между Россией и Индией действует комплексная долгосрочная программа (КДП) научно-технического сотрудничества. К сожалению, вот уже много лет адресное финансирование КДП с российской стороны практически не проводится, поэтому проводимая РФФИ и индийским Министерством науки и технологий (Department of Science and Technology – ДНТ) программа стала практически единственным инструментом поддержки совместных научных исследований.

На заседаниях Совета КДП в 2007 и 2008 гг. в качестве одного из новых приоритетных направлений

междисциплинарного сотрудничества были выбраны гликонауки. Приставка «глико» обозначает принадлежность органического соединения к углеводам, соответственно, в область гликонаук вовлечены исследователи, занимающиеся синтезом углеводов, изучением их структуры, биосинтеза и механизма участия в процессах клеточного распознавания, в том числе, и определяющих развитие многих болезней. Данное направление наук о живом сегодня очень активно развивается именно в связи с тем, что оно открывает новые возможности для создания эффективных лекарственных препаратов для борьбы с такими опас-



УСТУЖАНИНА
Надежда Евгеньевна
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник
Института органической химии
имени Н.Д. Зелинского РАН.



САКСЕНА
Раендра Кумар
заведующий лабораторией,
факультет микробиологии,
Университет Дели,
Южный кампус. Индия.



САУРАБ
Саран
научный сотрудник, факультет
микробиологии, Университет
Дели, Южный кампус. Индия.



УСОВ
Анатолий Иванович
профессор, доктор химических наук, заведующий лабораторией растительных полисахаридов Института органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН.



БИЛАН
Мария Ивановна
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник
Института органической химии
имени Н.Д. Зелинского РАН.



ГЕНИНГ
Марина Леонидовна
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник
Института органической химии
имени Н.Д. Зелинского РАН.



ТАЛУКДАР
Пинаки
ассистент профессора,
Индийский институт науки,
образования и исследований,
Пуна, Индия.



ТИТОВ
Денис Валерьевич
кандидат химических наук,
научный сотрудник Института
органической химии имени
Н.Д. Зелинского РАН.



ЦВЕТКОВ
Юрий Евгеньевич
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник
Института органической химии
имени Н.Д. Зелинского РАН.



КРИШНА
Ганеш
профессор, директор
Индийского института науки,
образования и исследований.



НИФАНТЬЕВ
Николай Эдуардович
член-корреспондент РАН, заведующий лабораторией химии гликоконъюгатов Института органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН.

Учитывая, что в 2011 г. по инициативе ЮНЕСКО во всем мире отмечался Международный Год Химии, в ходе симпозиума была проведена специальная сессия, посвященная химическому образованию в России и Индии. О том, какое значение придается подготовке научных кадров в Индийском институте науки, образования и исследований в Пуне, рассказал сопредседатель симпозиума профессор Кришна Ганеш. Возглавляемый им институт необычен – это высшее учебное заведение, специально созданное для подготовки исследователей. В отличие от него, ИОХ РАН – научная организация, но в нем делается очень много для подготовки кадров. Ключевыми элементами созданной и широко известной теперь уже не только в России, но и в мире, системы непрерывного химического образования являются Московский Химический Лицей (МХЛ) и Высший Химический Колледж РАН (ВХК РАН), учащиеся которых имеют возможность работать в лабораториях ИОХ РАН и других академических институтах уже со школьной скамьи. Об истории создания и сегодняшних задачах системы подготовки научных кадров для химических академических институтов в своих выступлениях рассказали заведующий отделом химии нестабильных молекул и малых циклов ИОХ РАН, Председатель ВХК РАН академик Олег Нефедов, а также директор МХЛ и сотрудник ИОХ РАН Сергей Семенов.

1. Синтез и иммунологические исследования олиго- и полисахаридных антигенов клеточной стенки грибов, бактерий и паразитов.
2. Структурные, синтетические и биологические исследования бактериальных липополисахаридов.
3. Структурные, синтетические и биологические исследования углеводных соединений из морских животных и водорослей.
4. Структурный анализ и изучение биологической активности растительных полисахаридов.

В последние годы в рамках этих направлений успешно выполнен ряд инициативных исследований в рамках двусторонних проектов РФФИ-ДНТ, включавших изучение новых подходов в химии углеводов и создании блокаторов углеводсвязывающих белков (лектинов), поиск углеводмодифицирующих ферментов, а также создание наноразмерных соединений на основе углеводных матриц. В качестве примеров хотел бы остановиться на двух недавно завершенных проектах. В выполнении первого из них («Ферментативная модификация фукоиданов как основа для разработки лекарственных препаратов, структурные и функциональные исследования образцов из водорослей, собранных в Индии и России») участвовали сотрудники лаборатории профессора Р.К. Саксена с факультета микробиологии Южного кампуса университета Дели, а с российской – сотрудники Института биомедицинской химии им. Ореховича РАМН, РОНЦ им. Н.Н. Блохина РАМН и ИОХ РАН. В результате проведенного исследования обнаружен фермент, модифицирующий полисахариды фукоиданы, что, по

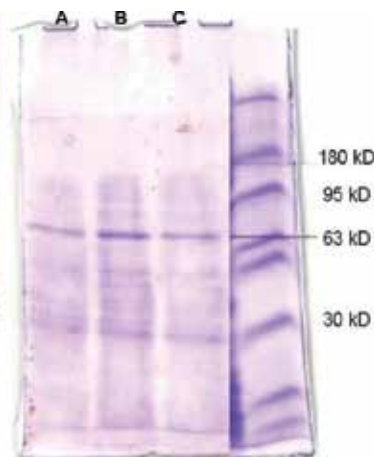


Рис. 1. Микроорганизмы рода *Pseudoalteromonas*, паразитирующие (фотография I) на бурых водорослях и характеристика с помощью гель-электрофореза (II) фермента фукозидазы (в разных концентрациях), полученного из культуральной жидкости микроорганизма *Pseudoalteromonas citrea* (P.c.)

сле характеристики специфичности и свойств фермента, открывает путь к его использованию для получения широко востребованных лекарственных продуктов на основе фукоиданов (рис. 1). Разработанные подходы позволяют получить и другие фукоиданмодифицирующие ферменты, которые до сих пор систематически не исследованы.

Второй российско-индийский проект, который хотелось бы отметить («Изучение способности производных цикло-(1→6)-β-D-глюкозаминов образовывать трансмембранные ионные каналы и оценка их антибактериальной активности»), выполнен под руководством молодых исследователей: кандидата химических наук Марины Генинг из ИОХ РАН и доктора Пинаки Талукдара из Индийского Института Науки, Образования и Исследования.

В ходе работ по проекту российскими участниками была синтезирована серия конъюгатов циклоолиго- β -(1 $\rightarrow$ 6)-D-глюкозаминов, состоящих из 2, 3, 4 и 5 остатков D-глюкозамина с гидрофобными заместителями различной длины. Эти соединения были исследованы в лаборатории индийских коллег как агенты, способные образовывать трансмембранные ионные каналы по возможным механизмам, показанным на *рис. 2*. Проведенные мембранные исследования показали, что, в зависимости от длины гидрофобных цепей, синтезированные соединения способны образовывать каналы с различной ионно-транспортной активностью. Наиболее активными оказались производные с самыми длинными гидрофобными заместителями, среди которых наиболее эффективный ионный транспорт был у конъюгата с циклическим тетрасахаридным ядром. При исследовании пропускания однозарядных катионов и анионов была показана ионная селективность каналов, связанная с размером циклоолигосахаридного ядра. По-

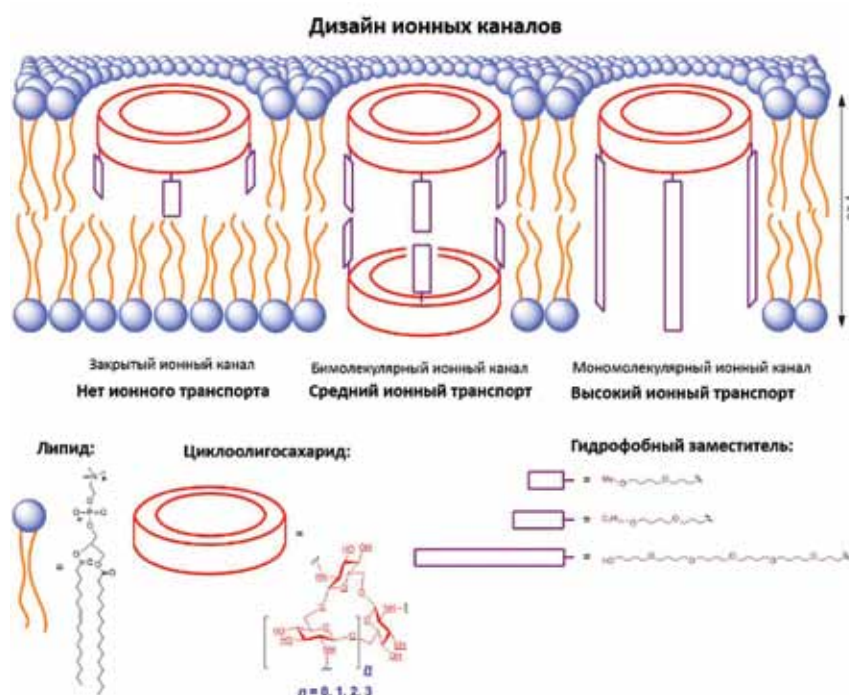


Рис. 2. Исследованные типы синтетических каналообразующих гликолипидных производных на основе циклоолиго- β -(1 $\rightarrow$ 6)-D-глюкозаминовых ядер

лученные соединения открывают путь к созданию противоинфекционных лекарств принципиально нового типа, что требует проведения дальнейших междисциплинарных исследований. Первые результаты работы коллектива российских и индийских авторов опубликованы в рейтинговых специализированных научных журналах Chemical Communications (IF=6,4) и Pure & Applied Chemistry (IF=3,4).

Рассмотренные проекты привели к получению замечательных научных результатов и создали фундамент для расширения совместных работ. Это делает целесообразным включение гликонаук в перечень приоритетных направлений междисциплинарных двусторонних российско-индийских проектов по типу проектов «офи», конкурс на которые планируется в ближайшее время. Желательно, чтобы это были трехлетние проекты для достижения значительного научного результата.

Ну и конечно, заслуживает скорейшего возвращения практика грантов РФФИ на проведение двусторонних семинаров в России и за рубежом, ценность и эффективность которых показана на многих примерах, в том числе, и прошедшего в 2011 г. Российско-индийского симпозиума по гликонаукам.

Участвовали в рассмотренных работах: Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Индийский университет научного образования и исследований в г. Пуна, Факультет микробиологии Южного кампуса университета г. Дели.

English ██████████

RFBR and DST supported Russian-Indian Collaboration in Glycosciences *

Nadezhda E. Ustyuzhanina –
PhD, Senior Researcher N.D. Zelinsky
Institute of organic chemistry RAS, 119991,
Leninsky prospect 47, Moscow, Russia
e-mail: takustya@mail.ru

Saxena Rajendra Kumar –
PhD, Head of the laboratory, Department of Microbiology, University of Delhi
South Campus, 110021 New Delhi, India
e-mail: rksmicro@yahoo.co.in

Saurabh Saran –
PhD, Scientific Researcher, Department
of Microbiology, University of Delhi
South Campus, 110021 New Delhi, India
e-mail: saurabhsaran@gmail.com

Anatoly I. Usov –
Professor, Doctor of Chemical Science, Head
of the laboratory of plant polysaccharides, N.D.
Zelinsky Institute of organic chemistry RAS,
119991, Leninsky prospect 47, Moscow, Russia
e-mail: usov@ioc.ac.ru

Maria I. Bilan –
PhD, Senior Researcher N.D. Zelinsky
Institute of organic chemistry RAS,
119991, Leninsky prospect 47,
Moscow, Russia
e-mail: bilan@ioc.ac.ru

Marina L. Gening –
PhD, Senior Researcher N.D. Zelinsky
Institute of organic chemistry RAS,
119991, Leninsky prospect 47,
Moscow, Russia
e-mail: marina@mcl.ru

Talukdar Pinaki –
PhD, Assistant Professor, Indian Institute
of Science Education and Research
(IISER, Pune), 900, NCL Innovation Park,
Dr Homi Bhabha Road, Pune 411008, India
e-mail: ptalukdar@iiserpune.ac.in

Denis V. Titov –
PhD, Scientific Researcher N.D. Zelinsky
Institute of organic chemistry RAS,
119991, Leninsky prospect 47,
Moscow, Russia
e-mail: glvco@ioc.ac.ru

Yury E. Tsvetkov –
PhD, Senior Researcher N.D. Zelinsky
Institute of organic chemistry RAS,
119991, Leninsky prospect 47, Moscow,
Russia
e-mail: tsvetkov@ioc.ac.ru

Ganesh N. Krishna –
PhD, Professor, Director of Indian
Institute of Science Education
and Research (IISER, Pune)
e-mail: kn.ganesh@iiserpune.ac.in

Nikolay E. Nifantiev –
Corresponding Member RAS, Head of laboratory of glycoconjugate
chemistry, N.D. Zelinsky Institute of organic chemistry RAS, 119991,
Leninsky prospect 47, Moscow, Russia
e-mail: nen@ioc.ac.ru

Abstract ●

This paper summarizes the results of Russian-Indian Symposium on Glycosciences (June 13–16, 2011, N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences), which was organized with the support from RAS, RFBR and DST. Also, it presents the results of the first RFBR-DST supported bilateral projects in the field of glycosciences.

These projects WERE focused on the search of fucoidan modifying enzymes and on the synthesis and subsequent physico-chemical study of glycoconjugate derivatives as transmembrane ion channel forming agents and resulted in the discovery of a new set of scientific data that shows the necessity of continuation and enlargement of bilateral research in the described directions.

Keywords: glycosciences, carbohydrates, oligosaccharides, glycoconjugates, polysaccharides, fucoidan, fucoidanase, cyclooligoglucosamine, ion-channel.

* The work was financially supported by RFBR (projects No 11-03-92750 IND_g , 11-03-92694 IND_a u 12-03-92703 IND_a)

Международное сотрудничество как метод повышения конкурентоспособности российской науки

В последние несколько лет в Российской Федерации, равно как и в других странах «большой двадцатки», активно идет процесс реформирования науки и образования. Основной частью этого процесса является оценка эффективности как науки в целом – на уровне страны или региона, так и научной деятельности отдельных организаций и исследовательских групп. Одним из первых и, пожалуй, важнейшим шагом на начальной стадии реформ является аудит текущего состояния науки. В России один из таких проектов реализуется в рамках инициативы Министерства образования и науки РФ – «карта науки»; его первоначальные результаты нам еще предстоит проанализировать в ближайшем будущем.

Помимо карты науки, собственные исследования эффективности научных исследований проводит и РФФИ. Опираясь на результаты предыдущих лет успешного сотрудничества Elsevier и РФФИ, планируется развивать его в направлении обмена данными по публикациям и их финансированию, а также определения критериев публикации активности с учетом интересов российской науки. Полученные агрегированные данные будут использованы руководством РФФИ и экспертным сообществом при принятии решений руководством фонда и экспертным сообществом.

Аналогичные аудиты активно идут и в других странах. Одним из наиболее успешных примеров в странах G20 является анализ конкурентоспособности британской науки, проведенный совместно Министерством бизнеса, инноваций и компетенций (Business, Innovation, and Skills) правительства Великобритании и Elsevier. Отправным пунктом аудита стал глубокий анализ всех

публикаций британских ученых за период 2008–2012 гг. (5 лет) в сравнении с рядом стран, определенных Великобританией в качестве фокусной референтной группы. В нее вошли как страны G8, так и EU27.

Одним из инструментов измерения продуктивности и эффективности науки является анализ количества и качества (например, цитирования) опубликованных статей в высокорейтинговых реферируемых научных журналах, которые входят в крупнейшие мировые индексы научного цитирования, такие как Scopus. Имея в наличии определенный по времени блок данных по публикациям, отраженным в Scopus для страны и для группы референтных стран, его можно анализировать с разных точек зрения по множеству сравнительных компаративных «срезов». Один из таких «срезов», который показывает качественную и количественную динамику, – это международное соавторство публикаций и уровень их цитируемости. На основании изученного массива данных Scopus за 2008–2012 гг. видно, что количество статей, написанных в международном соавторстве британскими исследователями и учеными из других стран, является видимой тенденцией (Fowler, 2014) и растет в большинстве стран референтной группы (рис. 1).

Для научных публикаций цитируемость является одним из фундаментальных показателей качества исследования и ассоциированной с ним статьи, как результата осмысления этого исследования. Цитируемость напрямую связана с получением максимальной международной «видимости» для автора, организации и страны, в которой он работает. Данные сравнительного анализа британской науки показали, что в среднем статья, написанная в международном соавторстве, имеет существенно большее количество цитирований, и, следовательно, больший «вес» по сравнению со статьей, написанной ученым или группой из одной страны.

Если сравнить процент статей, написанных в международном соавторстве в России и, например, в референтной группе из 5 стран, с которыми Российские ученые сотрудничают чаще всего (США, Франция, Германия, Великобритания, Италия – согласно данным Scopus на июнь 2013 г.), мы видим, что средний процент международного соавторства для нашей страны составляет 29,9%, тогда как процент статей, написанных в международном соавторстве в европейских странах достигает 38,8% (Италия), 42,1% (Великобритания), 43,6% (Герма-

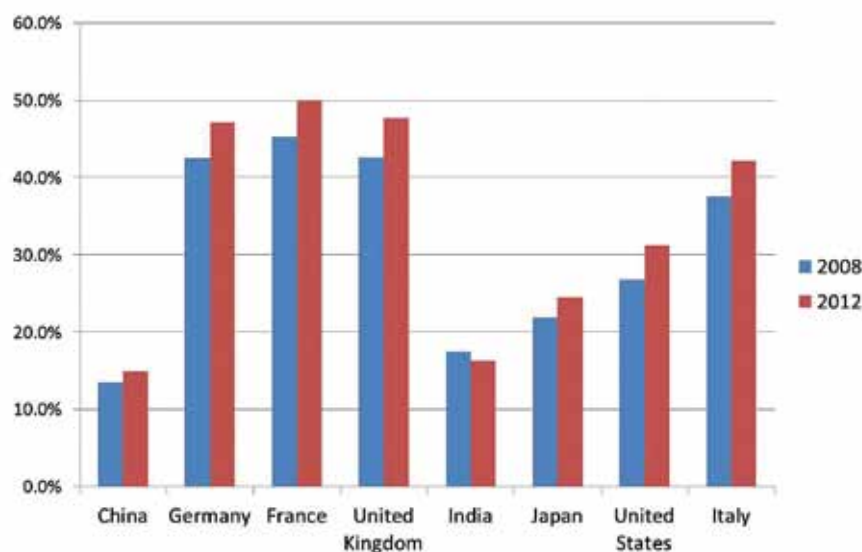


Рис. 1. Процент работ, опубликованных в международном соавторстве

Name	International collaboration (%)	International collaboration	National collaboration
 France	45.4	12.6	8.7
 Germany	43.6	13.4	9.8
 Italy	38.8	13.4	8.6
 Russian Federation	29.9	8.4	2.3
 United Kingdom	42.1	14.3	10.7
 United States	27.3	13.5	13.0

Табл. 1. Доля работ, написанных в международном сотрудничестве, и среднее количество цитирований для статей, подготовленных в международном сотрудничестве и внутри страны

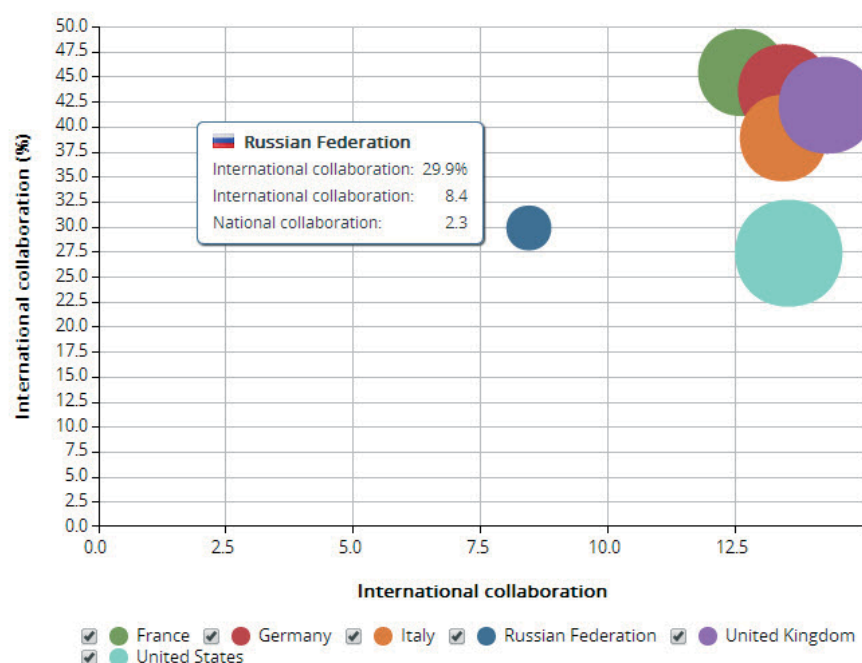


Рис. 2. Работы с международным соавторством

ния), 45,4% (Франция). Показатель США – 27,3% – подтверждает высокую «внутреннюю емкость» научной среды этой страны.

При этом мы видим, что согласно данным Scopus, среднее цитирование на 1 статью при международном соавторстве для России составляет 8,4 (колонка International collaborations), притом, что среднее цитирование на 1 статью с соавторами внутри страны – 2,3 (колонка National collaborations), что показывает более чем тройное превосходство «веса» статей в международном соавторстве над внутрироссийским соавторством. Аналогичные результаты можно увидеть и для большинства стран референтной группы из Европы (табл. 1).

Кроме статистического сравнения, которое имеет свои ограничения, не менее важно проанализировать, насколько степень сотрудничества отражает его «полезность» для двух сторон соавторства – со стороны авторов/страны инициатора и авторов/страны партнера. В данном случае, показатель «полезности» рассматривается с точки зрения FWCI (field weighted citation impact, средневзвешенного показателя цитируемости статьи). FWCI измеряет среднее значение цитируемости статьи и сравнивает его со средним значением цитируемости документа аналогичного типа (статьи, доклада конференции или научного обзора) в определенной области знания и сообразно времени публикации.

Индикатор FWCI всегда определяется в отношении к среднемировому значению 1,0 (прокладывается по горизонтальной оси на *рис. 3* и *рис. 4*) и учитывает как различия по динамике цитирования во времени и в частоте цитирования в разных областях знаний, так и различия интенсивности цитирования для разных типов документов. Применяя вышеописанный подход, можно определить, насколько статьи, написанные в международном соавторстве, от-

вечают интересам как автора/страны инициатора, так и автора/страны партнера. В модели ниже горизонтальная ось «х» показывает FWCI сотрудничества, а вертикальная ось «у» – увеличение FWCI для данного сотрудничества в сравнении со всеми международными коллаборациями всех указанных на рисунке партнеров.

Рассмотрим два графика динамики FWCI: один в отношении России при ее сравнении с 20 странами, с которыми, согласно данным Scopus, мы видим наибольшее количество статей с международным соавторством, и второй для сравнения в отношении крупнейшего партнера России в научном мире по данным Scopus – Германии. На первом графике (рис. 3) мы видим, что российские работы, опубликованные в соавторстве с зарубежными партнерами, практически всегда имеют позитивный результат с точки зрения повышения цитируемости совместных статей для российских авторов, где среднее значение FWCI для Российских работ = 1,24. Все международные соавторские работы российских ученых находятся либо в правом верхнем, либо на границе правого верхнего и правого нижнего полей диаграммы превышая, либо находясь на уровне среднемирового значения (1,0 по вертикальной оси).

Для России пятерка лидирующих стран-партнеров по объему международного соавторства на основании анализа данных Scopus выглядит следующим образом: Германия, США, Франция, Великобритания и Италия.

Поставив в центр анализа Германию, мы увидим диаграмму (рис. 4), на которой российские статьи находятся в позитивной динамике цитируемости и значительно выше общемирового значения FWCI 1,0. Российские статьи показаны индикатором, который находится в верхнем левом сегменте схемы, чуть левее линии «раздела», т.е. среднего

- + Статьи в соавторстве показывают более высокие показатели цитируемости для партнера, но не для инициатора	+ + Статьи в соавторстве показывают высокие показатели цитируемости для обеих сторон.
- - Статьи в соавторстве не приносят какого-либо заметного увеличения цитируемости ни для партнера, ни для инициатора.	+ - Статьи в соавторстве показывают повышение цитируемости для инициатора, но не для партнера.

Табл.2. Анализ цитируемости статей в соавторстве в корреляции с FWCI

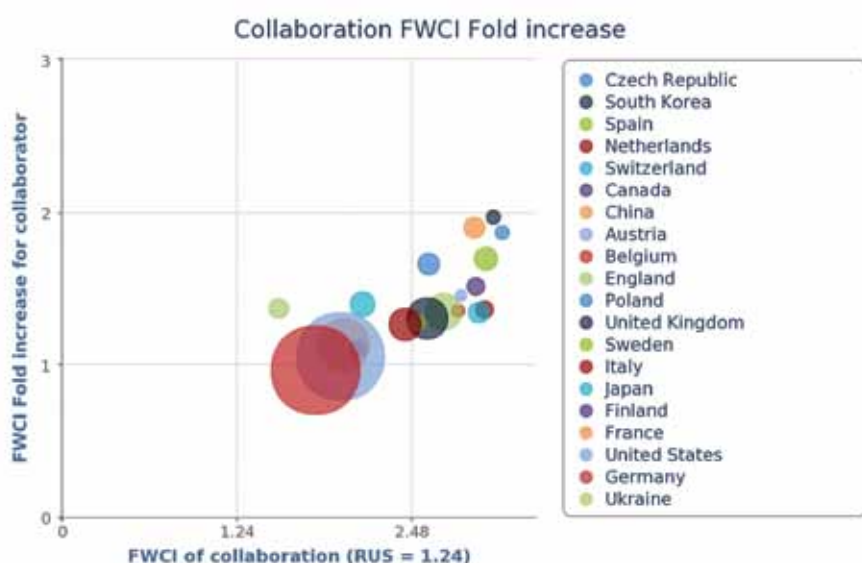


Рис.3. Сравнительная динамика индекса FWCI для России (визуализация)

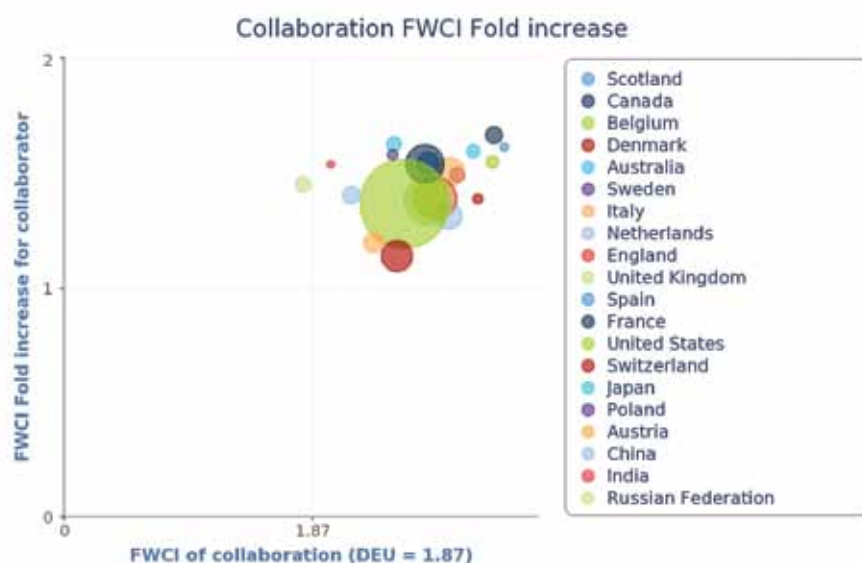


Рис.4. Сравнительная динамика индекса FWCI для Германии (визуализация)

значения FWCI для немецких работ, написанных в соавторстве, которое равно 1,87.

Возможности компаративного и кросс-анализа по различным показателям Scopus практически безграничны, и, учитывая ограничение объема публикации в Вестнике РФФИ, мы рекомендуем заинтересовавшимся читателям обратиться к страницам отчетов, приведенных в разделе «Использованные материалы», или связаться с автором для получения дополнительных комментариев.

Завершая этот краткий обзор, хотелось бы отметить, что данные Scopus, взятые для проекта анализа конкурентоспособности науки Великобритании, в приложении к России вполне коррелируют с данными РФФИ. Это позволяет с надеждой смотреть на дальнейшие совместные проекты Elsevier и РФФИ

по синхронизации научных метаданных российского и иностранного происхождения и использовать подобные аналитические выкладки, проведенные в различных «срезах», для поддержки принятия обоснованных решений в сфере финансирования науки и технологий и определения текущих и будущих тенденций развития в среднесрочной и долгосрочной перспективе.

И.А. Осипов,
*PhD. Управляющий директор
Elsevier в России*

Литература ●

1. Fowler, Nick

2014. Research as a driver of economic growth. Public Presentation, Warsaw, Jan 30, 2014.

2. Elsevier

2013. International Comparative Performance of the UK Research Base – 2013. A report prepared by Elsevier for the UK's Department of Business, Innovation, and Skills (BIS). Publisher: Elsevier. Internet: www.bis.gov.uk.

3. Kamalski J., Plume A.

2013. Comparative Benchmarking of European and US Research Collaboration and Research Mobility. A report prepared in collaboration between Science Europe and Elsevier's SciVal Analytics. Publisher: Elsevier.

Сотрудничество фондов фундаментальных исследований Украины и России: взгляд с украинской стороны на результаты проведенных конкурсов

Официальным началом международного сотрудничества Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (ГФФИ) и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) можно считать 27 мая 2008 г. – дату подписания соглашения о сотрудничестве между фондами. В сентябре 2008 г. был объявлен первый совместный конкурс проектов фундаментальных исследований ГФФИ Украины и РФФИ, с последующим их выполнением в 2009–2010 гг. Согласно соглашению о сотрудничестве проекты совместных конкурсов ГФФИ Украины и РФФИ обязательно оцениваются экспертами с обеих сторон, что способствует повышению качества экспертной процедуры отбора и оценки приоритетных научно-технических разработок.

Всего было проведено три совместных конкурса, на которые с украинской стороны было подано 1345 заявки, победителями стали 288 проектов. Это наивысший показатель среди всех конкурсов, проведенных ГФФИ за более чем двадцатилетнюю историю его существования, что свидетельствует о сохранении тесных научных контактов между учеными России и Украины.

Конкурс проводится по семи научным направлениям: физика и астрономия; биология и медицина; научные основы перспективных технологий; наука о земле и проблемы окружающей среды; химия; математика, механика и информатика; наука о человеке и обществе. Традиционно по количеству как поданных проектов, так и проектов-победителей, лидирует физика и астрономия – в среднем по всем конкурсам удельный вес проектов данного направления составил 25,1% поданных и 28,8% проектов-победителей. На втором и третьем месте с небольшим отрывом идут такие направления как: биология и

медицинские науки (соответственно 19,1% и 16,3%) и научные основы перспективных технологий (17,0% и 17,7%). Следует отметить, что распределение проектов-победителей по направлениям в среднем соответствует аналогичному распределению поданных проектов (рис. 1).

Несмотря на многочисленные призывы, звучащие в Украине на разных уровнях управления наукой касательно реформирования и даже ликвидации Национальной академии наук Украины и передачи функции проведения исследований высшим учебным заведениям, данные таблицы 1 свидетельствуют о том, что, несмотря на увеличение количества поданных заявок со стороны вузов Украины, их удельный вес среди проектов-победителей наоборот снижается. Это еще раз подтверждает высокий потенциал украинской академической науки в проведении фундаментальных исследований.

По результатам выполнения первого и второго конкурсов украинскими учеными было опубликовано более 1500 публикаций, среди которых 61 монография и 860 статей в периодических изданиях (таблица 2). Интересный факт: если лидерство по количеству опубликованных монографий удерживает направление «Наука о человеке и обществе», то по количеству статей лидерство принадлежит проектам направления «Физика и астрономия».

Среди опубликованных монографий хотелось бы отметить совместную работу украинских и российских ученых А.Р. Гачкевича (Институт прикладных проблем механики и математики им. Я.С. Подстригача НАН Украины), Р.С. Мусия (Национальный университет «Львовская политехни-



Рис. 1. Распределение проектов-победителей и поданных проектов по направлениям по результатам трех совместных конкурсов ГФФИ и РФФИ (составлено по данным ГФФИУ)

Ведомственное подчинение организаций-исполнителей	Первый конкурс (2009–2010 гг.)		Второй конкурс (2011–2012 гг.)		Третий конкурс (2013–2014 гг.)	
	Поданные проекты, %	Проекты-победители, %	Поданные проекты, %	Проекты-победители, %	Поданные проекты, %	Проекты-победители, %
Национальная академия наук Украины	61,6	67,4	57,8	72,9	58,8	79,4
Министерство образования и науки Украины	29,2	26,3	32,8	18,8	34,8	16,5
Другие ведомства	9,2	6,3	9,5	8,3	6,5	4,1

Табл.1. Ведомственное распределение проектов-участников совместных украино-российских проектов с украинской стороны

ка»), Д.В. Тарлаковского (Московский авиационный университет) «Термомеханика неферромагнитных электропроводных тел под действием импульсных электромагнитных полей с модуляцией амплитуды», изданную в 2011 г. во Львове. Исследования проводились в рамках совместного украино-российского проекта «Моделирование и исследование физикомеханических процессов в телах с примесями при условии нестационарных действий разной физической природы» в 2011–2012 гг.

Направление	Первый конкурс (2009–2010 гг.)			Второй конкурс (2011–2012 гг.)		
	Всего публик.	в том числе		Всего публик.	в том числе	
		монографии	статьи в период. изданиях		монографии	статьи в период. изданиях
Математика, механика и информатика	109	5	54	84	5	51
Физика и астрономия	197	3	130	265	4	162
Химия	83		46	107	-	58
Биология и медицина	88	3	50	80	2	40
Науки о человеке и обществе	133	20	43	27	13	9
Науки о Земле и проблемы окружающей среды	71		36	51	-	33
Научные основы перспективных технологий	127	4	83	133	2	65
Всего	808	35	442	747	26	418

Табл.2. Распределение публикаций, опубликованных украинскими учеными по результатам выполнения первого и второго совместных конкурсов ГФФИ-РФФИ

Одним из направлений аналитико-поисковых исследований, проводимых ГФФИ, являются наукометрические исследования, проводимые по результатам успешно выполненных конкурсных проектов. В результате анализа публикационной активности проектов, выполненных в рамках второго совместного конкурса ГФФИ и РФФИ, было определено, что наибольшее количество публикаций украинскими учеными было размещено в международных изданиях «Acta Crystallographica (Section E)» – 14 публикаций и в издании «Physical Review B» – 10 публикаций. Наибольшее число публикаций в списке украинских научных изданий принадлежит журналам «Украинский физический журнал» – 11 публикаций и «Минералогический журнал» – 7 публикаций. В таблице 3 представлен список лидеров среди украинских научных институтов, чьи проекты разместили наибольшее количество публикаций по результатам выполнения проектов второго совместного конкурса ГФФИ–РФФИ.

Если же говорить о проектах-лидерах, то по результатам второго совместного конкурса ГФФИУ–РФФИ ими стали (табл. 4).

Несмотря на фундаментальную направленность исследований, часть полученных результатов имеют практическую составляющую, о чем свидетельствуют около 20 патентов, полученных исполнителями совместных украинско-российских проектов по результатам первого и второго конкурсов. Среди них имеются и совместные патенты, полученные учеными как в России, так и в Украине. Например, патент на «Способ ингибирования активности фермента РНК-полимераз», полученный совместно группой российских и украинских ученых на территории Российской Федерации в 2012 г. Исследования проводились в рамках проекта «Клатрохелаты переходных металлов как ингибиторы некоторых ферментов системы биосинтеза нуклеиновых кислот и потенциальные про-

тивоопухолевые и противовирусные препараты» (организации-исполнители: Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины, Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН, руководители: И.Я. Дубей, Я.З. Волошин). Заслуживает внимания и совместный патент на «Способ получения ультратонких пластинчатых частиц гексагональных ферритов», полученный уже на территории Украины в 2010 г. Данный патент стал результатом исследований, проводимых в рамках совместного украино-российского проекта «Физико-технологические принципы создания биосовместимых магнитных наночастиц для инновационных медико-биологических методик» (организации-исполнители: Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, руководители: Л.П. Ольховик, А.С. Камзин).

Государственным фондом фундаментальных исследований Украины проводится постоянная работа по формированию и популяризации аннотационных сборников завершенных научно-исследовательских проектов, выполненных при финансовой поддержке ГФФИ, которые по самооценкам авторов, исполнителей и экспертным оценкам членов Совета Фонда доведены до определенного уровня практического использования, то есть, могут рассматриваться как инновационно-ориентированные. В 2013 г. был подготовлен третий выпуск аннотационных сборников, в который вошли 9 проектов, выполненных в рамках второго совместного конкурса ГФФИ и РФФИ, среди них (табл. 5).

Говоря о сотрудничестве фондов фундаментальных исследований Украины и России, следует отметить также совместный конкурс, проводимый нашими странами совместно с Беларусью. Данный конкурс, в котором могут принимать участие научные коллективы Черниговской, Брянской и Гомельской областей, посвящен экологической, а именно

Название организации	Количество публикаций
Публикации в международных изданиях	
Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины	17
Национальный университет имени Тараса Шевченко	12
Институт теоретической физики Национального НЦ	12
«Харьковский физико-технический институт»	
Публикации в украинских изданиях	
Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины	8
Институт математики НАН Украины	7
Институт физики НАН Украины	6

Табл.3. Распределение по институтам публикаций, выполненных по результатам проектов второго совместного конкурса ГФФИ-РФФИ

№ п/п	Название проекта	Организации-исполнители	Руководители	Количество публикаций		
				всего	в том числе	
					статьи в период. изданиях	монографии
1	Синтез новых фотонных композиционных материалов с металлическими наночастицами на основе халькогенидных стеклоподобных полупроводников	Дрогобычский государственный педагогический университет им. И. Франка	Кавецкий Тарас Степанович	34	15	1
		Казанский физико-технический институт РАН	Степанов Андрей Львович			
2	Применение методов теории струн и теории поля при изучении нелинейных явлений в низкоразмерных системах	Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины	Загородний Анатолий Глебович	27	27	
		Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И.Алиханова	Морозов Алексей Юрьевич			
3	Фазовые соотношения в оксидных наноразмерных системах $ZrO_2-LnO_n-Al_2O_3$ и функциональные материалы на их основе	Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины	Андриевская Елена Ростиславовна	25	7	1
		Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН	Гусаров Виктор Владимирович			

Табл.4. Лидирующие проекты второго совместного конкурса ГФФИ-РФФИ

чернобыльской тематике. Таких конкурсов, начиная с 2009 г., было проведено уже три, на них было подано около 40 заявок, а победителями стали 14 проектов. Несмотря на сравнительно небольшие масштабы этого конкурса, он является ярким примером определения наиболее острых совместных проблем и приоритетов для наших стран. Результатом выполнения проектов первых двух конкурсов с украинской стороны стали 122 публикации, среди которых 20 монографий и более 60 публикаций в периодических изданиях. Сегодня продолжается выполнение проектов третьего совместного конкурса.

Таким образом, подводя итоги, можно еще раз отметить, что ученых России и Украины связывает многолетняя научная дружба, в результате которой уда-

№ п/п	Название проекта	Организации-исполнители	Руководители
1	Разработка индексов и индикаторов постоянного развития регионов России и Украины на основе комбинированного использования причинно-следственных и вероятностных семантик	НТУ Украины «КПИ»	Згуровський М.З.
		Московский Государственный университет им. М.Ломоносова	Тикунов В.С.
2	Фокусирование интенсивных пучков негативно заряженных частиц электростатической плазменной линзой	Институт физики НАН раины	Гончаров А. А.
		Институт сильноточной электроники СО РАН	Окс Е.М.
3	Фазовые соотношения в оксидных наноразмерных системах ZrO_2 - $LnOn-Al_2O_3$ и функциональные материалы на их основе	Институт цинтилляционных материалов НАН Украины	Гектин А.В.
		Учреждение Российской академии наук Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения РАН	Бондарь А.Е.
4	Создание наноструктурных каликсареновых рецепторов для высокоселективного распознавания и связывания органических молекул в газовой фазе и растворах	Институт органической химии НАН Украины	Кальченко О. И.
		Казанский федеральный университет	Горбачук В.В.
5	Новые биомиметические катализаторы расщепления макроэргических РО и CN связей на основе модельных координационных соединений	Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко	Фрицкий И. О.
		Санкт-Петербургский государственный университет	Кукушкин В.Ю.

Табл.5. Проекты, вошедшие в третий аннотационный сборник завершенных научно-исследовательских проектов, выполненных при финансовой поддержке ГФФИ

ется получить не только серьезные фундаментальные результаты, но и практические наработки, которые могут быть использованы для интенсификации экономического развития наших стран. К сожалению, 2014 г. был ознаменован в Украине значительным сокращением бюджетного финансирования фундаментальных исследований, что, увы, не сможет не отразиться на дальнейшем сотрудничестве наших ученых.

В.Б. Андрущенко
ведущий научный сотрудник, Государственного фонда фундаментальных исследований Украины

Б.Р. Кияк
кандидат физико-математических
наук, доктор экономических наук,
директор Государственного фонда
фундаментальных исследований
Украины

О.В. Красовская
кандидат экономических наук,
заместитель директора, Государ-
ственного фонда фундаментальных
исследований Украины

Развитие научного сотрудничества между Индией и Россией

Индийское и российское руководство всегда признавало ключевую роль, которую научно-технические исследования и инновации играют в развитии государства и нации. Лидеры двух стран также признавали необходимость и важность обмена ресурсами: как человеческими, так и финансовыми – для ускорения процесса создания новых знаний и разработки новых технологий. На этом фоне, учитывая сильные стороны друг друга и имеющийся потенциал для сотрудничества, оба государства содействовали налаживанию разнообразных двусторонних связей и межправительственных механизмов в целях поддержки и укрепления взаимодействия во всех сферах науки и техники и на всех уровнях: от выдвижения идей до разработки и коммерциализации технологий.

Сотрудничество началось с подписания Научно-технического соглашения между Индией и СССР в 1972 г. и было подкреплено советско-индийской Комплексной долгосрочной программной научно-технического сотрудничества (КДП НТС), запущенной в 1987 г. на высшем уровне с участием Раджива Ганди, который в те годы занимал пост премьер-министра, и советского президента Михаила Горбачева. В 1992 г., поскольку Россия стала правопреемником СССР, КДП НТС превратилась в российско-индийскую программу. Руководство программой осуществлялось совместно Департаментом науки и технологий (ДНТ) правительства Индии и Академией наук СССР, позднее сменившей название на Российскую академию наук (РАН), при поддержке заинтересованных научных министерств и ведомств. В рамках программы финансировались совместные проекты и семинары, происходил обмен визитами и научными делегациями. КДП НТС стала флагманской программой в научно-технических взаимоотношениях между двумя странами, и ее результатом явилось создание девяти совместных исследовательских центров в области вакцинации, порошковой металлургии, биомедицины, биотехнологий, газовых гидратов, сейсмологии, цветных металлов, суперкомпьютерных вычислений и древнеиндийской медицины; организация Российско-индийского научно-технического центра с филиалами в Индии и России с целью содействия двусторонней передаче технологий; выдвижение инновационных идей и разработка наукоемкой продукции и высокотехнологичных процессов благодаря успешной реализации более 500 совместных

научно-исследовательских проектов и проведению сотен двусторонних семинаров, выставок и визитов. В то время как с индийской стороны в программе участвовали исследователи, представлявшие все научные и академические учреждения Индии, с российской стороны участие ограничивалось в основном институтами РАН.

С целью дальнейшего усиления сотрудничества в области науки и техники и привлечения смежных министерств и организаций двух стран в 1994 г. была организована Российско-индийская рабочая группа по научно-техническому сотрудничеству (РИРГ НТС) под эгидой Российско-индийской межправительственной комиссии (РИМК). Научно-техническая рабочая группа, осуществляющая деятельность под руководством ДНТ Индии и Министерства образования и науки России, является одной из самых активных рабочих групп в рамках РИМК. Еще одна программа, направленная на обмен знаниями и учеными, была запущена в 2001 г. при участии Национальной академии наук Индии и Российской академии наук.

Регулярное дружеское взаимодействие между ведущими учеными двух стран послужило стимулом к разработке и внедрению новых механизмов на основе оценки существующих взаимоотношений с целью максимального использования потенциала для сотрудничества. Несмотря на то, что вышеперечисленные совместные программы позволили наладить связи в рамках отдельных проектов в сфере как фундаментальных, так и прикладных исследований, взаимодействие с российской стороны в основном ограничивалось институтами Российской академии наук. Кроме того,

Запуск и первые этапы реализации Программы сотрудничества ДНТ-РФФИ

- математику;
- механику и информатику;
- физику и астрономию;
- химию и материаловедение;
- биологию и медицинские науки;
- науки о земле;
- телекоммуникации и компьютерные науки;
- фундаментальные исследования в области технических наук.

каждой стороны – в рупиях индийского партнера в лице ДНТ и в рублях от российского партнера в лице РФФИ, для покрытия стоимости двусторонних визитов, приобретения расходных материалов и предметов снабжения. ДНТ и РФФИ определяют приоритетные направления, после чего по ним ежегодно объявляется конкурс на проведение совместных исследовательских проектов.

На сегодняшний день было объявлено семь совместных конкурсов. Реакция на программу оказалась очень обнадеживающей. Благодаря более широкому доступу и открытым подходам, а также гарантированному и своевременному финансированию, программа стала очень популярной в научных сообществах двух стран. В первые годы, в основном в 2008–2011 гг., в рамках программы в Индии и России было организовано 20 совместных семинаров и конференций, заложивших основу для взаимодействия между исследователями с обеих сторон, что позволило наладить эффективные связи и выявить направления и темы исследований, представляющие взаимный интерес.

По состоянию на март 2014 г. было утверждено всего 182 совместных проекта, из которых 136 успешно завершились. По их результатам было опубликовано 1190 совместных работ, что в среднем составляет 11,6 работы на проект. На сегодняшний день продолжается реализация 46 совместных научно-исследовательских проектов. Из 182 поддерживаемых проектов 52 относятся к области физики и астрономии, 35 – к химии и материаловедению, 26 – к биологии и медицине; по 21 – к области наук о Земле, математики, механики и информатики; 16 – к фундаментальным исследованиям в области технических наук; и 11 проектов – к телекоммуникациям и компьютерным наукам. На нижеприведенном *рис. 1* показано распределение 182 поддерживаемых проектов по годам и направлениям. Эти проекты позволили успешно наладить связи между 79 институтами, расположенными в 42 городах на территории всей Индии, и 94 институтами из 25 российских городов, как показано на *рис. 2* и *рис. 3*. С российской стороны тремя наиболее активными организациями оказались Московский государственный университет, на счету которого 17 проектов, Санкт-Петербургский государственный университет и Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН (каждый реализовал по 7 проектов), а также Специальная астрофизическая обсерватория РАН (6 проектов). С индийской стороны наибольшую активность проявили Индийский тех-

182 Joint Projects supported during 2008-2014

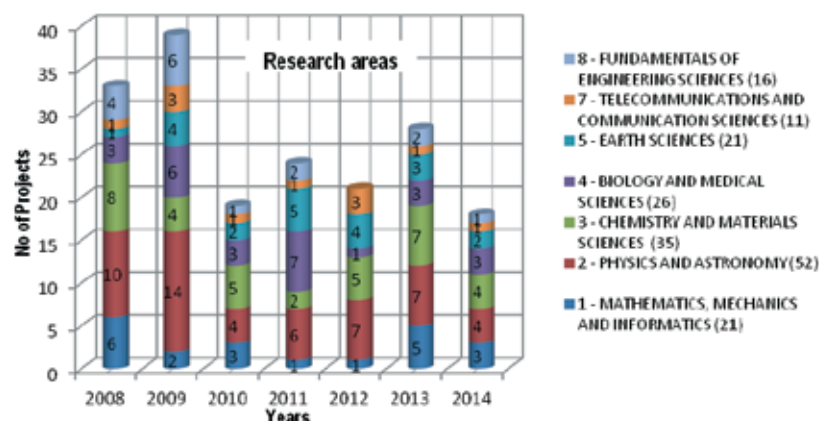


Рис.1.
Распределение поддерживаемых проектов по годам и направлениям

79 Institutes located in 42 cities across India networked

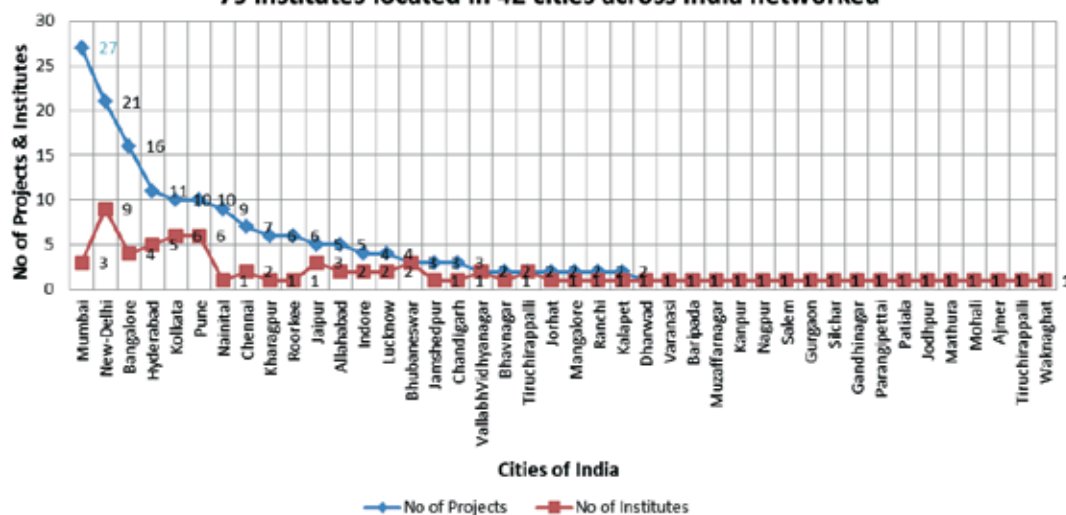


Рис.2. Города и научные учреждения Индии, между которыми были налажены связи в рамках совместных проектов

94 institutes located in 25 cities across Russia

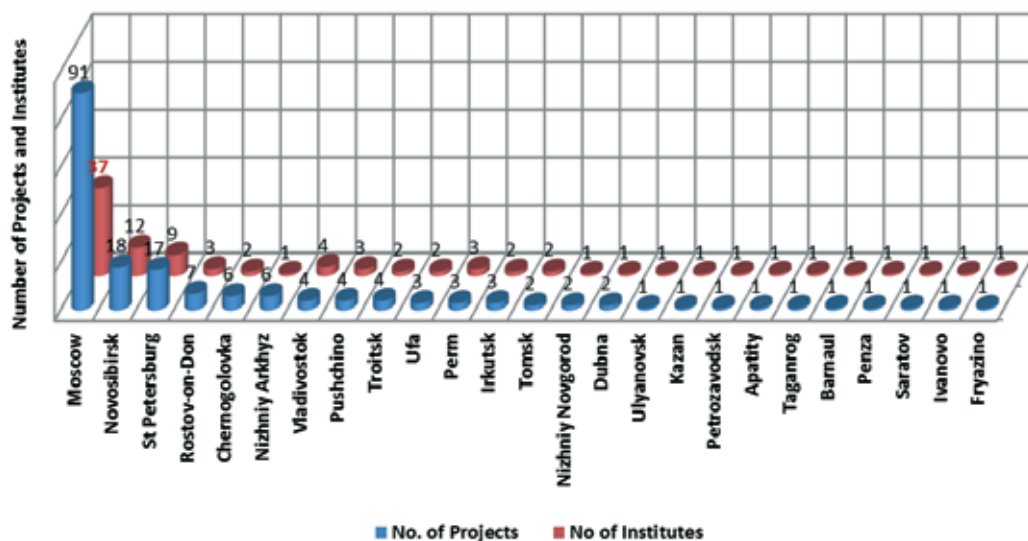


Рис.3. Города и научные учреждения России, между которыми были налажены связи в рамках совместных проектов

Перспективы развития

Достоем упоминания тот факт, что в 2012 г. научные министерства Индии и России подписали Меморандум о сотрудничестве в области науки, технологий и инноваций, предусматривающий реализацию совместных научно-исследовательских проектов и проведение конференций в рамках отдельных договоренностей о сотрудничестве между российскими и индийскими организациями. Данная инициатива ориентирована в первую очередь на совместные исследования по направлениям прикладных наук, имеющим непосредственное значение для общества, окружающей среды

Еще один механизм, который обсуждается на данный момент между ДНТ и РФФИ, предусматривает обмен молодыми учеными для проведения исследований силами кандидатов наук в научно-академических учреждениях двух стран, что поможет заложить основу для долгосрочного сотрудничества в будущем.

- организация тематических виртуальных институтов/центров передового опыта в сфере естественных наук;
- совместные крупномасштабные эксперименты;
- внедрение технологических элементов во все сферы, где для этого имеются предпосылки, например, в область солнечной энергетики, нано- и биомедицинских наук, ядерной физики и физики элементарных частиц.

Прошедшие годы характеризовались устойчивым научно-техническим сотрудничеством между Индией и Россией, не зависевшим от происходивших перемен, чему способствовали отличные двусторонние отношения между странами, налаженные связи между научными кругами и готовность адаптироваться с целью максимального раскрытия потенциала для сотрудничества. Одной из инициатив, направленных на укрепление и расширение взаимодействия между двумя государствами, стала Программа сотрудничества между ДНТ и РФФИ в области фундаментальных наук. Эта программа

успешно объединила сотни исследователей и учреждений двух стран и принесла существенные научные результаты, свидетельством которых стала публикация около 1200 совместных работ. Теперь этот успех необходимо развивать, чтобы извлечь из него максимальную выгоду. Обе стороны готовы расширять круг задач и усиливать поддержку путем запуска междисциплинарных проектов с увеличенным финансированием и применением нисходящего подхода расстановки приоритетов.

Текущее состояние сотрудничества создает обнадеживающую атмосферу. Возможно, пришло время

рассмотреть и запустить более масштабные и долгосрочные программы, отвечающие духу традиционно прочной российско-индийской дружбы и служащие интересам научных сообществ обеих стран.

*Доктор Рама Свами Бансал
(Rama Swami Bansal),*

*советник по научно-техническим
вопросам посольства Индии в Москве*

Бюро CNRS (НЦНИ) в Москве, отметившее свое двадцатилетие в 2011 г., сотрудничает с РФФИ довольно давно. Первое партнерское соглашение, заключенное в 1996 г., открыло путь к полноценному сотрудничеству, основные положения которого были закреплены в договоре, подписанном 6 марта 2003 г. в Париже между генеральным директором НЦНИ Женеви́ев Берже и председателем совета РФФИ Михаилом Алфимовым. Сотрудничество было основано на общих партнерских принципах, что подразумевало оценку проектов обеими сторонами, совместные решения и паритет в распределении финансирования.

В рамках сотрудничества между НЦНИ и РФФИ первостепенное значение уделяется смешанным кооперативным структурам, которые позволят российским и французским ученым совместно работать в адекватных правовых и административных условиях. Среди ученых эти структуры известны под названиями PICS, LIA, GDRI и UMI.

PICS (Programme International de Coopération Scientifique – Международная программа научного сотрудничества) – программа длительностью в 3 года без возможности возобновления, являющаяся результатом действующего сотрудничества с зарубежной научной группой, с которой уже существуют совместные публикации. Реализация PICS возможна после положительной оценки проекта научными департаментами НЦНИ и зарубежных организаций.

LIA (Laboratoire International Associé – Международная ассоциированная лаборатория) – виртуальная лаборатория «без стен», без юридической принадлежности. Она объединяет команду из двух или трех лабораторий, принадлежащих НЦНИ, и организации из одной или двух Европейских стран. Эти лаборатории объединяются на период длительностью 4 года, с возможностью однократного возобновления, а научный проект осуществляется при обоюдном задействовании научных кадров и материальных ресурсов.

GDRI (Groupeement de Recherche International – Международное научное объединение) – структура без юридической принадлежности, объединяющая исследования государственных или частных лабораторий на период длительностью 4 года, с возможностью однократного возобновления. GDRI включает несколько лабораторий из двух или более стран для научного сотрудничества по конкретной тематике.

UMI (Unité Mixte Internationale – Международная совместная лаборатория) – самый прогрессивный формат научного сотрудничества. Он предполагает оперативную научную структуру, в которой в одной и той же лаборатории могут работать как прикрепленные к ней сотрудники НЦНИ, так и сотрудники из других стран. В России лабораторией в формате UMI является лаборатория математики им. Ж.-В. Понселе. Во главе такой лаборатории стоит директор, назначенный совместным решением НЦНИ и зарубежного института.

В 2013 г. НЦНИ и РФФИ совместно поддерживали 18 Международных ассоциированных лабораторий и 16 Международных научных объединений. Среди наук особенно сильно представлена физика (12 лабораторий и научных групп), за которой далее следуют наука о Вселенной, химия и биология.

Конкурсная заявка на трехлетнюю Международную программу научного сотрудничества проводится ежегодно с 1997 г., позволяя реализовать 20 проектов в большинстве научных дисциплин. Формат такой заявки хорошо зарекомендовал себя в научных кругах обеих стран, представляющих к участию в среднем 50 проектов каждый год.

Совместная работа французских и российских научных групп при поддержке НЦНИ и РФФИ базируется не только в Москве, но и во многих других российских городах. Например, Сибирь, простирающаяся от степей до полярной тундры и имеющая несколько крупных научных и образовательных учреждений, является центром значимых исследований о климате и окружающей среде. Сразу несколько франко-российских структур проявляют интерес к этим исследованиям: Международная ассоциированная лаборатория YAK занимается изучением геохимического цикла углерода и озона в Евразии на основе измерений в воздушном пространстве; научная группа CARWETSIB проводит исследования по био- и геохимии углеродов заболоченных территорий в Западной Сибири; интерес научной группы SAMIA составляет спектроскопия поглощения молекул в атмосфере; Международная ассоциированная лаборатория COSIE занимается изучением долгосрочных взаимодействий человека и окружающей среды в Восточной Сибири.

Необходимо также упомянуть успешное сотрудничество в области

физики, достижения в которой являются одними из главных достижений российской науки. Многие группы из лабораторий НЦНИ в институтах физики, ядерной физики, физики частиц или технических наук и систем тесно сотрудничают с передовыми российскими организациями в рамках структур, поддерживаемых РФФИ: помимо двух крупных институтов им. Прохорова и им. Лебедева Российской Академии Наук в Москве, представленных в нескольких лабораториях и научных группах, группы НЦНИ также работают с престижным Физико-техническим институтом им. Иоффе в Санкт-Петербурге, научные интересы которого лежат в области наноструктур и полупроводниковых соединений. Физика лазеров и оптической информатики является предметом плодотворного сотрудничества с Институтом лазерной физики в Новосибирске, тогда как интересы НЦНИ в области сверхсильных световых полей выражены сотрудничеством с Институтом прикладной физики в Нижнем Новгороде. Также можно выделить несколько совместных проектов в области теоретической физики с Институтом Ландау в Черноголовке, или в области ядерной физики с Научным центром Курчатова в Москве и с Объединенным институтом ядерных исследований в Дубне.

*Мишель Тарарин, PhD,
директор Московского бюро Национального центра
научных исследований Франции*

Российско-германский научный colloquium в Москве

Коришун Ю.М.

Летом прошлого года в Москве в Российской академии наук (РАН¹) под эгидой Института всеобщей истории (ИВИ) РАН и Института современной истории (ИСИ) (Мюнхен-Берлин, Федеративная Республика Германия (ФРГ)), при поддержке Министерства иностранных дел (МИД) Российской Федерации (РФ), Министерства культуры РФ² и Российского фонда фундаментальных исследований (номер гранта 13-06-06011г) состоялось XVI заседание Совместной комиссии по изучению новейшей истории российско-германских отношений и в его рамках научный colloquium «От войны к революциям: общественно-политическое развитие России и Германии, 1914–1919 гг.».

В мероприятии приняли участие российские и германские историки, дипломаты, преподаватели вузов, представители российских органов государственного управления, отечественных научных и общественных фондов. Вечером 4 июля в Культурном центре Управления по обслуживанию дипломатического корпуса при МИД РФ состоялся прием участников коллоквиума и заседания Комиссии от имени МИД РФ.

Совместная комиссия по изучению новейшей истории российско-германских отношений (Комиссия) была создана в августе 1997 г. после обмена нотами между правительствами РФ и ФРГ³. У истоков формирования российской части Комиссии стояли МИД РФ, РАН, Федеральная архивная служба⁴ России (Росархив), германской части Комиссии – Министерство внутренних дел (МВД) ФРГ и МИД ФРГ.⁵ Главная цель Комиссии состоит в содействии российско-германского научного сотрудничества в области исто-

рических исследований улучшению российско-германских отношений в целом⁶.

В Комиссию входят руководители государственных архивных ведомств России и Германии, архивов министерств иностранных дел обеих стран, архивных подразделений Федеральной службы безопасности России и бывшей Службы государственной безопасности ГДР, а также ученые-историки РАН и университетов России и Германии. Сопредседателями российской и германской частей Комиссии являются директор ИВИ РАН академик А.О. Чубарьян и доктор исторических наук профессор Х. Мёллер⁷.

Комиссия ежегодно проводит поочередно в России и Германии свои пленарные заседания, где подводятся итоги работы по реализации научно-исследовательских проектов, курируемых Комиссией. Одновременно в программы заседаний Комиссии неизменно включаются коллоквиумы или конференции по одной из наиболее актуальных проблем истории российско-германских отношений в XX в. Материалы коллоквиумов и конференций в рамках

¹ В «Президентском зале» Главного здания РАН (Ленинский проспект, д. 32а).

² Министерство культуры РФ является базовым координатором в рамках правительственного Оргкомитета (учрежден в марте 2013 г.) по подготовке юбилейных мероприятий 2013-2014 гг., связанных со столетием начала Первой мировой войны.

³ Первоначальная договоренность об образовании Комиссии была достигнута в мае 1994 г. между Президентом РФ Б.Н. Ельциным и Федеральным канцлером ФРГ Х. Колем (это прописано в тексте упомянутой ноты).

⁴ В настоящее время Федеральное архивное агентство (находится в ведении Министерства культуры РФ).

⁵ С 1 февраля 2014 г. германская часть Комиссии переподчинена Уполномоченному Правительства ФРГ по делам культуры и средств массовой информации.

В этой связи представляется необходимым назвать работы, вышедшие с грифом Комиссии (публикации архивных документов, научно-справочные издания, монографии): Политика Советской военной администрации в Германии в области культуры, науки и образования: цели, методы, результаты. 1945-1949 гг. Сборник документов. Отв. ред. Я. Фойцик, Н.П. Тимофеева. М., «Росспэн», 2006, 975 с. (книга (также с грифом Комиссии) издана в ФРГ в 2005 г.); Советская военная администрация в Германии. 1945-1949. Справочник. Отв. ред. Я. Фойцик, Т.В. Царевская-Дьякина, А.В. Доронин. М., «Росспэн», 2009, 1031 с. (книга (также с грифом Комиссии) издана в ФРГ в 2009 г.); Томас Л.Я. Жизнь Г.В. Чичерина. М., «Собрание», 2010, 280 с. В последние годы Комиссия активно участвовала в реализации следующих проектов: 1) «Предатель – ты, Сталин!». Коминтерн и коммунистические партии в начале Второй мировой войны (1939-1941 гг.): утраченная солидарность левых сил. Сборник документов. Отв. ред. Б. Баберляйн. М., «Росспэн», 2011, 679 с.; 2) подготовка и издание четвертого тома (СССР и германский вопрос. 1941-1949: Документы из российских архивов. В 4-х т. Т. IV: 18 июня 1948 г. – 5 ноября 1949 г. Отв. ред. А.М. Филитов, Й. Лауфер. М., «Международные отношения», 2012, 775 с.) документов серии «СССР и германский вопрос, 1941-1949 гг.» (исполнителями по первым трем томам (1996, 2000, 2003 годы печати), а также названному четвертому тому являлись МИД РФ и Центр изучения новейшей истории в Потсдаме).

⁷ В 1989-1992 гг. директор Германского исторического института в Париже, в 1992-2011 гг. директор ИСИ, в настоящее время профессор Университета им. Людвиг Максимилиана (Мюнхен), член редакционных коллегий ряда периодических изданий («Ежеквартальник новейшей истории», «Документы внешней политики ФРГ»).

По мнению докладчиков и участников дискуссий на коллоквиуме, изучение истории Первой мировой

6 июля Министерством культуры РФ для участников мероприятия была организована экскурсия в Государственную Третьяковскую галерею.

98

**Подписано в печать 28.03.2014. Формат 60 x 90 ¹/₈.
Печ. л. 12,3. Тираж 1100 экз.**

Оригинал-макет ЗАО «ИТЦ МОЛНЕТ»
123104, г. Москва, Малый Палашевский пер., д. 6
Тел./факс: (495) 927 0198,
e-mail: info@molnet.ru
Печать ООО «ТрансАвтоматизация»
121433, г. Москва, ул. Б. Филевская, д. 41, кор.1