

# ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

2025. Т. 69. № 2

Выходит шесть номеров в год

Журнал основан в июле 1957 года

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,  
свидетельство о регистрации № 387 от 18.05.2009.

*Входит в Перечень научных изданий Республики Беларусь  
для опубликования результатов диссертационных исследований, включен в базу данных  
Российского индекса научного цитирования (РИНЦ)*

Главный редактор

**Владимир Григорьевич Гусаков**

Председатель Президиума Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

Редакционная коллегия

**В. Л. Гурский**

главный ученый секретарь Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
(заместитель главного редактора)

**А. В. Кильчевский**

заместитель Председателя Президиума Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
(заместитель главного редактора)

**С. А. Чижик**

первый заместитель Председателя Президиума Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
(заместитель главного редактора)

**Т. П. Петрович**

(ведущий редактор журнала)

**С. В. Абламейко**, Белорусский государственный университет, Республика Беларусь

**Т. И. Адуло**, Институт философии Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**В. В. Азаренко**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**О. Ю. Баранов**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**В. Г. Богдан**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**М. А. Богдасаров**, Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина, Республика Беларусь

**П. А. Витязь**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**И. Д. Вологовский**, Институт биофизики и клеточной инженерии Национальной академии наук Беларуси,  
Республика Беларусь

**А. А. Волчек**, Брестский государственный технический университет, Республика Беларусь

**С. В. Гапоненко**, Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**А. Я. Григорьев**, Институт механики металлополимерных систем имени В. А. Белого Национальной академии наук  
Беларуси, Республика Беларусь

**А. Е. Дайнеко**, Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований, Республика Беларусь

**Н. Желев**, Абергейский университет, Соединенное Королевство Великобритании и Северной Ирландии

**В. Г. Залесский**, Физико-технический институт Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

**А. И. Иванец**, Министерство образования Республики Беларусь, Республика Беларусь

- Н. С. Казак**, Национальная академия наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Н. Н. Казанский**, Институт лингвистических исследований Российской академии наук, Российская Федерация  
**И. А. Карпов**, Белорусский государственный медицинский университет, Республика Беларусь  
**С. П. Карпов**, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Российская Федерация  
**А. А. Коваленя**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Э. И. Коломиец**, Государственное научно-производственное объединение «Химический синтез и биотехнологии», Республика Беларусь  
**В. В. Лапа**, Институт почвоведения и агрохимии Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**М. Ларссон**, Университетский научный центр Алба Нова Стокгольмского университета, Королевство Швеция  
**А. П. Ласковнев**, Физико-технический институт Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**В. Г. Левашкевич**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Н. М. Литвинко**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**В. Ф. Логиннов**, Институт природопользования Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**П. С. Лопух**, Белорусский государственный университет, Республика Беларусь  
**В. К. Лукашевич**, Институт философии Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**С. А. Лысенко**, Институт природопользования Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Г. Маркрам**, Институт мозга, Центр неврологии и технологии Швейцарского федерального института технологий, Швейцарская Конфедерация  
**А. А. Махнач**, Институт геологии Научно-производственного центра по геологии, Республика Беларусь  
**В. А. Орлович**, Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**В. Н. Пармон**, Российская академия наук, Российская Федерация  
**О. Г. Пенязьков**, Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**И. Д. Рашаль**, Институт биологии Латвийского университета, Латвийская Республика  
**Б. А. Ривжа**, Латвийская академия сельскохозяйственных и лесных наук, Латвийская Республика  
**В. П. Русак**, Институт языкознания имени Якуба Коласа Центра исследований белорусской культуры, языка и литературы Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**И. В. Саверченко**, Институт литературоведения имени Янки Купалы Центра исследований белорусской культуры, языка и литературы Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**В. А. Садовничий**, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Российская Федерация  
**В. Г. Сафонов**, Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Н. В. Смехович**, Институт истории Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Д. В. Тапальский**, Институт физиологии Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**А. В. Тузиков**, Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Тьяу Ван Минь**, Вьетнамская академия наук и технологий, Социалистическая Республика Вьетнам  
**С. А. Усанов**, Институт биорганической химии Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**Ю. С. Харин**, Научно-исследовательский институт прикладных проблем математики и информатики, Республика Беларусь  
**А. Цайлингер**, Австрийская академия наук, Австрийская Республика  
**И. П. Шейко**, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по животноводству, Республика Беларусь  
**А. Г. Шумилин**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь  
**С. С. Щербаков**, Президиум Национальной академии наук Беларуси, Республика Беларусь

*Адрес редакции:*

*ул. Академическая, 1, к. 119, 220072, Минск, Республика Беларусь.  
Тел.: +375 17 272-19-19; e-mail: doklady\_nanb@mail.ru  
doklady.belnauka.by*

---

ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ. 2025. Т. 69. № 2

*Выходит на русском, белорусском и английском языках*

---

Редактор **Т. П. Петрович**  
Компьютерная верстка **Н. И. Кашуба**

Сдано в набор 04.04.2025. Выпуск в свет 25.04.2025. Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Бумага офсетная. Печать цифровая.  
Усл. печ. л. 10,23 Уч.-изд. л. 11,3. Тираж 138 экз. Заказ 80.

Цена: индивидуальная подписка – 14,48 руб.; ведомственная подписка – 33,64 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий  
№ 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220084, г. Минск, Республика Беларусь.

© РУП «Издательский дом «Беларуская навука».  
Доклады НАН Беларуси, 2025

# DOKLADY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

---

2025. Vol. 69. No. 2

---

Published bimonthly

The journal has been published since July, 1957

Founder – National Academy of Sciences of Belarus

The journal is registered on May 18, 2009 by the Ministry of Information of the Republic of Belarus  
in the State Registry of Mass Media, reg. no. 387.

*The journal included in the List of Journal for Publication of the Results of Dissertation Research  
in the Republic of Belarus and in the Database of Russian Science Citation Index (RSCI)*

Editor-in-Chief

**Vladimir G. Gusakov**

Chairman of the Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Editorial Board

**Sergey A. Chizhik**

First Deputy Chairman of the Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
(Associate Editor-in-Chief)

**Vasily L. Gursky**

Chief Scientific Secretary of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
(Associate Editor-in-Chief)

**Alexander V. Kilchevsky**

Deputy Chairman of the Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
(Associate Editor-in-Chief)

**Tatiana P. Petrovich**

(Lead Editor)

**Sergey V. Ablameyko**, Belarusian State University, Republic of Belarus

**Tadeouch I. Adoulo**, Institute of Philosophy of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Vladimir V. Azarenko**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Oleg Yu. Baranov**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Vasily G. Bogdan**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Maxim A. Bogdasarov**, Brest State A. Pushkin University, Republic of Belarus

**Chau Van Minh**, Vietnam Academy of Science and Technology, Vietnam

**Alexey Ye. Dayneko**, Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research, Republic of Belarus

**Sergey V. Gaponenko**, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Andrey Ya. Grigoriev**, Institute of Mechanics of Metal-Polymeric Systems named after V. A. Bely of the National Academy  
of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Andrei I. Ivanets**, Ministry of Education of the Republic of Belarus, Republic of Belarus

**Igor A. Karpov**, Belarusian State Medical University, Republic of Belarus

**Sergey P. Karpov**, Lomonosov Moscow State University, Russian Federation

**Nikolay S. Kazak**, National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus

**Nikolay N. Kazansky**, Institute for Linguistic Studies of the Russian Academy of Sciences, Russian Federation

**Yuri S. Kharin**, Research Institute of Applied Problems of Mathematics and Informatics, Republic of Belarus

**Emilia I. Kolomiets**, State Research and Production Association “Chemical Synthesis and Biotechnology”, Republic of Belarus  
**Alexander A. Kovalenya**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Vitaly V. Lapa**, Institute for Soil Science and Agrochemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Mats Larsson**, Alba Nova University Center of the University of Stockholm, Sweden  
**Alexander P. Laskovnev**, Physical-Technical Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Vladimir G. Levashkevich**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Nataliya M. Litvinko**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Vladimir F. Loginov**, Institute for Nature Management of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Petr S. Lopukh**, Belarusian State University, Republic of Belarus  
**Vladimir K. Lukashevich**, Institute of Philosophy of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Sergey A. Lysenko**, Institute for Nature Management of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Anatoly A. Makhnach**, Institute of Geology, Republic of Belarus  
**Henry Markram**, Brain Institute, Center for Neurology and Technology of the Swiss Federal Institute of Technology, Switzerland  
**Valentin A. Orlovich**, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Valentin N. Parmon**, Russian Academy of Sciences, Russian Federation  
**Oleg G. Penyazkov**, A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Isaak D. Rasha**, Institute of Biology of the University of Latvia, Latvia  
**Baiba A. Rivza**, Latvian Academy of Agricultural and Forestry Sciences, Latvia  
**Valentina P. Rusak**, Institute of Linguistics named after Yakub Kolas of the Center for Research of Belarusian Culture, Language and Literature of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Viktor A. Sadovnichiy**, Lomonosov Moscow State University, Russian Federation  
**Vasily G. Safonov**, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Ivan V. Saverchenko**, Institute of Literary Studies named after Yanka Kupala of the Center for Research of Belarusian Culture, Language and Literature of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Sergey S. Shcherbakov**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Ivan P. Sheyko**, Scientific and Practical Center for Animal Breeding, Republic of Belarus  
**Alexander G. Shumilin**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Nikolay V. Smekhovich**, Institute of History of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Dmitry V. Tapalski**, Institute of Physiology of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Alexander V. Tuzikov**, United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Sergey A. Usanov**, Institute of Bioorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Petr A. Vityaz**, Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Aliaksandr A. Volchak**, Brest State Technical University, Republic of Belarus  
**Igor D. Volotovskiy**, Institute of Biophysics and Cell Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Vitali G. Zaleski**, Physical-Technical Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Republic of Belarus  
**Anton Zeilinger**, Austrian Academy of Sciences, Austria  
**Nikolas Zhelev**, Abertay University, United Kingdom of Great Britain and Northern Ireland

*Address of the Editorial Office:*

*1, Akademicheskaya Str., room 119, 220072, Minsk, Republic of Belarus.  
Phone: +375 17 272-19-19; e-mail: doklady\_nanb@mail.ru  
doklady.belnauka.by*

---

DOKLADY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS. 2025. Vol. 69. No. 2

*Printed in Russian, Belarusian and English languages*

---

Editor T. P. Petrovich  
Computer Imposition N. I. Kashuba

Sent for press 04.04.2025. Output 25.04.2025. Format 60×84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Offset paper.  
Digital press. Printed sheets 10.23. Publisher’s signatures 11.3. Circulation 138 copies. Order 80.

Price: individual subscription – 14.48 BYN, departmental subscription – 33.64 BYN.

Publisher and printing execution:

Republican unitary enterprise “Publishing House “Belaruskaya Navuka””.  
Certificate on the state registration of the publisher, manufacturer, distributor of printing editions  
no. 1/18 dated of August 2, 2013. License for press no. 02330/455 dated of December 30, 2013.  
40, F. Skorina Str., 220084, Minsk, Republic of Belarus.

© RUE “Publishing House “Belaruskaya Navuka””.  
Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus, 2025

## СОДЕРЖАНИЕ

### МАТЕМАТИКА

- Чернявский М. М.** Рациональные выражения для кратных корней полиномов..... 95

### ИНФОРМАТИКА

- Бегунков В. И., Ковалев М. Я.** Классификация займа с использованием алгоритма случайного леса и сравнительный анализ с другими классификаторами..... 101

### ФИЗИКА

- Пархоменко И. Н., Власукова Л. А., Зайков В. А., Комаров Ф. Ф., Камышан А. С., Жукова М. Н.** Влияние термоциклирования на оптические свойства наноструктурированных покрытий TiAlN/Cu ..... 109

### ХИМИЯ

- Шаладонова М. И., Усанов С. А.** Виртуальный скрининг и ADMET-анализ в идентификации новых ингибиторов 17,20-лиазы человека (CYP17A1) ..... 117

### БИОЛОГИЯ

- Кипень В. Н., Снытков Е. В., Михайлова М. Е., Шейко Р. И.** Анализ однонуклеотидного полиморфизма с применением технологии KASP для идентификации пород домашних свиней..... 129

- Рупасова Ж. А., Павловский Н. Б., Привалов Ф. И., Мандрик-Литвинкович М. Н., Коломиец Э. И.** Влияние биологических средств защиты и регуляции роста растений на биофлавоноидный комплекс плодов *Vaccinium corymbosum* L. (голубики высокорослой) в условиях Беларуси..... 137

### МЕДИЦИНА

- Висмонт Ф. И.** Значимость тиреоидного статуса в формировании особенностей изменения температуры тела у крыс и кроликов в зависимости от выраженности бактериальной эндотоксинемии..... 144

### ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

- Сапсалёв Д. В., Мельникова Г. Б., Толстая Т. Н., Чижик С. А.** Особенности формирования, структура и свойства Ленгмюра–Блоджетт пленок поливинилкарбазола с неорганическими наночастицами..... 150

### СОЦИАЛЬНО-ГУМАНИТАРНЫЕ НАУКИ

- Лукашевич В. К.** Принцип резонанса в контексте современного научного дискурса ..... 159

### АГРАРНЫЕ НАУКИ

- Азаренко В. В., Курилович М. И., Голдыбан В. В.** Идентификации дефектов в клубнях картофеля для автоматизации процесса их сортировки..... 168

## *CONTENTS*

### *MATHEMATICS*

- Chernyavsky M. M.** Rational expressions for multiple roots of polynomials ..... 95

### *INFORMATICS*

- Behunkou U. I., Kovalyov M. Ya.** Loan classification using random forest algorithm and comparative analysis with other classifiers ..... 101

### *PHYSICS*

- Parkhomenko I. N., Vlasukova L. A., Zaikov V. A., Komarov F. F., Kamyshan A. S., Zhukova M. N.** Effect of thermal cycles on optical properties of nanostructured coatings TiAlN/Cu ..... 109

### *CHEMISTRY*

- Shaladonova M. I., Usanov S. A.** Virtual screening and ADMET analysis in identification of new human 17,20-lyase (CYP17A1) inhibitors ..... 117

### *BIOLOGY*

- Kipen V. N., Snytkov E. V., Mikhailova M. E., Sheyko R. I.** Analysis of single nucleotide polymorphism using KASP technology for identification of domestic pigs breeds ..... 129

- Rupasova Zh. A., Pavlovsky N. B., Privalov F. I., Mandrik-Litvinkovich M. N., Kolomiets E. I.** The effect of biopreparation for plant protection and growth regulation on bioflavonoid complex of *Vaccinium corymbosum* L. (highbush blueberry) in the conditions of Belarus ..... 137

### *MEDICINE*

- Vismont F. I.** Importance of thyroid status in forming characteristics of body temperature changes in rats and rabbits depending on the severity of bacterial endotoxemia ..... 144

### *TECHNICAL SCIENCES*

- Sapsaliou D. V., Melnikova G. B., Tolstaya T. N., Chizhik S. A.** Features of formation, structure and properties of Langmuir–Blodgett films of poly(vinyl carbazole) with inorganic nanoparticles ..... 150

### *SOCIAL SCIENCES AND HUMANITIES*

- Lukashevich V. K.** The principle of resonance in the context of modern scientific discourse ..... 159

### *AGRARIAN SCIENCES*

- Azarenko V. V., Kurylovich M. I., Goldyban V. V.** Identification methods of defects in potato tubers to automate the process of their sorting ..... 168

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

**МАТЕМАТИКА**  
**MATHEMATICS**

УДК 519.622.26+512.622.25  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-95-100>

Поступило в редакцию 03.06.2024  
Received 03.06.2024

**М. М. Чернявский**

*Витебский государственный университет имени П. М. Машерова, Витебск, Республика Беларусь*

**РАЦИОНАЛЬНЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ КРАТНЫХ КОРНЕЙ ПОЛИНОМОВ**

*(Представлено членом-корреспондентом В. В. Гороховиком)*

**Аннотация.** Для многочленов  $f$ , обладающих кратными корнями, получены явные формулы для высших производных от результатов  $R(f, f^{(k)})$  ( $f^{(k)}$  – производная порядка  $k$ ). На этой базе доказаны существенно отличающиеся от известных результатов утверждения, связывающие высшие производные результатов и кратные корни.

**Ключевые слова:** корень полинома, результат, кратные корни, явные формулы

**Для цитирования.** Чернявский, М. М. Рациональные выражения для кратных корней полиномов / М. М. Чернявский // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 95–100. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-95-100>

**Mikhail M. Chernyavsky**

*Vitebsk State University named after P. M. Masherov, Vitebsk, Republic of Belarus*

**RATIONAL EXPRESSIONS FOR MULTIPLE ROOTS OF POLYNOMIALS**

*(Communicated by Corresponding Member Valentin V. Gorokhovich)*

**Abstract.** For polynomials possessing multiple roots we deduce explicit formulas for higher derivatives of resultants  $R(f, f^{(k)})$  ( $f^{(k)}$  is a derivative of order  $k$ ). On this basis a number of results linking higher derivatives of resultants and multiple roots of polynomials that differ in ideas from the well-known ones are obtained.

**Keywords:** root of a polynomial, resultant, multiple roots, exact formulas

**For citation.** Chernyavsky M. M. Rational expressions for multiple roots of polynomials. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 95–100 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-95-100>

**Введение.** Известным математическим инструментом для обнаружения общих корней пар полиномов и кратных корней полиномов являются результаты и дискриминанты. Для пары полиномов  $f$  и  $g$  их результат  $R(f, g)$  – функция от их коэффициентов. Нули результата  $R(f, g)$  соответствуют наборам коэффициентов  $f$  и  $g$  таким, что  $f$  и  $g$  имеют общий корень. В частности, если  $f$  имеет корень кратности  $s \geq 2$ , то  $R(f, f^{(k)}) = 0$ ,  $1 \leq k < s$  ( $f^{(k)}$  – производная порядка  $k$ ). При этом вычисление этого кратного корня является отдельной проблемой. Получение явных формул, выражающих значения кратных корней полиномов через коэффициенты, до конца XX в. представляло собой трудную задачу, поскольку в большинстве своем требовало объемных аналитических промежуточных вычислений, не поддававшихся ручному счету. Относительно новым подходом в данном направлении является выражение кратного корня (и определенных комбинаций кратных корней, если кратный корень не единственный) в терминах частных производных от некоторых результатов и дискриминантов.



Дискриминантом многочлена  $f(z) = a_0z^n + a_1z^{n-1} + \dots + a_n$  ( $a_0 \neq 0$ ), имеющего корни  $\{\alpha_i\}_{i=1}^n$ , называют величину

$$D(f) = a_0^{2n-2} \prod_{i>j} (\alpha_i - \alpha_j)^2.$$

Значение результата многочлена и его первой производной прямо пропорционально значению дискриминанта  $D(f)$ . А именно, имеет место соотношение

$$R(f, f') = (-1)^{n(n-1)/2} a_0 D(f). \tag{3}$$

**Алгоритмы получения точных рациональных выражений для кратных корней полиномов (известные результаты).** Известны следующие алгоритмы получения точных рациональных выражений для кратных корней полиномов на базе вычисления производных результатов и дискриминантов.

В [1] представлено следующее утверждение.

**Т е о р е м а 1** [1, р. 404]. *Если для полинома  $f(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \dots + a_n$  дискриминант  $D(f)$  равен нулю, но по крайней мере одна частная производная  $\partial D(f) / \partial a_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ) отлична от нуля, то  $f$  имеет единственный корень  $w$  кратности 2, и его можно найти из пропорции*

$$(w^n : w^{n-1} : \dots : w : 1) = \left( \frac{\partial D(f)}{\partial a_0} : \frac{\partial D(f)}{\partial a_1} : \dots : \frac{\partial D(f)}{\partial a_{n-1}} : \frac{\partial D(f)}{\partial a_n} \right). \tag{4}$$

В случае, когда исходный полином  $f(x)$  имеет хотя бы один кратный корень, все частные производные первого порядка от результата  $R(f, g)$  по коэффициентам полинома  $g(x) = f'(x)$  равны нулю (теорема 3 настоящего сообщения). В этом случае для вычисления значения кратного корня необходимо привлечение высших производных, к чему в [1] никаких предпосылок не дано.

Развитию идей из [1] по рациональному выражению кратных корней полинома посвящена [2], где ключевой является следующая

**Т е о р е м а 2** [2, теорема 1]. *Если  $s \geq 3$ , то ненулевое решение алгебраического уравнения с комплексными коэффициентами*

$$f = f(z) = z^n + a_1z^{n-1} + a_2z^{n-2} + \dots + a_{n-1}z + a_n = 0 \tag{5}$$

$z_1$  кратности  $s$  выражается через частные производные  $\partial R / \partial a_i$ , где  $R = R(f, f^{(s-1)})$  – результат многочлена и его производной порядка  $s - 1$  по формулам

$$z_1 = \frac{\partial R}{\partial a_{n-(s-2)}} : \frac{\partial R}{\partial a_{n-(s-3)}} = \frac{\partial R}{\partial a_{n-(s-3)}} : \frac{\partial R}{\partial a_{n-(s-4)}} \dots = \frac{\partial R}{\partial a_{n-2}} : \frac{\partial R}{\partial a_{n-1}} = \frac{\partial R}{\partial a_{n-1}} : \frac{\partial R}{\partial a_n}. \tag{6}$$

Если  $s = 2$ , то двукратное ненулевое решение уравнения (5)  $z_1$  выражается через производные  $\partial D / \partial a_i$  дискриминанта  $D$  по формулам

$$z_1 = \frac{\partial D}{\partial a_1} : \frac{\partial D}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial D}{\partial a_{n-2}} : \frac{\partial D}{\partial a_{n-1}} = \frac{\partial D}{\partial a_{n-1}} : \frac{\partial D}{\partial a_n}.$$

Вторая часть этой теоремы совпадает с теоремой 1 и выражением (4).

В настоящем сообщении доказан ряд существенно отличающихся от теоремы 2 результатов, связывающих высшие производные от результатов и кратные корни. Кроме того, эти результаты применяются для уточнения теоремы 2.

Полученные результаты являются естественным развитием идей, отраженных в [4].

**Кратные корни многочлена и производные результатов.** Здесь представлено основное утверждение работы.

Рассмотрим многочлен  $f(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^{n-i}$  ( $a_0 \neq 0$ ). В соответствии с (1) запишем результат многочлена  $f(z)$  и его  $k$ -й производной  $f^{(k)}(z) = \sum_{j=0}^{n-k} b_j z^{n-k-j}$  в виде

$$R(f, f^{(k)}) := R = a_0^m g_1 g_2 \dots g_{n-1} g_n = (-1)^{mn} b_0^n f_1 f_2 \dots f_{n-k}, \quad (7)$$

где

$$g_i \equiv f^{(k)}(z_i) = \sum_{j=0}^{n-k} b_j z_i^{n-k-j} \quad (i=1, 2, \dots, n) - \quad (8)$$

значение  $k$ -й производной  $f^{(k)}$  многочлена  $f$  на его  $i$ -м корне ( $z_i$ ,  $i=1, \dots, n$  – корни  $f$ );

$$f_i \equiv f(y_i) = \sum_{j=0}^n a_j y_i^{n-j} \quad (i=1, 2, \dots, n-k) - \quad (9)$$

значение многочлена  $f$  на  $i$ -м корне его  $k$ -й производной  $f^{(k)}$  ( $y_i$ ,  $i=1, \dots, n-k$  – корни  $f^{(k)}$ ).

**Т е о р е м а 3.** Пусть  $z_1 = z_2 = \dots = z_s = w$  – корень кратности, как минимум,  $s$  ( $2 \leq s < n$ ) для полинома  $f(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^{n-i}$  ( $a_0 \neq 0$ ). Тогда для результата  $R := R(f, f^{(k)})$ , где  $f^{(k)}(z) = \sum_{j=0}^{n-k} b_j z^{n-k-j}$ ,  $1 \leq k < s$ , имеют место следующие равенства:

$$\frac{\partial R}{\partial a_j} = (-1)^{(n-k)n} b_0^n w^{n-j} \prod_{i=2}^{n-k} f_i \quad (j=0, \dots, n),$$

где  $f_i$  заданы формулой (9);

2) для  $1 \leq r < s$

$$\frac{\partial^r R}{\partial b_{j_r} \dots \partial b_{j_1}} = 0 \quad (j_k = 0, 1, \dots, n-k); \quad (10)$$

3)

$$\frac{\partial^s R}{\partial b_{j_s} \dots \partial b_{j_1}} = a_0^{n-k} s! w^{s(n-k)-(j_s+\dots+j_1)} \prod_{i=s+1}^n g_i \quad (j_k = 0, 1, \dots, n-k), \quad (11)$$

где  $g_i$  заданы формулой (8).

Если  $s = n$ , т. е.  $f(z) = a_0(z-w)^n$ , то для  $r < n$  выполняется равенство (10) и

$$\frac{\partial^r R}{\partial b_{j_n} \dots \partial b_{j_1}} = a_0^{n-k} n! w^{n(n-k)-(j_n+\dots+j_1)} \quad (j_k = 0, 1, \dots, n-k).$$

**Приложения основной теоремы.** Следующее утверждение вытекает из теоремы 3 и является некоторой альтернативой теореме 1.

**Т е о р е м а 4.** Полином  $f(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^{n-i}$  ( $a_0 \neq 0$ ,  $a_n \neq 0$ ) представляется в виде

$$f(z) = a_0(z-w)^2(z-z_3)(z-z_4)\dots(z-z_{n-1})(z-z_n), \quad (12)$$

где  $z_i \neq z_j$ ,  $i \neq j$  и  $w \neq z_i$ ; тогда и только тогда, когда одновременно выполняются следующие соотношения:

1)  $R(f, f') = 0$  (либо  $D(f) = 0$  в силу (3));

2)  $\frac{\partial^2 R(f, f')}{\partial b_{n-1}^2} \neq 0$ , где  $b_j$  ( $j=0, 1, \dots, n-1$ ) – коэффициенты полинома  $g(z) = f'(z)$ .

При этом для корня  $w$  выполняются соотношения

$$\frac{\partial^2 R}{\partial b_{j_2} \partial b_{j_1}} : \frac{\partial^2 R}{\partial b_{k_2} \partial b_{k_1}} = w^{(k_2+k_1)-(j_2+j_1)} \quad (j_r, k_r = 0, 1, \dots, n-1).$$

**З а м е ч а н и е.** 1) Из выражения (11) непосредственно следует, что в случае, когда полином имеет один кратный корень кратности два (все остальные корни у него только простые), то все вторые производные от результата (7) одновременно не равны нулю, т. е. проверять справедливость соотношения (12) можно только по одной из вторых производных от результата (11), например, по  $\frac{\partial^2 R}{\partial b_{n-1}^2}$ .

2) Из равенства нулю результата от многочлена и его первой производной (что гарантирует наличие хотя бы одного кратного корня) всегда следует равенство нулю всех первых производных  $\partial R(f, f') / \partial b_j$  ( $j = 0, 1, \dots, n-1$ ) (теорема 3, равенство (10)). Поэтому проверка этих выражений не входит в число необходимых и достаточных условий выполнения соотношения (12).

Теорема 2 также является следствием теоремы 3. А именно, справедливо следующее уточнение теоремы 2.

**Т е о р е м а 5.** Если полином  $f(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^{n-i}$  ( $a_0 \neq 0$ ) представляется в виде

$$f(z) = a_0(z-w)^s(z-z_{s+1})(z-z_{s+2})\dots(z-z_{n-1})(z-z_n),$$

где  $2 \leq s < n$ ;  $w \neq z_i$  (т. е.  $w$  – корень кратности  $s$ ), то выполняются следующие соотношения:

1)  $R(f, f^{(k)}) = 0$  ( $1 \leq k < s$ );

2) для  $R = R(f, f^{(s-1)})$  вектор производных  $\left[ \frac{\partial R}{\partial a_0}, \frac{\partial R}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial R}{\partial a_n} \right]$  имеет вид

$$\left[ \frac{\partial R}{\partial a_0}, \frac{\partial R}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial R}{\partial a_n} \right] = \gamma(s, n) \prod_{i=2}^{n-s+1} f_i[w^n, w^{n-1}, \dots, w, 1], \tag{13}$$

где  $\gamma(s, n) = (-1)^{(n-s+1)n} (n(n-1) \cdot \dots \cdot (n-s+2) a_0)^n$ .

Если  $a_n \neq 0$  и все корни  $z_i$ ,  $i = s+1, \dots, n$ , имеют кратности меньше  $s$ , то все производные  $\frac{\partial R}{\partial a_j}$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ , не равны нулю; и, значит, выполняются соотношения (6).

**З а м е ч а н и е.** Формула (13) показывает, в частности, что количество искомым рациональных выражений, типа упомянутых в (6), не зависит от числа  $s$  (как в теореме 2), а определяется только степенью исходного полинома.

Следующее обобщение теоремы 4 вытекает из теоремы 3 и является некоторой альтернативой теореме 5 (теореме 2).

**Т е о р е м а 6.** Полином  $f(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^{n-i}$  ( $a \neq 0, a_n \neq 0$ ) представляется в виде

$$f(z) = a_0(z-w)^s(z-z_{s+1})(z-z_{s+2})\dots(z-z_{n-1})(z-z_n),$$

где  $2 \leq s < n$ ;  $w \neq z_i, z_i \neq z_j, i \neq j$ ; тогда и только тогда, когда одновременно выполняются следующие соотношения:

1)  $R(f, f^{(s-1)}) = 0$ ,

2)  $R(f, f^{(s)}) \neq 0$ ,

3)  $\frac{\partial^s R(f, f')}{\partial b_{n-1}^s} \neq 0$ , где  $b_j$  ( $j = 0, 1, \dots, n-1$ ) – коэффициенты полинома  $g(z) = f'(z)$ . При этом для корня  $w$  выполняются соотношения

$$\frac{\partial^s R(f, f')}{\partial b_{j_s} \dots \partial b_{j_1}} : \frac{\partial^s R(f, f')}{\partial b_{k_s} \dots \partial b_{k_1}} = w^{(k_s + \dots + k_1) - (j_s + \dots + j_1)} \quad (j_r, k_r = 0, 1, \dots, n-1).$$

**З а м е ч а н и е.** При наличии корня кратности  $s$  все результаты вида  $R(f, f^{(k)}) = 0$  автоматически при  $1 \leq k < s$ , поэтому такая проверка не входит в число необходимых и достаточных условий теоремы 6.

Условие 2) в теореме 6 является избыточным, так как в случае наличия корня кратности  $s + 1$  или выше у полинома  $f(z)$  не выполнится условие 3) (так как  $g_{s+1} = 0$ ), но, при этом, зачастую на практике на этапе «узнавания» о наивысшей степени кратности корня проверить его легче, чем условие 3) (команда для вычисления результата имеется в математических пакетах и легко реализуется в цикле перебора значений  $R(f, f^{(k)})$ ). Уже после установления числа  $s$  целесообразно проверить условие 3).

**Благодарности.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф23М-003).

**Acknowledgements.** The study was carried out with financial support from the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (project Ф23М-003).

### Список использованных источников

1. Gelfand, I. M. Discriminants, Resultants, and Multidimensional Determinants / I. M. Gelfand, M. M. Kapranov, A. V. Zelevinsky. – Boston, 1994. – 528 p. <https://doi.org/10.1007/978-0-8176-4771-1>
2. Антипова, И. А. Рациональные выражения для кратных корней алгебраических уравнений / И. А. Антипова, Е. Н. Михалкин, А. К. Цих // Математический сборник. – 2018. – Т. 209, № 10. – С. 3–30. <https://doi.org/10.4213/sm8950>
3. Курош, А. Г. Курс высшей алгебры / А. Г. Курош. – 19-е изд., стер. – СПб., 2013. – 432 с.
4. Чернявский, М. М. Модификация формул Эйткена и алгоритмы аналитического нахождения кратных корней полиномов / М. М. Чернявский, Ю. В. Трубников // Веснік Віцебскага дзяржаўнага ўніверсітэта. – 2021. – № 1 (110). – С. 13–25.

### References

1. Gelfand I. M., Kapranov M. M., Zelevinsky A. V. *Discriminants, Resultants, and Multidimensional Determinants*. Boston, 1994. 528 p. <https://doi.org/10.1007/978-0-8176-4771-1>
2. Antipova I. A., Mihalkin E. N., Tsikh A. K. Rational expressions for multiple roots of algebraic equations. *Sbornik: Mathematics*, 2018, vol. 209, no. 10, pp. 1419–1444. <https://doi.org/10.1070/sm8950>
3. Kurosh A. G. *Higher Algebra Course*. 19th ed. Saint Petersburg, 2013. 432 p. (in Russian).
4. Chernyavsky M. M., Trubnikov Yu. V. Modification of Aitken's formulas and algorithms for analytical finding of multiple roots of polynomials. *Vesnik Vitsebskaya dzyarzhavnaya universiteta = Bulletin of Vitebsk State University*, 2021, no. 1 (110), pp. 13–25 (in Russian).

### Информация об авторе

Чернявский Михаил Михайлович – ст. преподаватель. Витебский государственный университет имени П. М. Машерова (пр-т Московский, 33, 210038, Витебск, Республика Беларусь). E-mail: misha360ff@mail.ru.

### Information about the author

Chernyavsky Mikhail M. – Lecturer. Vitebsk State University named after P. M. Masherov (33, Moskovskiy Ave., 210038, Vitebsk, Republic of Belarus). E-mail: misha360ff@mail.ru.

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

## ИНФОРМАТИКА INFORMATICS

УДК 004.89  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-101-108>

Поступило в редакцию 10.02.2025  
Received 10.02.2025

**В. И. Бегунков, член-корреспондент М. Я. Ковалёв**

*Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси,  
Минск, Республика Беларусь*

### КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАЙМА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМА СЛУЧАЙНОГО ЛЕСА И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ С ДРУГИМИ КЛАССИФИКАТОРАМИ

**Аннотация.** Целью исследования является анализ использования алгоритма случайного леса для решения задачи классификации займа и проведение сравнительного анализа с результатами, полученными при использовании логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения и глубокой нейронной сети прямого распространения. В результате исследований определены лучшее максимальное количество входных показателей и лучшее количество деревьев в ансамбле при использовании алгоритма случайного леса, исследовано воздействие альтернативного разбиения данных на тренировочный и тестовый наборы на точность прогнозирования модели при использовании алгоритма случайного леса. В заключение предложена стратегия решения задачи классификации займа на основе исследованных ранее классификаторов.

**Ключевые слова:** классификация займа, скоринг, машинное обучение, алгоритм случайного леса, сравнительный анализ классификаторов

**Для цитирования.** Бегунков, В. И. Классификация займа с использованием алгоритма случайного леса и сравнительный анализ с другими классификаторами / В. И. Бегунков, М. Я. Ковалёв // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 101–108. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-101-108>

**Uladzimir I. Behunkou, Corresponding Member Mikhail Ya. Kovalyov**

*United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

### LOAN CLASSIFICATION USING RANDOM FOREST ALGORITHM AND COMPARATIVE ANALYSIS WITH OTHER CLASSIFIERS

**Abstract.** The study aims to analyze the application of the random forest algorithm in addressing the loan classification issue. Furthermore, it intends to perform a comparative analysis by juxtaposing the outcomes with those derived from logistic regression, feedforward neural network, and deep feedforward neural network models. The research determined the ideal maximum number of input indicators and the ideal number of trees in the ensemble when utilizing the random forest algorithm. Additionally, it explored the impact of alternative data partitioning into training and test sets on the accuracy of model forecasting with the random forest algorithm. In conclusion, a strategy for addressing the loan classification issue using the classifiers studied has been proposed.

**Keywords:** loan classification, scoring, machine learning, random forest algorithm, comparative analysis of classifiers

**For citation.** Behunkou U. I., Kovalyov M. Ya. Loan classification using random forest algorithm and comparative analysis with other classifiers. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 101–108 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-101-108>

**Введение.** В [1; 2] отмечались важность и актуальность поиска решения стоящей перед финансовыми институтами задачи классификации займа, которая представляется как бинарная с делением заемщиков на хороших (без дефолта) и плохих (дефолт). Так как в [3] рекомендуется

использовать алгоритм случайного леса (RF) в качестве эталона для сравнения при новых исследованиях алгоритмов классификации, то данный алгоритм также необходимо рассмотреть при решении обозначенной задачи классификации. При этом стоит отметить, что RF относится к классу однородных ансамблевых классификаторов.

Цель работы – исследование возможности эффективного использования алгоритма случайного леса для решения задачи классификации займа и сравнение результатов со значениями, полученными при использовании логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения и глубокой нейронной сети прямого распространения.

**Описание данных.** Для решения задачи все используемые данные можно разделить на две группы: входные данные и выходные данные.

*Входные данные.* При проведении исследований с рассматриваемым алгоритмом используются исторические данные по выданным на платформе для кредитования LendingClub займам как описано в [1], которые состоят из 2260668 строк. Набор входных показателей и принцип преобразования входных данных аналогичны тем, которые были описаны ранее [1; 2]. Таким образом окончательный набор входных данных состоит из  $m = 1221731$  позиций и  $n = 73$  входных показателей.

Предполагается, что значения данных показателей были известны до принятия решения о выдаче соответствующего займа. Обозначим значение показателя  $j$  в займе  $i$  из исходного набора данных через элементы  $x_j^{(i)}$  матрицы  $X$  размером  $m$  на  $n$ , где  $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$ . Определим через  $x_j$  столбец матрицы  $X$ , а через  $x^{(i)}$  – строку матрицы  $X$ , которая содержит значения независимых показателей в отдельной позиции (займе)  $i$  набора данных.

Еще в качестве исходных данных используются целевые значения  $y^{(i)}$  (итоговый результат по займам, где  $i = 1, \dots, m$ ), которые определены в поле `loan_status` исходного набора данных и могут быть также представлены в виде вектора  $Y$ . Показатель  $y^{(i)}$  принимает два значения:

1. Возвратный займ (со значением Fully Paid). Данные займы были погашены. Соответствует значению  $y^{(i)} = 1$ .

2. Невозвратный займ (Charged Off или Default). Кредиты, по которым был объявлен дефолт или погашение займа просрочено более чем на 180 дней. Соответствует значению  $y^{(i)} = 0$ .

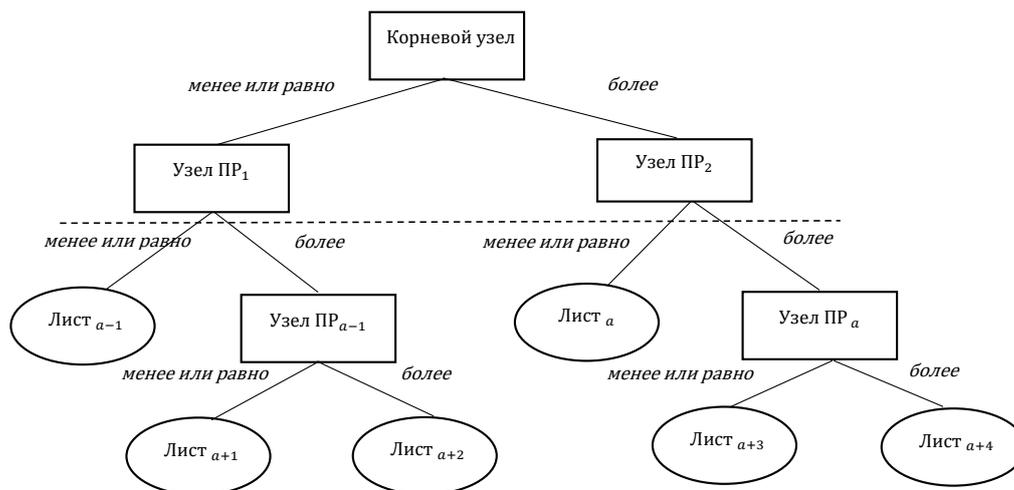
Займы со значениями Current, In Grace period, Late (16–30 days) и Late (31–120 days) исключаются из анализа, так как однозначно нельзя понять, были такие кредиты возвратными или невозвратными.

*Выходные данные.* Выходными данными изучаемой бинарной задачи классификации (т. е. определения нового кредита как возвратного или невозвратного) являются величины  $\hat{y}^{(i)} \in \{0, 1\}$ , где 1 соответствует возвратному, а 0 – невозвратному займу  $i, i \in \{1, \dots, m\}$ .

**Постановка задачи при использовании деревьев решений и метода случайного леса.** Одним из вариантов решения задачи классификации займа является использование деревьев решений [4]. Данный метод контролируемого машинного обучения является весьма популярным при решении задач классификации. Как и при использовании других методов, при данном подходе также используется набор данных  $X$  с элементами  $x_j^{(i)}$  и вектор  $Y$  с целевыми значениями  $y^{(i)}$ , как отмечено в описании данных. При этом обучение с помощью данного метода начинается с корня дерева и продолжается вниз на каждом из узлов как отражено на рисунке.

Построение данной модели осуществляется рекурсивно следующим образом [4]:

1. Для корневого узла выбирается входной показатель  $j$  и определяется пороговое значение этого показателя  $x_j^0$ , которые наиболее уменьшают (улучшают) неоднородность при разделении исходного тренировочного набора данных на два подмножества: позиции со значениями больше порогового значения обрабатываются далее по одной ветви дерева, а остальные позиции по другой ветви дерева. В результате, данные в каждом из дочерних подмножеств становятся менее неоднородными (т. е. в одном подмножестве начинают доминировать «возвратные» займы, а в другом «невозвратные»). Для этого, согласно алгоритму CART [5], для всех входных показателей  $j$  по отдельности определяется величина уменьшения примеси с помощью примеси Джини или энтропии [6]. Для текущего узла выбирается входной показатель и его пороговое значение с наибольшей величиной уменьшения примеси (неоднородности данных).



Дерево решений  
Decision tree

2. Далее, для каждого узла принятия решения повторяется алгоритм аналогично шагу 1, но на основе данных, которые ранее были разделены для данной ветви дерева. Таким образом, для каждого узла выбирается входной показатель  $j$  и определяется пороговое значение данного показателя  $x_j^0$ , которые обеспечивают наибольшую величину уменьшения примеси (на базе примеси Джини или энтропии). Стоит отметить, что для разных узлов дерева может быть выбран одинаковый либо различные показатели, а также одинаковое либо разное пороговое значение.

3. Построение дерева прекращается на отдельном листовом узле, если количество позиций для разделения менее 2 или если все позиции в каждом из листьев принадлежат одному классу («возвратный» или «невозвратный») или если более не происходит улучшение разделения данных (величина уменьшения примеси меньше или равна 0). При этом данный терминальный узел (лист) прогнозирует (определяет) категорию, которая доминирует в этом узле, т. е. если в множестве позиций этого листа большую долю занимают позиции со значением  $y^{(i)} = 1$ , то терминальному узлу присваивается категория займа «возвратный», а при  $y^{(i)} = 0$  – «невозвратный». Также во всех листах определяются вероятности каждой из категорий.

Недостатком метода деревьев решений является то, что построенная с помощью данного метода модель часто показывает хорошие результаты прогнозирования на тренировочных данных, но точность существенно снижается на тестовых значениях, т. е. модель подвержена переобучению. В таком случае применяется более сложный подход для решения задачи классификации займа: алгоритм случайного леса [7]. Он представляет собой множество отдельных деревьев решений, которые в дальнейшем агрегируются с целью получения более точной модели классификации. В то время как отдельные деревья решений подвержены переобучению, при использовании ансамбля из множества отдельных решений можно усреднить индивидуальные ошибки деревьев и, тем самым, снизить риск переобучения. При этом важно, чтобы отдельные деревья отличались друг от друга. Это достигается внедрением случайной вариации при построении отдельных деревьев решений двумя способами:

1. Для построения каждого из деревьев из исходного тренировочного набора данных формируется выборочная совокупность объектов с повторениями, которая равна по количеству позиций с исходным тренировочным набором данных, но при этом отдельные позиции могут отсутствовать, а некоторые повторяться несколько раз.

2. При построении дерева выбирается случайное количество входных показателей из множества всех  $n$  ( $n = 73$ ) показателей для каждого из отдельных деревьев решений.

В дополнение, при построении модели случайного леса необходимо определить количество отдельных деревьев, на основе которых строится модель. Обычно, увеличение количества отдельных деревьев ведет к увеличению точности прогнозирования, но при этом повышается сто-

имость компьютерных вычислений с точки зрения увеличения времени вычислений и использования оперативной памяти.

После того как модель, основанная на методе случайного леса, обучена, она осуществляет прогнозирование значения следующим образом: вначале осуществляется прогнозирование категории (в текущей задаче  $\hat{y}^{(i)} = 1$  или 0) на уровне каждого дерева в конкретном листе, а далее на основе спрогнозированных категорий и их вероятностей, рассчитанных при обучении в отдельном листе для каждого из деревьев в ансамбле, определяется средняя оценка вероятности по всем деревьям. Категория с наибольшей вероятностью является прогнозируемым значением для конкретного случая (займа).

Для сравнения эффективности решения задачи классификации займа с использованием дерева решений и случайного леса с рассмотренными ранее методами используется одинаковый набор входных данных с разделением на тренировочный и тестовый наборы данных в пропорции 70 на 30 %. Далее определяется лучшее (с точки зрения точности прогнозирования) разделение входных данных на тренировочный и тестовый наборы. Однако стоит отметить, что при данных исследованиях входные данные не нормализованы, так как при использовании методов деревьев решений и случайного леса отсутствует необходимость в такой нормализации [7].

После этого вычисляются следующие метрики, которые определяют качество прогнозирования: Accuracy (A), Precision (P), Recall (R) и мера  $F_1$ . В завершение осуществляется сравнение результатов со значениями, которые были получены при использовании логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения и глубокой нейронной сети прямого распространения.

**Классификация займов с использованием деревьев решений.** Для анализа эффективности решения задачи классификации займа с использованием деревьев решений рассматриваются деревья с оценочной функцией на основе примеси Джини и энтропии без ограничений на глубину дерева решений. Для расчетов используется класс DecisionTreeClassifier<sup>1</sup> со значениями по умолчанию, кроме параметра criterion, которому было присвоено значение «entropy» при использовании энтропии в качестве оценочной функции. По итогу проведения эксперимента были получены результаты, отраженные в табл. 1 и 2.

Т а б л и ц а 1. Результаты исследования при использовании метода деревьев решений на основе примеси Джини и энтропии

Table 1. Results of the study using the decision trees method based on Gini impurity and entropy

Результат Result	Примесь Джини Gini impurity	Энтропия Entropy
Длительность обучения алгоритма (с)	57,19	63,81
Accuracy training (%)	100	100
Accuracy testing (%)	70,23	70,76

Т а б л и ц а 2. Ключевые метрики при использовании метода деревьев решений на основе примеси Джини и энтропии

Table 2. Key metrics when using the decision trees method based on Gini impurity and entropy

Класс Class	Примесь Джини Gini impurity			Энтропия Entropy		
	Precision	Recall	Мера $F_1$ Measure $F_1$	Precision	Recall	Мера $F_1$ Measure $F_1$
Невозвратные займы, %	28,25	30,43	29,30	28,77	29,95	29,35
Возвратные займы, %	81,96	80,35	81,14	82,00	81,14	81,57
Средневзвешенное, %	71,07	70,23	70,63	71,21	70,77	70,98

<sup>1</sup> DecisionTreeClassifier // Sklearn Tree. – URL: <https://scikit-learn.org/dev/modules/generated/sklearn.tree.DecisionTreeClassifier.html#sklearn.tree.DecisionTreeClassifier> (date of access: 01.10.2024).

Из полученных результатов можно сделать вывод, что использование энтропии как оценочной функции является лучшим выбором для оценочной функции, так как при таком варианте коэффициент эффективности  $A$  и  $F_1$ -мера были выше, чем при использовании примеси Джини. Поэтому в дальнейших исследованиях как основа оценочной функции используется энтропия. При этом стоит отметить, что в двух вариантах полученная модель была подвержена переобучению, так как коэффициент эффективности на тренировочных данных был равен 1, а на тестовых – около 0,7. Для решения данной проблемы, как отмечено в постановке задачи, целесообразно применять алгоритм случайного леса.

**Классификация займов с использованием алгоритма случайного леса с лучшим максимальным количеством входных показателей.** Так как алгоритм случайного леса реализуется на основе множества деревьев решений, его применение позволяет уменьшить проблему переобучения, что приводит к более точному и стабильному прогнозированию категории займа. Это достигается с помощью двух особенностей данного метода: для обучения каждого дерева решений в ансамбле определяется набор данных с замещениями (т. е. некоторые позиции исходного набора данных из  $m$  позиций могут не попасть в выборку, а иные попасть несколько раз), а также для каждого дерева используется выбранное случайным образом подмножество входных показателей из множества всех  $n$  ( $n = 73$ ) входных показателей. Таким образом достигается уникальное формирование отдельного дерева решений в ансамбле. В результате ансамбль состоит из отличающихся друг от друга деревьев, что позитивно влияет на устранения переобучения. При выборе произвольным образом только одного из входных показателей для каждого из деревьев в случайном лесу приведет к тому, что все деревья окажутся очень разные, и в таком случае модель, скорее всего, не сможет определить взаимосвязь между входными показателями и выходной переменной с высокой точностью как на тренировочном, так и на тестовом наборе данных. С другой стороны, при выборе максимального количества входных показателей  $n$  все деревья в случайном лесу могут быть похожи, а полученная модель становится ближе к описанной ранее с сопутствующей проблемой переобучения. Поэтому необходимо провести исследование и определить лучшее максимальное количество входных показателей, при котором коэффициент эффективности  $A$  максимален на тестовых данных. В результате исследования были получены результаты, отраженные в табл. 3 и 4.

Из результатов видно, что применение метода случайного леса привело к улучшению коэффициента эффективности  $A$  на 9,40 процентных пункта по сравнению с использованием отдельного дерева решений. При этом лучшее максимальное количество входных показателей, которое используется в дальнейших экспериментах, равняется 23.

**Классификация займов с использованием алгоритма случайного леса с лучшим количеством деревьев в ансамбле.** При использовании алгоритма случайного леса по умолчанию<sup>1</sup> используется количество деревьев, равное 100. Однако данное количество может быть недостаточным

Т а б л и ц а 3. Результаты исследования при использовании метода деревьев решений с лучшим количеством входных показателей, лучшим количеством деревьев в ансамбле и использованием альтернативного разделения данных

Table 3. Results of the study using the decision trees method with the ideal number of input features, the ideal number of trees in the ensemble and alternative data separation

Результат Result	С лучшим количеством входных показателей With the ideal number of input features	С лучшим количеством деревьев With the ideal number of trees	С использованием альтернативного разделения данных With alternative data separation
Длительность обучения алгоритма (с)	62,28	1057,95	1519,76
Лучшее максимальное количество входных показателей	23	23	23
Лучшее количество деревьев в ансамбле	–	1950	1950
Доля лучшего тренировочного набора данных (%)	–	–	94
Accuracy training (%)	99,99	100	100
Accuracy testing (%)	80,16	80,27	80,55

<sup>1</sup> RandomForestClassifier // Sklearn Ensemble. – URL: <https://scikit-learn.org/dev/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html#randomforestclassifier> (date of access: 15.10.2024).

Т а б л и ц а 4. Ключевые метрики при использовании метода деревьев решений с лучшим количеством входных показателей, лучшим количеством деревьев в ансамбле и использованием альтернативного разделения данных

Table 4. Key metrics when using the decision trees method with the ideal number of input features, the ideal number of trees in the ensemble and alternative data separation

Класс Class	С лучшим количеством входных показателей With the ideal number of input features			С лучшим количеством деревьев With the ideal number of trees			С использованием альтернативного разделения данных With alternative data separation		
	Precision	Recall	Мера $F_1$ Measure $F_1$	Precision	Recall	Мера $F_1$ Measure $F_1$	Precision	Recall	Мера $F_1$ Measure $F_1$
Невозвратные займы, %	56,10	9,93	16,87	59,31	8,55	14,94	60,49	8,82	15,40
Возвратные займы, %	81,06	98,03	88,74	80,90	98,51	88,84	81,16	98,56	89,02
Средневзвешенное, %	76,00	80,17	74,17	76,53	80,27	73,86	77,02	80,56	74,25

для поиска лучшего решения конкретной задачи. При этом использование слишком большого количества деревьев может не привести к улучшению коэффициента эффективности  $A$ , но при этом потребуется больше вычислительных мощностей. Поэтому необходимо определить лучшее количество деревьев в ансамбле при использовании метода случайного леса. При этом диапазон для количества деревьев составляет от 1 до 10000. С целью лучшего использования вычислительных мощностей данное исследование предпочтительно осуществить с помощью двухшагового подхода: на первом шаге предполагается выбрать лучшее количество деревьев из множества (5, 50, 500 и 5000), т. е. на основе логарифмической шкалы. По итогу реализации первого шага определяется лучший отрезок (например, при лучшем количестве деревьев равном 5, лучшим отрезком становится диапазон от 1 до 10, а при 50 – значения от 10 до 100 и так далее). На втором шаге исследуется лучший отрезок с шагом 1 при выбранном значении на первом шаге равном 5 или 50 и с шагом 10 во всех остальных случаях. Соответственно, этот подход первично определяет диапазон значений, в котором может находиться лучшее решение, а на втором шаге более детально его исследует. Полученные результаты отражены в табл. 3 и 4.

Как следует из полученных значений, 1950 является оптимальным количеством деревьев в ансамбле при задействованном методе поиска лучшего количества деревьев в ансамбле. При этом значение коэффициента эффективности улучшилось на 0,11 процентных пункта.

**Применение альтернативного разделения данных на тренировочный и тестовый наборы при использовании алгоритма случайного леса.** Как было видно в эксперименте при использовании глубокой нейронной сети, изменение процентного отношения тренировочных и тестовых данных положительно влияло на точность прогнозирования. Поэтому при применении метода случайного леса целесообразно провести аналогичный эксперимент. Для этого доля тренировочного набора данных также изменяется с 70 до 99 % с шагом 1 %. Соответственно, доля тестового набора данных уменьшается с 30 до 1 % с тем же шагом. Итоги исследования представлены в табл. 3 и 4.

Результат эксперимента показывает, что изменение доли тренировочного набора с 70 до 94 % привело к улучшению коэффициента эффективности  $A$  модели на основе деревьев решений в рамках рассматриваемой задачи до 80,55 %. Как отмечалось ранее при исследовании глубокой нейронной сети, выбор пропорции разбиения тренировочного и тестового наборов данных зависит от выбранного пользователем критерия для оптимизации, так как разные соотношения тренировочных и тестовых данных по-разному влияют на обозначенные в постановке задачи метрики.

**Сравнение результатов при использовании логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения, глубокой нейронной сети прямого распространения и алгоритма случайного леса для решения задачи классификации займа.** Как следует из результатов исследования, при использовании алгоритма случайного леса наибольшее значение коэффициента эффективности  $A$  на тестовых данных было 80,55 %. Целесообразно сравнить полученные результаты со значениями, рассчитанными при использовании логистической регрессии [1], нейронной сети прямого распространения [2] и глубокой нейронной сети прямого распространения.

Из табл. 5 видно, что с помощью глубокой нейронной сети прямого распространения получено наивысшее (лучшее) значение коэффициента эффективности  $A$ . При этом важно подчеркнуть, что средняя длительность обучения глубокой нейронной сети прямого распространения существенно выше аналогичных величин при использовании других алгоритмов, указанных в табл. 5.

**Т а б л и ц а 5. Сравнение лучших результатов при применении логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения, глубокой нейронной сети прямого распространения и алгоритма случайного леса**

**Table 5. Comparison of the ideal results when applying logistic regression, feed-forward neural network, deep feed-forward neural network and random forest algorithm**

Результат Result	При алгоритме случайного леса With random forest algorithm	При глубокой нейронной сети прямого распространения With a deep feed-forward neural network	При нейронной сети прямого распространения With a feed-forward neural network	При логистической регрессии With logistic regression
Средняя длительность обучения (с)	1520	151681	17191	2063
Среднее значение стоимостной функции	Не применимо	0,4426	0,4435	0,4571
Accuracy training (%)	100	80,40	80,43	79,93
Accuracy testing (%)	80,56	80,65	80,32	80,04

Значения метрик  $F_1$ ,  $P$  и  $R$  при лучшем коэффициенте эффективности  $A$  сравниваемых алгоритмов по невозвратным и возвратным займам, а также при расчете средневзвешенной величины отражены в табл. 6.

**Т а б л и ц а 6. Мера  $F_1$ , Precision и Recall метрики при применении логистической регрессии, нейронной сети прямого распространения, глубокой нейронной сети прямого распространения и алгоритма случайного леса**

**Table 6. Measure  $F_1$ , Precision and Recall metrics when applying logistic regression, feed-forward neural network, deep feed-forward neural network and random forest algorithm**

Класс Class	Алгоритм случайного леса Random forest algorithm			Глубокая нейронная сеть прямого распространения Deep feed-forward neural network			Нейронная сеть прямого распространения Feed-forward neural network			Логистическая регрессия Logistic regression		
	Мера $F_1$ $F_1$ measure	Precision	Recall	Мера $F_1$ $F_1$ measure	Precision	Recall	Мера $F_1$ $F_1$ measure	Precision	Recall	Мера $F_1$ $F_1$ measure	Precision	Recall
Невозвратные займы, %	15,40	60,49	8,82	18,21	59,79	10,74	20,96	56,45	12,87	15,20	54,78	8,83
Возвратные займы, %	89,02	81,16	98,56	89,03	81,43	98,19	88,76	81,48	97,48	88,69	80,89	98,15
Средневзвешенное, %	74,25	77,02	80,56	74,82	77,09	80,65	75,02	76,41	80,33	73,79	75,60	80,04

Как следует из табл. 6, средневзвешенные значения метрик  $P$  и  $R$  оказались выше для глубокой нейронной сети прямого распространения при использовании в качестве критерия оптимизации коэффициента эффективности  $A$ . При этом, как подчеркивалось выше, результат может быть иным, если в качестве критерия оптимизации использовать другой критерий.

**Заключение.** В данном исследовании изучено использование алгоритма случайного леса для решения задачи классификации займа. Вначале было установлено, что поиск лучшего максимального количества входных показателей привел к улучшению прогнозирования модели. Также выявлено, что от количества деревьев в алгоритме случайного леса зависит точность прогнозирования, и целесообразно проводить поиск лучшего количества деревьев в ансамбле при решении конкретной задачи, что в итоге привело к улучшению прогнозируемых результатов. В завершение поиск альтернативного разделения исходных данных на тренировочный и тестовый наборы привел к увеличению коэффициента эффективности  $A$  на тестовых данных.

Из результатов сравнительного анализа следует, что итоговая точность прогнозирования при использовании глубокой сети прямого распространения оказалась выше полученной при использовании нейронной сети прямого распространения и логистической регрессии, рассмотренных в предыдущих исследованиях [1; 2], а также выше значений, полученных при использовании алгоритма случайного леса. Однако стоит отметить, что решение задачи классификации займа с использованием алгоритма случайного леса требует существенно меньше производительных ресурсов и времени, а точность прогнозирования лишь несколько уступает полученной с помощью глубокой нейронной сети прямого распространения и выше, чем точность, полученная при использовании как логистической регрессии, так и нейронной сети прямого распространения. Исходя из полученных результатов исследования, сформулируем лучшую стратегию решения задачи классификации займа: в начале следует использовать и исследовать алгоритм случайного леса, так как при существенно меньших требуемых ресурсах (вычислительных мощностей и времени обучения на обозначенные ранее) точность прогнозирования уступает лишь полученной с помощью глубокой нейронной сети. После того как разработан и функционирует инструмент классификации займа на основе алгоритма случайного леса, целесообразно продолжить исследования классификации займа с использованием глубокой нейронной сети прямого распространения, что в среднесрочной перспективе позволит улучшить точность прогнозирования.

### Список использованных источников

1. Бегунков, В. И. Классификация займов с использованием логистической регрессии / В. И. Бегунков, М. Я. Ковалев // Информатика. – 2023. – Т. 20, № 1. – С. 55–74. <https://doi.org/10.37661/1816-0301-2023-20-1-55-74>
2. Бегунков, В. И. Классификация займа с использованием нейронной сети прямого распространения / В. И. Бегунков // Информатика. – 2024. – Т. 21, № 1. – С. 83–104. <https://doi.org/10.37661/1816-0301-2024-21-1-83-104>
3. Benchmarking state-of-the-art classification algorithms for credit scoring: an update of research / S. Lessmann, B. Baesens, H.-V. Seow, L. C. Thomas // *European Journal of Operational Research*. – 2015. – Vol. 247, N 1. – P. 124–136. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2015.05.030>
4. Quinlan, J. R. Induction of Decision Trees / J. R. Quinlan // *Machine Learning*. – 1986. – Vol. 1, N 1. – P. 81–106. <https://doi.org/10.1007/bf00116251>
5. Classification and Regression Trees / L. Breiman, J. H. Friedman, R. A. Olshen, C. J. Stone. – New York, 1984. – 368 p. <https://doi.org/10.1201/9781315139470>
6. Hastie, T. The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction / T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman. – New York, 2009. – 3d ed. – P. 308–310. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>
7. Breiman L. Random Forests / L. Breiman // *Machine Learning*. – 2001. – Vol. 45. – P. 5–32. <https://doi.org/10.1023/a:1010933404324>

### References

1. Behunkou U. I., Kovalyov M. Y. Loan classification using logistic regression. *Informatics*, 2023, vol. 20, no. 1, pp. 55–74 (in Russian). <https://doi.org/10.37661/1816-0301-2023-20-1-55-74>
2. Behunkou U. I. Loan classification using a feed-forward neural network. *Informatics*, 2024, vol. 21, no. 1, pp. 83–104 (in Russian). <https://doi.org/10.37661/1816-0301-2024-21-1-83-104>
3. Lessmann S., Baesens B., Seow H.-V., Thomas L. C. Benchmarking state-of-the-art classification algorithms for credit scoring: an update of research. *European Journal of Operational Research*, 2015, vol. 247, no. 1, pp. 124–136. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2015.05.030>
4. Quinlan J. R. Induction of Decision Trees. *Machine Learning*, 1986, vol. 1, pp. 81–106. <https://doi.org/10.1007/bf00116251>
5. Breiman L., Friedman J. H., Olshen R. A., Stone C. J. *Classification and Regression Trees*. New York, 1984. 368 p. <https://doi.org/10.1201/9781315139470>
6. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. *The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction*. 3d ed. New York, 2009, pp. 308–310. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>
7. Breiman L. Random Forests. *Machine Learning*, 2001, vol. 45, pp. 5–32. <https://doi.org/10.1023/a:1010933404324>

### Информация об авторах

Бегунков Владимир Иванович – магистр технических наук. Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси (ул. Сурганова, 6, 220012, Минск, Республика Беларусь). E-mail: vbegunkov@gmail.com.

Ковалёв Михаил Яковлевич – член-корреспондент, д-р физ.-мат. наук, профессор. Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси (ул. Сурганова, 6, 220012, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kovalyov\_my@newman.bas-net.by.

### Information about the authors

Behunkou Uladzimir I. – Master of Sciences (Engineering). United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus (6, Surganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vbegunkov@gmail.com.

Kovalyov Mikhail Y. – Corresponding Member, D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor. United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus (6, Surganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kovalyov\_my@newman.bas-net.by.

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

**ФИЗИКА**  
**PHYSICS**

УДК 53.043; 535.92  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-109-116>

Поступило в редакцию 10.12.2024  
Received 10.12.2024

**И. Н. Пархоменко<sup>1</sup>, Л. А. Власукова<sup>1</sup>, В. А. Зайков<sup>1</sup>, академик Ф. Ф. Комаров<sup>2</sup>,  
А. С. Камышан<sup>2</sup>, М. Н. Жукова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь  
<sup>2</sup>Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского  
государственного университета, Минск, Республика Беларусь

**ВЛИЯНИЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ TiAlN/Cu**

**Аннотация.** Изучено изменение спектров диффузного отражения наноструктурированных покрытий TiAlN/Cu после термоциклирования в условиях, эквивалентных 16 часам нахождения на околоземной космической орбите. Тонкопленочные покрытия TiAlN с добавлением 7–8 % меди и различными соотношениями Ti/Al в металлической компоненте и между металлической и неметаллической компонентами твердого раствора сформированы методом реактивного магнетронного распыления. Показано, что отражение в спектральной области 500–2500 нм для образцов с большей концентрацией титана заметно выше и увеличивается после термической нагрузки, тогда как для образца с меньшим содержанием титана отражение не изменяется. Из спектров отражения рассчитаны коэффициент солнечного поглощения  $\alpha_s$  и излучательная способность  $\epsilon$ , а также отношение  $\alpha_s / \epsilon$ . Для образцов с преобладанием металлической компоненты ((Ti + Al) / (N + C) = 1,3) и соотношением Ti / Al = 0,95 это отношение не изменялось после термоциклирования и составляло 1,44. Для образцов с повышенным содержанием титана (Ti / Al = 2,34) и эквимолярным соотношением металлической и неметаллической компонент значение  $\alpha_s / \epsilon$  до термоциклирования составляло 3,82 и снижалось до 3,65 после термической нагрузки. Рассчитаны также ширина запрещенной зоны и ее изменение после термоциклирования для обоих типов покрытий. На основе данных оптической спектроскопии обсуждаются физические процессы, происходящие в композитах TiAlN/Cu при термоциклировании.

**Ключевые слова:** термоциклы, покрытия TiAlN/Cu, реактивное магнетронное распыление, диффузное отражение, поглощение

**Для цитирования.** Влияние термоциклирования на оптические свойства наноструктурированных покрытий TiAlN/Cu / И. Н. Пархоменко, Л. А. Власукова, В. А. Зайков [и др.] // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 109–116. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-109-116>

**Irina N. Parkhomenko<sup>1</sup>, Liudmila A. Vlasukova<sup>1</sup>, Valery A. Zaikov<sup>1</sup>, Academician Fadei F. Komarov<sup>2</sup>,  
Alexander S. Kamyshan<sup>2</sup>, Maria N. Zhukova<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus  
<sup>2</sup>A.N. Sevchenko Institute of Applied Physics Problems of the Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

**EFFECT OF THERMAL CYCLES ON OPTICAL PROPERTIES  
OF NANOSTRUCTURED COATINGS TiAlN/Cu**

**Abstract.** The change in the diffuse reflectance spectra of nanostructured TiAlN/Cu coatings after thermal cycling under conditions equivalent to 16 hours in near-earth space orbit has been studied. Thin-film TiAlN coatings with the addition of 7–8 % copper and with various Ti / Al ratios in the metallic component as well as between the metallic and non-metallic components of the solid solution were formed by reactive magnetron sputtering. It has been shown that the reflection in the spectral range of 500–2500 nm for samples with a higher titanium concentration is noticeably higher and increases after thermal loading, while for a sample with a lower titanium content, the reflection does not change. The solar absorption coefficient  $\alpha_s$  and the thermal emittance  $\epsilon$ , as well as the  $\alpha_s / \epsilon$  ratio, were calculated from the reflectance spectra. For samples with a predominant metallic component ((Ti + Al) / (N + C) = 1.3) and the Ti / Al ratio of 0.95, this ratio did not change after thermal cycling and amounted to 1.44. For samples with an increased titanium content (Ti / Al = 2.34) and an equimolar ratio of metallic and non-metallic

components, the  $\alpha_s / \varepsilon$  value before thermal cycling was 3.82 and decreased to 3.65 after thermal loading. The band gap width and its change after thermal cycling were also calculated for both types of coatings. The physical processes occurring in TiAlN/Cu composites during thermal cycling are discussed based on optical spectroscopy data.

**Keywords:** thermal cycles, TiAlN/Cu coatings, reactive magnetron sputtering, diffuse reflectance, absorption

**For citation.** Parkhomenko I. N., Vlasukova L. A., Zaikov V. A., Komarov F. F., Kamyshan A. S., Zhukova M. N. Effect of thermal cycles on optical properties of nanostructured coatings TiAlN/Cu. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 109–116 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-109-116>

**Введение.** В последние десятилетия наноструктурированные покрытия на основе нитрида титана привлекают значительное внимание благодаря своим уникальным механическим и оптическим свойствам, которые делают их перспективными для применения в различных областях, включая режущие инструменты, защиту от износа, электронные устройства. Особенно важными являются их свойства в контексте космических технологий, где защитные покрытия должны выдерживать экстремальные условия, такие как радиация, термические нагрузки, атомарный кислород, УФ излучение и др. Устойчивость и надежность этих покрытий во многом зависят от термических воздействий, которым они подвергаются в процессе эксплуатации. В космической среде в процессе орбитального полета происходят циклические изменения температуры. Это может приводить к изменениям в микроструктуре покрытий, влияя на их оптические характеристики, такие как отражательная способность, поглощение и испускание. Понимание этих изменений является ключевым для оптимизации свойств покрытий, необходимых для защиты космических аппаратов и оборудования от воздействия внешней среды.

Настоящая работа направлена на исследование влияния термоциклов на оптические свойства TiAlN/Cu нанопокровтий. Добавление алюминия в нитрид титана обычно повышает твердость и износостойкость покрытия, термическую стабильность и коррозионную стойкость, понижает коэффициент трения благодаря образованию сложной кристаллической структуры [1; 2]. Добавление меди, обладающей высокой проводимостью, в нитрид титана приводит к улучшению теплопередачи покрытия, что необходимо в случаях, когда требуется рассеивать тепло, а также приводит к увеличению электропроводности и к снижению коэффициента трения [1; 3; 4]. В рамках данной работы будет рассмотрено как термоциклирование влияет на оптические характеристики покрытий TiAlN/Cu различного состава. Особое внимание уделено оптическому поглощению, включая коэффициент солнечного поглощения и коэффициент теплового излучения – важнейшие характеристики терморегулирующих покрытий для космических аппаратов [5].

**Материалы и методы исследования.** Тонкопленочные покрытия TiAlN/Cu были получены методом реактивного магнетронного распыления на модернизированной установке УВН-2М, оснащенной модульным комплексом управления расходом газов (МКУРГ) [6]. Прибор МКУРГ автоматически регулирует подачу аргона и реактивного газа, используя сигналы обратной связи с вакуумметра и оптических датчиков интенсивности спектральных линий элементов разряда. Поддержание заданного давления рабочего газа (аргон–азот) и состава осаждаемого потока осуществлялось по двухканальному алгоритму, включающему сигналы с вакуумметра (1-й канал) и сигналы фотодиодного датчика (2-й канал) с оптическим фильтром, настроенным на спектральную линию титана  $I_{Ti}$  (506 нм), величина интенсивности которой поддерживалась на заданном уровне и связана со степенью реактивности  $\alpha$  [7]:

$$\alpha = \frac{(I_0 - I)}{(I_0 - I^*)},$$

где  $I_0$  – интенсивность атомной линии титана при распылении в чистом аргоне;  $I$  – текущая величина интенсивности линии титана при нанесении покрытия заданной стехиометрии в среде аргон–азот;  $I^*$  – интенсивность линии металла для режима распыления с полностью «азотированной» поверхностью мишени.

Способ управления с обратными связями позволяет стационарно поддерживать неравновесное состояние магнетронного разряда в переходных режимах осаждения с неустойчивым химическим состоянием поверхности мишени и таким образом управлять стехиометрией состава покрытия.

Распыление проводили из двух композитных мишеней TiAlCu, полученных методом взрывного прессования и отличающихся соотношением Ti / Al. Состав мишени 1: Ti = 46,4 ат. %; Al = 45,5 ат. %; Cu = 8,1 ат. %. Состав мишени 2: Ti = 69,0 ат. %; Al = 23,0 ат. %; Cu = 8,0 ат. %. Таким образом, в первой мишени соотношение Ti / Al ~ 1, а во второй соотношение Ti / Al = 3, при этом атомная доля Cu в обеих мишенях составляла ~8 ат. %. Магнетронное осаждение проводилось в следующем режиме: давление  $p = 0,70$  Па; горение магнетронного разряда в режиме постоянного тока разряда  $I = 1,00\text{--}1,10$  А, при этом напряжение источника питания в зависимости от используемой мишени изменялось в пределах  $U = 350\text{--}420$  В. Потенциал смещения  $U_{\text{см}}$  на подложкодержателе выбирался равным  $-150$  В; температура подложки  $T_s$  поддерживалась в диапазоне от  $350$  до  $380$  °С. Процессы осаждения проводились при значениях степени реактивности  $\alpha$ , равных  $0,520$  (режим 1) и  $0,650$  (режим 2). При проведении процесса в режиме 1 использовалась мишень 1 (Ti / Al ~ 1), в режиме 2, соответственно, мишень 2 (Ti / Al = 3).

Напыление покрытий проводилось на подложки м/к Si  $n$ -типа <100> и полированного титана марки ВТ1-0 толщиной  $2,0$  мм. Для каждого режима осаждение покрытий на подложки Si и Ti проводилось в одном процессе. Для изучения состава, морфологии и микроструктуры использовались образцы покрытий на кремнии. Исследования проводились методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с помощью электронного микроскопа Hitachi S-4800, оснащенного энергодисперсионным спектрометром для анализа элементного состава. Воздействие термонагрузок на оптические свойства оценивалось на образцах с покрытиями, напыленными на титан. Для каждого образца проведено 4 цикла подъема температуры и охлаждения. Образцы нагревались излучением кварцевой ртутной лампы мощностью  $160$  Вт, помещенной в вакуумную камеру вместе с образцом при давлении  $(1\text{--}2)10^{-4}$  Па. Площадь равномерного облучения составляла  $2 \times 1$  см<sup>2</sup> при плотности потока энергии на образце  $0,44$  Вт/см<sup>2</sup>. Один час УФ-облучения в таких условиях эквивалентен 9 часам нахождения на орбите в условиях ближнего космоса. Суммарное время облучения образца составило  $1,8$  ч. Режим нагрева и охлаждения: нагрев от  $15$  до  $150$  °С в течение  $20$  мин, потом охлаждение при отключенном источнике излучения до температуры  $140$  °С в течение  $3$  мин, еще нагрев до  $160$  °С в течение  $7$  мин, затем охлаждение до  $T_{\text{комн}}$  (около  $90$  мин). Суммарное время нахождения образца при температуре  $140\text{--}160$  °С –  $1,3$  ч.

Спектры диффузного отражения в диапазоне  $190\text{--}2500$  нм регистрировались на установке LAMBDA-1050 UV-VIS с помощью приставки «Интегрирующая сфера». В работе анализировались спектры поглощения образцов, полученные путем пересчета спектров диффузного отражения с помощью функции Кубелки–Мунка  $F$ :

$$F(\lambda) = \frac{(1 - R(\lambda))^2}{2R(\lambda)}.$$

С использованием спектров диффузного отражения  $R(\lambda)$  и международного стандарта ASTM E-490 AM0 энергетического спектра солнечного излучения за пределами атмосферы  $I_s(\lambda)$  был рассчитан коэффициент солнечного поглощения  $\alpha_s$  по формуле

$$\alpha_s = \frac{\int_{0,2 \text{ МКМ}}^{2,5 \text{ МКМ}} I_s(\lambda)[1 - R(\lambda)]d\lambda}{\int_{0,2 \text{ МКМ}}^{2,5 \text{ МКМ}} I_s(\lambda)d\lambda},$$

где  $\lambda$  – длина волны излучения.

С использованием спектров отражения в ИК области оценена интегральная излучательная способность  $\varepsilon(T)$  по формуле

$$\varepsilon(T) = \frac{\int_{2,5 \text{ МКМ}}^{25 \text{ МКМ}} b(\lambda, T)\varepsilon(\lambda, T)d\lambda}{\int_{2,5 \text{ МКМ}}^{25 \text{ МКМ}} b(\lambda, T)d\lambda},$$

где  $b(\lambda, T)$  – спектральная плотность излучения абсолютно черного тела (формула Планка);  $\varepsilon(\lambda, T)$  – спектр поглощения (изучения). При расчетах температура составляла  $80$  °С.

**Результаты и их обсуждение.** В табл. 1 показаны результаты анализа элементного состава покрытий TiAlN-Cu методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

Т а б л и ц а 1. Состав покрытий TiAlN-Cu  
 Table 1. Composition of TiAlN-Cu coatings

Образец Sample	$\alpha$ , отн. ед.	Ti, ат. %	Al, ат. %	N, ат. %	C, ат. %	O, ат. %	Cu, ат. %	Ti / Al	Ti + Al, ат. %	N + C, ат. %	(Ti + Al) / (N + C)
1*	0,520	24,76	25,98	37,10	1,97	1,54	8,65	0,95	50,74	39,07	1,30
2**	0,605	32,06	13,68	42,36	2,97	1,58	7,35	2,34	43,33	42,93	1,01

П р и м е ч а н и я: \* – для напыления использовалась мишень 1, \*\* – для напыления использовалась мишень 2.  
 Notes: \* – target 1 was used for spraying, \*\* – target 2 was used for spraying.

Как показали ранее проведенные исследования, медь не входит в состав твердого раствора TiAlN, а концентрируется в аморфном состоянии по границам зерен [4; 6; 7]. Углерод является фоновой примесью и входит в состав твердого раствора TiAlN, частично замещая атомы азота в ГЦК-решетке TiAlN [6]. Возможность такого замещения обусловлена одинаковым типом решетки (ГЦК) для соединений TiN и TiC и близким размером атомов C и N. Поэтому при оценке доли неметаллической компоненты твердого раствора наряду с азотом учитывался также углерод. Соотношение между металлической и неметаллической компонентами твердого раствора, а также соотношение между долей алюминия и титана являются важными параметрами, определяющими структуру и свойства покрытий. Как видно из табл. 1, соотношение Ti / Al составляет 0,95 и 2,34 для образцов 1 и 2 соответственно, что согласуется с составом используемых мишеней. Концентрация меди в обоих образцах сравнима (8,65 и 7,35 ат. %). Соотношение между металлической и неметаллической компонентами (Ti + Al) / (N + C) твердого раствора определяется степенью реактивности. При значении  $\alpha = 0,502$  формируется покрытие, обогащенное Ti и Al по отношению к неметаллическим компонентам, возрастание  $\alpha$  до 0,605 приводит к получению покрытия с эквимоллярным соотношением (Ti + Al) / (N + C)  $\sim 1$ . Таким образом, состав покрытия определяется составом распыляемой мишени и значением степени реактивности  $\alpha$ .

На рис. 1 представлены снимки поверхности и сколов образцов 1 и 2. Толщины покрытий в образцах 1 и 2 близки и составляют 966 и 996 нм соответственно. В обоих случаях покрытия представляют собой плотные столбчатые микроstructures с наклонными границами зерен, что свидетельствует о формировании фазы TiAlN, а не смеси фаз TiN и AlN [8]. Покрытие на образце 1 с меньшей концентрацией Ti характеризуется более гладкой поверхностью и меньшим размером зерен (50–110 нм для образца 1 и 130–190 нм для образца 2).

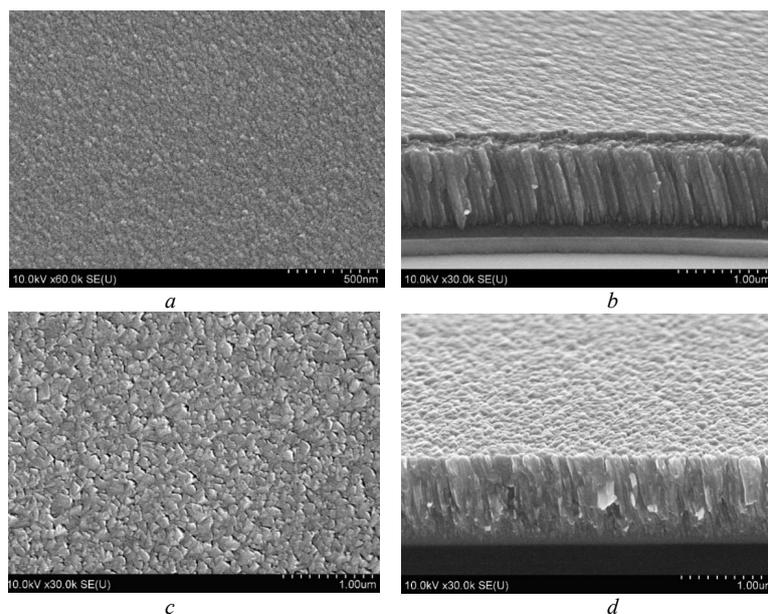


Рис. 1. Поверхность (a, c) и скол (b, d) образцов 1 (a, b) и 2 (c, d)

Fig. 1. Surface (a, c) and cross-section (b, d) of the samples 1 (a, b) and 2 (c, d)

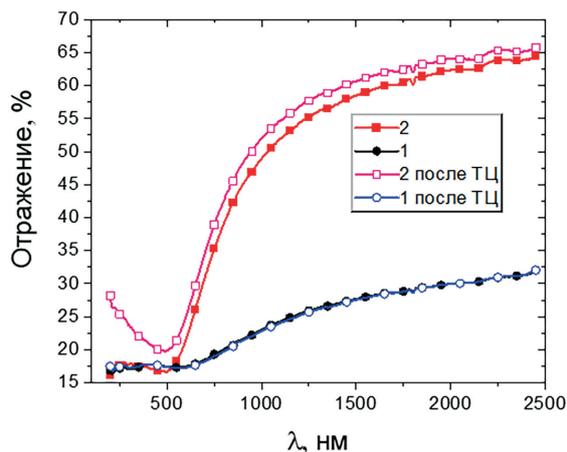


Рис. 2. Спектры диффузного отражения для образцов 1 и 2 до и после термоциклирования  
 Fig. 2. Diffuse reflectance spectra of the samples 1 and 2 before and after thermocycling

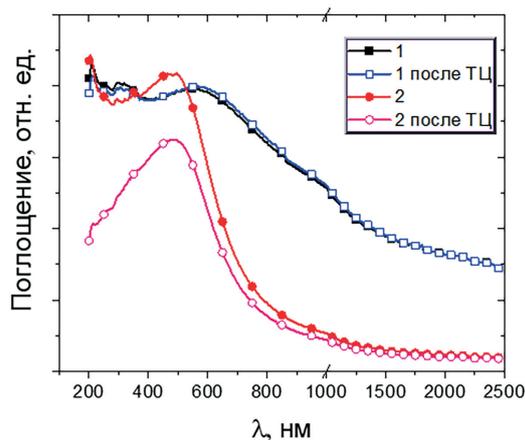


Рис. 3. Спектры поглощения для образцов 1 и 2 до и после термоциклирования  
 Fig. 3. Absorption spectra of the samples 1 and 2 before and after thermocycling

На рис. 2 представлены спектры диффузного отражения образцов.

Образец 2 характеризуется более высоким коэффициентом отражения в спектральном диапазоне 500–2500 нм, чем образец 1. Во-первых, это можно связать с более высокой концентрацией Ti в данном образце. Так, по данным работы [9] высокое соотношение N / Ti в пленках TiN сопровождается низким коэффициентом отражения благодаря захвату свободных электронов титана атомами азота. Во-вторых, более высокий коэффициент отражения можно объяснить более неоднородной поверхностью. После проведения ТЦ спектр отражения образца 1 практически не изменяется, тогда как для образца 2 наблюдается увеличение отражения во всем исследуемом спектральном диапазоне.

На основе спектров отражения рассчитаны коэффициент солнечного поглощения  $\alpha_s$  и излучательная способность  $\epsilon$ . Для образца 1 с меньшим соотношением Ti / Al  $\alpha_s$  составляет 0,79 и не изменяется после термической нагрузки. Это значение близко к  $\alpha_s$  для покрытий с избытком алюминия – 0,77 из работы [10]. Для образца 2 коэффициент солнечного поглощения ниже – 0,65, а после ТЦ снижается на 5 % (до 0,62). Для образцов 1 и 2  $\epsilon$  составляет 0,55 и 0,17, соответственно, и не изменяется после термической нагрузки.

На рис. 3 представлены спектры поглощения образцов 1 и 2 до и после термической нагрузки, рассчитанные с помощью функции Кубелки–Мунка.

На спектрах поглощения кроме основной полосы, связанной с межзонными электронными переходами [11], при 580 и 480 нм для образцов 1 и 2, соответственно, проявляются слабые полосы в УФ области: 210 и 300–330 нм. Эти полосы, вероятнее всего, обусловлены фазой AlN [12], TiN [13] или поверхностно-плазмонным резонансом TiAlN [8].

Для покрытий была также определена ширина запрещенной зоны с помощью известного уравнения Тауца [14]:

$$(\alpha E)^2 = B(E - E_g), \tag{1}$$

где  $E$ ,  $E_g$  и  $B$  – энергия фотона, ширина запрещенной зоны и постоянная Тауца (наклон) соответственно. Вместо  $\alpha$  в (1) можно использовать функцию Кубелки–Мунка  $F(R_d)$  [15], представленную на рис. 3. Ширина запрещенной зоны, рассчитанная путем экстраполяции в линейной области соответствующих кривых Тауца до пересечения с осью энергии, составляет 1,3 и 1,9 эВ для образцов 1 и 2 соответственно. После термической нагрузки эти значения практически не изменились для обоих образцов. Результаты расчетов оптических параметров осажденных покрытий TiAlN-Cu суммированы в табл. 2.

Важным параметром для выбора покрытия в качестве материала для температурного контроля спутников является отношение коэффициента солнечного поглощения к излучательной

Т а б л и ц а 2. Рассчитанные из спектров отражения и поглощения параметры покрытий TiAlN-Cu

T a b l e 2. Parameters of TiAlN-Cu coatings calculated from reflection and absorption spectra

Образец Sample	$\alpha$ , отн. ед.	(Ti + Al) / (N + C)	$\alpha_s$ до ТЦ	$\alpha_s$ после ТЦ	$\epsilon$ до ТЦ	$\epsilon$ после ТЦ	$\alpha_s / \epsilon$ до ТЦ	$\alpha_s / \epsilon$ после ТЦ	$E_g$ , до ТЦ, эВ	$E_g$ после ТЦ, эВ
1	0,520	1,30	0,79	0,79	0,55	0,55	1,44	1,44	1,30	1,26
2	0,605	1,01	0,65	0,62	0,17	0,17	3,82	3,65	1,89	1,89

способности  $\alpha_s / \epsilon$ . Чем меньше  $\alpha_s / \epsilon$ , тем эффективнее будет теплоотвод и, соответственно, ниже равновесная температура тела наноспутника. С другой стороны, для фототермических преобразователей желательны высокий уровень поглощения солнечной энергии и минимальные потери энергии в ИК диапазоне [5], т. е. отношение  $\alpha_s / \epsilon_0$  должно быть как можно больше. Таким образом, с точки зрения эффективности теплоотвода покрытие 1 ( $\alpha_s / \epsilon = 1,44$ ) с преобладанием металлической компоненты и одинаковой концентрацией Ti и Al предпочтительнее покрытия 2 ( $\alpha_s / \epsilon = 3,82$ ) с эквимолярным соотношением металлической и неметаллической компонент и повышенным содержанием Ti в сравнении с Al. Вместе с тем высокое значение  $\alpha_s / \epsilon$  в случае образца 2 предпочтительнее с точки зрения преобразования солнечной энергии в термическую. Следует также отметить стабильность параметров  $\alpha_s$  и  $\epsilon$  к воздействию термонагрузок в случае образца 1. Для образца 2 термонагрузки приводят к снижению  $\alpha_s$ . Для выяснения природы нестабильности  $\alpha_s$  под действием термонагрузок в случае покрытий с повышенным содержанием титана планируются дополнительные исследования.

**Заключение.** Методом реактивного магнетронного распыления сформированы наноструктурированные тонкопленочные покрытия TiAlN/Cu с добавлением 7–8 % меди и различными соотношениями Ti / Al в металлической компоненте и между металлической и неметаллической компонентами (Ti + Al) / (N + C) твердого раствора. Образцы с преобладанием металлической компоненты ((Ti + Al) / (N + C) = 1,3) и соотношением Ti / Al = 0,95 отличаются более гладкой поверхностью и меньшим коэффициентом диффузного отражения в диапазоне 500–2500 нм. Термоциклирование таких образцов не изменяет уровень отражения и коэффициент солнечного поглощения. В то же время для образцов с повышенным содержанием титана (Ti / Al = 2,34) и эквимолярным соотношением металлической и неметаллической компонент после термоциклирования отмечено увеличение отражения и снижение коэффициента солнечного поглощения  $\alpha_s$  на 5 %. Излучательная способность после термической нагрузки не изменялась для двух типов образцов.

Важнейшей характеристикой терморегулирующих покрытий для космических аппаратов является отношение коэффициента солнечного поглощения к излучательной способности  $\alpha_s / \epsilon$ . Для образцов с преобладанием металлической компоненты ((Ti + Al) / (N + C) = 1,3) и соотношением Ti / Al = 0,95 значение  $\alpha_s / \epsilon$ , равное 1,44, не изменялось после термоциклирования. Для образцов с повышенным содержанием титана (Ti / Al = 2,34) и эквимолярным соотношением металлической и неметаллической компонент значение  $\alpha_s / \epsilon$  до термоциклирования составляло 3,82 и снижалось до 3,65 после термической нагрузки.

Результаты данного исследования могут предоставить полезную информацию для разработки более эффективных и устойчивых покрытий с улучшенными эксплуатационными свойствами, что особенно важно для приложений в области космической техники.

**Благодарности.** Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований «Конвергенция–2025» (задание 3.07.1.2, № ГР 20211910 и 3.07.1, № ГР 20211235).

**Acknowledgments.** The work was carried out with the financial support of the State scientific research program “Convergence–2025” (project 3.07.1.2, No. GR 20211910 and 3.07.1, No. GR 20211235).

### Список использованных источников

1. TiAlN/Cu Nanocomposite coatings deposited by filtered cathodic arc ion plating / L. Chen, Z. Pei, J. Xiao [et al.] // Journal of Materials Science and Technology. – 2017. – Vol. 33, N 1. – P. 111–116. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2016.07.018>
2. Friction behaviour of TiAlN films around cubic/hexagonal transition: A 2D grazing incidence X-ray diffraction and electron energy loss spectroscopy study / Y. Pinot, M.-J. Pac, P. Henry [et al.] // Thin Solid Films. – 2015. – Vol. 577. – P. 74–81. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2015.01.044>

3. Designing Cu chemical distribution in Ti(AlCu)N coatings for enhanced erosion-corrosion and antibacterial performance / X. Zhang, J. Wu, X. Tao [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2024. – Vol. 648. – Art. 159053. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.159053>
4. Nanostructured TiAlCuN and TiAlCuCN coatings for spacecraft: effects of reactive magnetron deposition regimes and compositions / F. F. Komarov, S. V. Konstantinov, I. V. Chizhov [et al.] // *RSC Advances*. – 2023. – Vol. 13, N 27. – P. 18898–18907. <https://doi.org/10.1039/D3RA02301J>
5. Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry / J. Jyothi, A. Biswas, P. Sarkar [et al.] // *Applied Physics A*. – 2017. – Vol. 123. – Art. 496. <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1103-2>
6. Radiation tolerance of nanostructured TiAlN coatings under Ar<sup>+</sup> ion irradiation / S. V. Konstantinov, E. Wendler, F. F. Komarov, V. A. Zaikov // *Surface and Coatings Technology*. – 2020. – Vol. 386. – Art. 125493. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125493>
7. Система контроля расхода газов для применения в технологии реактивного магнетронного распыления / И. М. Климович, В. Н. Кулешов, В. А. Зайков [и др.] // *Приборы и методы измерений*. – 2015. – Т. 6, № 2. – С. 139–147.
8. Evolution of structural, morphological, mechanical and optical properties of TiAlN coatings by variation of N and Al amount / S. Asgary, M. Ghoranneviss, A. Mahmoodi, S. Zarein-dolab // *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*. – 2018. – Vol. 28. – P. 428–438. <https://doi.org/10.1007/s10904-017-0603-z>
9. Study of the optoelectronic properties of titanium nitride thin films deposited on glass by reactive sputtering in the cathodic cage / H. P. Madureira, R. M. Monção, A. A. Silva [et al.] // *Materials Research*. – 2023. – Vol. 26. – Art. e20230187. <https://doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2023-0187>
10. The effect of annealing under non-vacuum on the optical properties of TiAlN non-vacuum solar selective absorbing coating prepared by cathodic arc evaporation / D. Gong, X. Cheng, W. Ye [et al.] // *Journal of Wuhan University of Technology. Materials Science Edition*. – 2013. – Vol. 28. – P. 256–260. <https://doi.org/10.1007/s11595-013-0674-9>
11. Design, fabrication and thermal stability of spectrally selective TiAlN/SiO<sub>2</sub> tandem absorber / A. G. Wattoo, C. Xu, L. Yang [et al.] // *Solar Energy*. – 2016. – Vol. 138. – P. 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2016.08.053>
12. Novel high-pressure phases of AlN: A first-principles study / C. Liu, M. Hu, K. Luo [et al.] // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 117. – P. 496–501. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.02.031>
13. Valletti, K. Functional multi-layer nitride coatings for high temperature solar selective applications / K. Valletti, D. Murali Krishna, S. V. Joshi // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. – 2014. – Vol. 121. – P. 14–21. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2013.10.024>
14. Chemical bonding states and solar selective characteristics of unbalanced magnetron sputtered Ti<sub>x</sub>M<sub>1-x-y</sub>N<sub>y</sub> films / M. M. Rahman, Z.-T. Jiang, P. Munroe [et al.] // *RSC Advances*. – 2016. – Vol. 6, N 43. – P. 36373–36383. <https://doi.org/10.1039/c6ra02550a>
15. Makuła, P. How to correctly determine the band gap energy of modified semiconductor photocatalysts based on UV–Vis spectra / P. Makuła, M. Pacia, W. Macyk // *Journal of Physical Chemistry Letters*. – 2018. – Vol. 9, N 23. – P. 6814–6817. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b02892>

## References

1. Chen L., Pei Z., Xiao J., Gong J., Sun C. TiAlN/Cu nanocomposite coatings deposited by filtered cathodic arc ion plating. *Journal of Materials Science and Technology*, 2017, vol. 33, no. 1, pp. 111–116. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2016.07.018>
2. Pinot Y., Pac M.-J., Henry P., Rousselot C., Odarchenko Ya. I., Ivanov D. A., Ulhaq-Bouillet C., Ersen O., Tuilier M.-H. Friction behaviour of TiAlN films around cubic/hexagonal transition: A 2D grazing incidence X-ray diffraction and electron energy loss spectroscopy study. *Thin Solid Films*, 2015, vol. 577, pp. 74–81. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2015.01.044>
3. Zhang X., Wu J., Tao X., Huang Z., Wang J., Zammit A., Tang C., Chen J. Designing Cu chemical distribution in Ti(AlCu)N coatings for enhanced erosion-corrosion and antibacterial performance. *Applied Surface Science*, 2024, vol. 648, art. 159053. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.159053>
4. Komarov F. F., Konstantinov S. V., Chizhov I. V., Zaikov V. A., Zubar T. I., Trukhanov A. V. Nanostructured TiAlCuN and TiAlCuCN coatings for spacecraft: effects of reactive magnetron deposition regimes and compositions. *RSC Advances*, 2023, vol. 13, no. 27, pp. 18898–18907. <https://doi.org/10.1039/D3RA02301J>
5. Jyothi J., Biswas A., Sarkar P., Soum-Glaude A., Nagaraja H. S., Barshilia H. C. Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry. *Applied Physics A*, 2017, vol. 123, art. 496. <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1103-2>
6. Konstantinov S. V., Wendler E., Komarov F. F., Zaikov V. A. Radiation tolerance of nanostructured TiAlN coatings under Ar<sup>+</sup> ion irradiation. *Surface and Coatings Technology*, 2020, vol. 386, art. 125493. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125493>
7. Klimovich I. M., Kuleshov V. N., Zaikou V. A., Burmakou A. P., Komarov F. F., Ludchik O. R. Gas flow control system in reactive magnetron sputtering technology. *Pribory i metody izmerenii = Devices and Methods of Measurements*, 2015, vol. 6, no. 2, pp. 139–147 (in Russian).
8. Asgary S., Ghoranneviss M., Mahmoodi A., Zarein-dolab S. Evolution of structural, morphological, mechanical and optical properties of TiAlN coatings by variation of N and Al amount. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 2018, vol. 28, pp. 428–438. <https://doi.org/10.1007/s10904-017-0603-z>
9. Madureira H. P., Monção R. M., Silva A. A., Hidalgo A. A., Vega M. L., Feitor M. C., Santos F. E. P., de Carvalho Costa T. H., de Sousa R. R. M. Study of the optoelectronic properties of titanium nitride thin films deposited on glass by reactive sputtering in the cathodic cage. *Materials Research*, 2023, vol. 26, art. e20230187. <https://doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2023-0187>

10. Gong D., Cheng X., Ye W., Zhang P., Luo G. The effect of annealing under non-vacuum on the optical properties of TiAlN non-vacuum solar selective absorbing coating prepared by cathodic arc evaporation. *Journal of Wuhan University of Technology. Materials Science Edition*, 2013, vol. 28, pp. 256–260. <https://doi.org/10.1007/s11595-013-0674-9>
11. Wattoo A. G., Xu C., Yang L., Ni C., Yu C., Nie X., Yan M., Mao S., Song Z. Design, fabrication and thermal stability of spectrally selective TiAlN/SiO<sub>2</sub> tandem absorber. *Solar Energy*, 2016, vol. 138, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2016.08.053>
12. Liu C., Hu M., Luo K., Cui L., Yu D., Zhao Z., He J. Novel high-pressure phases of AlN: A first-principles study. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 117, pp. 496–501. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.02.031>
13. Valleti K., Murali Krishna D., Joshi S. V. Functional multi-layer nitride coatings for high temperature solar selective applications. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2014, vol. 121, pp. 14–21. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2013.10.024>
14. Rahman M. M., Jiang Z.-T., Munroe P., Chuah L. S., Zhou Z., Xie Z., Yin C. Y., Ibrahim K., Amri A., Kabir H., Haque M. M., Mondinos N., Altarawneh M., Dlugogorski B. Z. Chemical bonding states and solar selective characteristics of unbalanced magnetron sputtered Ti<sub>x</sub>M<sub>1-x</sub>Y<sub>y</sub> films. *RSC Advances*, 2016, vol. 6, no. 43, pp. 36373–36383. <https://doi.org/10.1039/C6RA02550a>
15. Makuła P., Pacia M., Macyk W. How to correctly determine the band gap energy of modified semiconductor photocatalysts based on UV–Vis spectra. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2018, vol. 9, no. 23, pp. 6814–6817. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b02892>

### Информация об авторах

*Пархоменко Ирина Николаевна* – канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник. Белорусский государственный университет (ул. Курчатова, 5, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: parkhomenko@bsu.by.

*Власукова Людмила Александровна* – канд. физ.-мат. наук, заведующая лабораторией. Белорусский государственный университет (ул. Курчатова, 5, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: vlasukova@bsu.by.

*Зайков Валерий Александрович* – ст. преподаватель. Белорусский государственный университет (ул. Курчатова, 1, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: zaikov@bsu.by.

*Комаров Фадей Фадеевич* – академик, д-р физ.-мат. наук, заведующий лабораторией. Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ (ул. Курчатова, 7, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: komarovf@bsu.by.

*Камышан Александр Степанович* – канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник. Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ (ул. Курчатова, 7, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kamyshana@mail.ru.

*Жукова Мария Николаевна* – мл. науч. сотрудник. Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ (ул. Курчатова, 7, 220045, Минск, Республика Беларусь). E-mail: maryliss.lab@gmail.com.

### Information about the authors

*Parkhomenko Irina N.* – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher. Belarusian State University (5, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: parkhomenko@bsu.by.

*Vlasukova Liudmila A.* – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory. Belarusian State University (5, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vlasukova@bsu.by.

*Zaikov Valery A.* – Senior Lecturer. Belarusian State University (1, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: zaikov@bsu.by.

*Komarov Fadei F.* – Academician, D. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory. A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems (7, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: komarovf@bsu.by.

*Kamyshan Alexander S.* – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher. A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems (7, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kamyshana@mail.ru.

*Zhukova Maria N.* – Junior Researcher. A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems (7, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: maryliss.lab@gmail.com.

ISSN 15618323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

**ХИМИЯ**  
**CHEMISTRY**

УДК 575.112:004.4+615.011  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-117-128>

Поступило в редакцию 16.09.2024  
Received 16.09.2024

**М. И. Шаладонова, член-корреспондент С. А. Усанов**

*Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*

**ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ И ADMET-АНАЛИЗ В ИДЕНТИФИКАЦИИ  
НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ 17,20-ЛИАЗЫ ЧЕЛОВЕКА (CYP17A1)**

**Аннотация.** С применением фармакофорного моделирования на основе структуры лиганда осуществлен виртуальный скрининг потенциальных ингибиторов 17,20-лиазной активности фермента CYP17A1 человека, вовлеченного в патогенез развития рака предстательной железы. При отборе соединений-лидеров оценивали их фармакокинетические параметры (ADMET) для снижения риска побочных эффектов на организм. В результате проведенных исследований идентифицировано 5 соединений, характеризующихся синтетической доступностью, приемлемыми фармакокинетическими параметрами. Согласно расчетным данным гибкого молекулярного докинга, найденные соединения имеют низкие значения свободной энергии связывания с каталитическим центром фермента, которые сопоставимы с экспериментальным значением применяемого в клинической практике ингибитора CYP17A1 – абиратерона. Установлено, что связывание идентифицированных соединений с ферментом обусловлено ван-дер-ваальсовыми, липофильными, электростатическими и межмолекулярными водородными взаимодействиями с аминокислотными остатками активного центра и  $\pi$ -стэкингом с гем-группой фермента. Полученные результаты будут использованы для разработки новых противоопухолевых препаратов с минимальными побочными эффектами для лечения рака простаты, терапевтическое действие которых основано на ингибировании 17,20-лиазной активности CYP17A1.

**Ключевые слова:** CYP17A1 человека, рак предстательной железы, 17,20-лиазная активность CYP17A1, фармакофорное моделирование, фармакофорный скрининг, фармакокинетические параметры, гибкий молекулярный докинг

**Для цитирования.** Шаладонова, М. И. Виртуальный скрининг и ADMET-анализ в идентификации новых ингибиторов 17,20-лиазы человека (CYP17A1) / М. И. Шаладонова, С. А. Усанов // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 117–128. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-117-128>

**Marina I. Shaladonova, Corresponding Member Sergei A. Usanov**

*Institute of Bioorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

**VIRTUAL SCREENING AND ADMET ANALYSIS IN IDENTIFICATION  
OF NEW HUMAN 17,20-LYASE (CYP17A1) INHIBITORS**

**Abstract.** The article describes the development of a robust pharmacophore model and pharmacophore screening of potential inhibitors of the 17,20-lyase activity of the human CYP17A1 enzyme – an important target in the treatment of prostate cancer. To choose the compounds with the best pharmacokinetics parameters ADMET analysis was performed. According to the calculated data of flexible molecular docking, there were found five compounds with low free energies of binding to the catalytic center of the enzyme, which are comparable to the experimental value of the CYP17A1 inhibitor abiraterone used in clinical practice for treatment castration-resistant prostate cancer. It was established that the connection of the identified compounds with the enzyme is due to van der Waals, lipophilic, electrostatic and intermolecular hydrogen bonds with amino acid residues of the active center and  $\pi$ -stacking with the heme group of the enzyme. The results obtained will be used to develop new drugs with minor side effects for the treatment of prostate cancer due to inhibition of the 17,20-lyase activity of CYP17A1.

**Keywords:** human CYP17A1, prostate cancer, 17,20-lyase activity of CYP17A1, pharmacophore modeling, pharmacophore screening, pharmacokinetic parameters, flexible molecular docking

**For citation.** Shaladonova M. I., Usanov S. A. Virtual screening and ADMET analysis in identification of new human 17,20-lyase (CYP17A1) inhibitors. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 117–128 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-117-128>

**Введение.** CYP17A1 человека (17 $\alpha$ -гидроксилаза/17,20-лиаза, EC 1.14.14.19/EC 1.14.14.32) представляет собой фермент-монооксигеназу, относится к суперсемейству цитохромов P450 и участвует в реакциях биосинтеза стероидных гормонов в мембранах эндоплазматической сети стероидогенных органов и тканей. CYP17A1 катализирует реакцию 17 $\alpha$ -гидроксилирования прегненолона и прогестерона с образованием соответствующих 17 $\alpha$ -гидроксипроизводных, которые являются предшественниками в биосинтезе глюкокортикоидных гормонов. В свою очередь, CYP17A1 катализирует реакцию превращения 17 $\alpha$ -гидроксипрегненолона и 17 $\alpha$ -гидроксипрогестерона посредством 17,20-лиазной реакции в дегидроэпиандростендион и андростендион соответственно, которые являются промежуточными стероидами биосинтеза андрогенов. CYP17A1 – ключевой фермент в биосинтезе глюкокортикоидов и андрогенов, а дисфункция данного фермента сопровождается тяжелыми нарушениями в организме.

CYP17A1 вовлечен в патогенез таких заболеваний, как рак предстательной железы (РПЖ), синдром поликистозных яичников, рак молочной железы, синдром Кушинга. Избыточный уровень андрогенов способствует росту и пролиферации злокачественных клеток в предстательной железе [1; 2]. В мире РПЖ занимает 2-е место среди причин смертности от онкологических заболеваний у мужчин. В Республике Беларусь уровень заболеваемости РПЖ находится на 3-м месте после рака кожи и легкого, и составляет 46,3 случая на 100 тыс. мужчин [3]. Единственным зарегистрированным препаратом-ингибитором CYP17A1 для лечения РПЖ является абиратерона ацетат, который представляет собой стероидный ингибитор CYP17A1, имитирующий природный субстрат фермента. Однако стоит отметить, что преимущественное ингибирование 17 $\alpha$ -гидроксилазной активности, свойственное абиратерону, приводит к дефициту глюкокортикоидов, последующему увеличению адренокортикотропного гормона и синдрому избытка минералкортикоидов, что сопровождается такими побочными эффектами, как артериальная гипертензия, сердечная недостаточность, гипокалиемия, периферические отеки. В связи с этим абиратерона ацетат назначают в комбинации с преднизолоном, применение которого приводит к угнетению функции коры надпочечников. Чтобы предотвратить побочные эффекты, связанные с ингибированием 17 $\alpha$ -гидроксилазы, необходимо применение ингибиторов, селективных к 17,20-лиазной активности фермента, для этого ведется поиск новых селективных к 17,20-лиазе стероидных и нестероидных ингибиторов CYP17A1 [4]. Ряд ингибиторов нового поколения оценивают в клинических испытаниях. Селективные к 17,20-лиазной активности фермента ингибиторы стероидной структуры галетерон и нестероидной структуры (S)-севитеронел не были одобрены в ходе III фазы клинических испытаний ввиду того, что для них конечная точка общей выживаемости не достигает статистической значимости. Селективный нестероидный ингибитор (S)-ортеронел не прошел клинические испытания II фазы из-за ограниченной переносимости и незначительного клинического эффекта [2; 5].

Таким образом, в связи с отсутствием на фармацевтическом рынке мира селективных к 17,20-лиазной активности ингибиторов CYP17A1, является актуальным поиск эффективных и безопасных селективных ингибиторов 17,20-лиазы человека с приемлемыми фармакокинетическими параметрами [1; 4–6].

В настоящее время для того чтобы оптимизировать поиск потенциальных лигандов-ингибиторов, используют методы компьютерного моделирования, позволяющие сократить время и затраты на высокопроизводительный лабораторный скрининг [7; 8].

Цель данного исследования заключалась в идентификации потенциальных ингибиторов 17,20-лиазы человека, перспективных для изучения *in vitro* и *in vivo*. Для реализации поставленной цели были выполнены исследования, включающие фармакофорное моделирование на основе структуры лиганда CYP17A1 человека с выраженной 17,20-лиазной активностью; фармакофорный скрининг в базе данных ChEMBL; оценка фармакокинетических параметров (ADMET) химических структур, соответствующих фармакофорной модели; молекулярный докинг соединений-

лидеров; анализ полученных результатов и отбор соединений, перспективных для тестирования *in vitro* и *in vivo*.

**Материалы и методы исследования.** *Фармакофорное моделирование на основе структуры лигандов CYP17A1* проводили с использованием инструментария программы Schrodinger (модули Phase, LigPrep, MacroModel, Epik) с помощью лигандов, изученных на рекомбинантном CYP17A1 человека *in vitro*, для которых значения  $IC_{50}$  относительно 17,20-лиазной активности фермента составляют от 2 до 38 нмоль. Базу данных лигандов CYP17A1 человека формировали на основании информации, представленной в научных статьях. Количество соответствующих соединений составило 23 лиганда нестероидной структуры, представляющих наиболее эффективные ингибиторы 17,20-лиазной активности фермента [9; 10]. Для выбранных соединений были получены 2D структуры из базы данных ChemSpider (<https://www.chemspider.com>).

Исходные соединения конвертировали в 3D структуры при помощи модуля LigPrep с параметрами силового поля OPLS-4 при pH 7,4 с использованием модуля Epik, учитывая таутомерные формы и стереоизомеры. Затем 3D структуры подвергали конформационному поиску с помощью алгоритма модуля MacroModel (силовое поле OPLS-4, метод систематического поиска с последующей минимизацией энергии полученных конформаций, константа диэлектрической проницаемости 1.0, показатель среднеквадратичного отклонения не более 1 Å). При использовании модуля Phase программы Schrodinger проводили компьютерное моделирование для получения общей фармакофорной модели, причем применяли параметр полного соответствия фармакофору как минимум для 90 % из полученных 900 соединений [11–13].

Для поиска фармакофорных признаков полученных структур применяли библиотеки Python 3.11 v.2024.2.1. (pandas v.2.2.1, rdkit v.2023.9.5, matplotlib v.3.8.2).

*Фармакофорный скрининг* проводили с использованием структур из базы данных ChEMBL (<https://www.ebi.ac.uk/chembl>), содержащей информацию о 2D структурах (SMILES) 2,5 миллионов химических соединений. Базу данных помещали в модуль Phase для генерации 3D структур при параметрах силового поля OPLS-4 при pH 7,4. Перед скринингом осуществляли подготовку лигандов с использованием модулей Epik и MacroModel с аналогичными параметрами как при проведении фармакофорного моделирования. Дополнительно при помощи модуля Qikprop проводили исключение из базы данных соединений, не удовлетворяющих «правилу пяти» Липинского. Соединение считали активным, если для него характерно совпадение хотя бы 4 из 5 признаков фармакофорной модели.

*Оценка фармакокинетических параметров.* Для определения профиля фармакокинетических параметров применяли онлайн-ресурс ADMETlab 3.0 [14].

Для оценки свойств соединений, выявленных в результате фармакофорного скрининга, применяли параметры ADMET (A (absorbtion) – абсорбция, D (distribution) – распределение, M (metabolism) – метаболизм, E (excretion) – экскреция, T (toxicity) – токсичность).

При оценке абсорбции химических соединений использовали параметры: Caco-2 проницаемость, PAMPA, ингибитор Р-гликопротеина, HIA,  $F_{30\%}$ . Параметр Caco-2 проницаемости характеризует всасывание потенциального препарата в желудочно-кишечном тракте. Параметр PAMPA позволяет прогнозировать характеристики проникновения и всасывания, расчет которого основан на моделировании пассивной диффузионной абсорбции. Значение показателя ингибирования Р-гликопротеина определяет лекарственные взаимодействия. Показатель HIA используется как альтернативный параметру Caco-2 проницаемость индикатор биодоступности при пероральном приеме. Значение показателя  $F_{30\%}$  характеризует фракцию перорально назначенного вещества, которая достигла системного кровотока, т. е. его биодоступность.

Для оценки распределения потенциального лекарственного препарата применяли параметры: ингибитор белка BCRP, ингибитор белков OATP1B1/B3, показатель связывания с белками плазмы (PPB), объем распределения (VDss), показатель проникновения через гематоэнцефалический барьер (BBB). Показатель ингибирования BCRP (белок устойчивости к раку молочной железы) определяет лекарственную устойчивость вещества к противоопухолевым препаратам. Ингибирование белков OATP1B1 и OATP1B3 может приводить к лекарственному взаимодействию. Показатель PPB напрямую влияет на биодоступность вещества: чем меньше значение

РРВ, тем выше биодоступность. Объем распределения является фундаментальным фармакокинетическим параметром и показывает, насколько эффективно молекула распределяется в организме. Значение показателя ВВВ необходимо, чтобы исключить побочные эффекты со стороны центральной нервной системы.

При оценке метаболизма химических соединений рассмотрены показатели влияния на изоферменты CYP1A2, CYP3A4, CYP2C9, CYP2C19, CYP2D6, CYP2B6, обеспечивающие метаболическую трансформацию в печени. Взаимодействие с данными изоферментами может приводить к образованию токсичных метаболитов и возникновению нежелательных лекарственных взаимодействий.

Для изучения экскреции рассматриваемых веществ оценивали показатели клиренса (CL) и периода полувыведения ( $T_{1/2}$ ). Данные показатели позволяют идентифицировать молекулы с длительным, промежуточным и коротким периодом полувыведения и определить вещества, способные вызывать кумулятивный эффект.

Изучение токсичности соединений оценивали по параметрам гематотоксичность, нефротоксичность, кардиотоксичность (блокаторы hERG), гепатотоксичность (показатель DILI), мутагенность (показатель AMES), острая пероральная токсичность (показатель ROAT), канцерогенность. Показатели токсичности оценивали в единицах от 0 до 1, где 0 – вещество нетоксично, а 1 – высокотоксичное вещество.

**Молекулярный докинг.** Для гибкого молекулярного докинга применяли программу Schrodinger (модули Glide, LigPrep, MacroModel, Epik, Prime). В качестве рецептора использовали структуру CYP17A1 человека (идентификационный код в Банке данных белков 3RUK; <https://www.rcsb.org>). В качестве лигандов использовали 10 структур соединений с наилучшими фармакокинетическими параметрами, которые предварительно подготавливали через модули LigPrep, MacroModel, Epik. Ячейка для докинга включала активный центр фермента со следующими параметрами:  $\Delta X = 18$ ,  $\Delta Y = 45$ ,  $\Delta Z = 19$  с центром в точках :  $\Delta X = 33$ ,  $\Delta Y = -17$ ,  $\Delta Z = 37$ . Докинг осуществляли с использованием XP алгоритма модуля Glide с повышенной точностью при параметрах силового поля OPLS4, pH =  $7,4 \pm 0,5$ . Значения свободной энергии связывания лигандов с CYP17A1 человека рассчитывали при помощи модуля Prime/MM-GBSA, который позволяет определить вклад энергий различных связей (ван-дер-ваальсовых, ковалентных, водородных, липофильных и т. д.) в значение общей свободной энергии связывания.

**Результаты и их обсуждение.** *Фармакофорное моделирование на основе структуры лиганда CYP17A1.* При конвертировании 2D структур в 3D из исходной базы данных, содержащей 23 активных соединения, было получено 900 структур соединений с учетом стереоизомеров, таутомеров и конформеров, стабильных при pH 7,4. Среднее количество конформеров для каждой молекулы составило 39 (от 26 до 50 конформаций для одного соединения). Количество фармакофорных признаков для активных химических соединений представлено в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Количество фармакофорных признаков для активных соединений

Table 1. Number of pharmacophore features for active compounds

Фармакофорный признак Pharmacophore feature	Количество Number
Акцепторы водородной связи	От 2 до 4
Доноры водородной связи	От 3 до 5
Катионные центры	1
Анионные центры	Отсутствуют
Гидрофобные группы	От 3 до 15
Ароматические циклы	3

Построенная общая фармакофорная модель с наилучшими скоринговыми показателями представлена на рис. 1 и включает в себя два гидрофобных участка (зеленые сферы), два ароматических цикла (оранжевые кольца) и один донор водородной связи (синяя сфера). Найденные фармакофорные признаки лигандов, используемые для построения модели, принимают непо-

средственное участие в связывании с активным центром фермента и обуславливают ингибирование 17,20-лиазной активности CYP17A1 человека.

*Фармакофорный скрининг соединений.* В результате фармакофорного скрининга из базы данных 2,5 миллионов структур ChEMBL выявлено 498 соединений, удовлетворяющих фармакофорной модели. Причем для 49 соединений наблюдается полное соответствие фармакофорной модели (совпадение 5 признаков), а для 449 соединений характерно соответствие 4 фармакофорным признакам. Из дальнейшей оценки исключено 90 структур, имеющих низкую синтетическую доступность. В итоге ADMET анализу подвергали 408 структур химических соединений.

*Оценка фармакокинетических параметров.* В ходе ADMET анализа из дальнейшего рассмотрения исключали соединения, для которых характерны неудовлетворительные показатели абсорбции (показатель Caco-2 проницаемости  $< -5,15 \log \text{ см/с}$ , низкое значение биодоступности  $F < 30 \%$ ), неудовлетворительные показатели распределения (высокое связывание с белками плазмы  $> 90 \%$ , значение показателя проникновения через гематоэнцефалический барьер  $\log \text{ BBB} \geq -1$ ) и неудовлетворительные показатели, характеризующие токсичность (блокаторы hERG – показатель более 0,5 единиц; показатель мутагенности AMES более 0,7 единиц; показатель острой пероральной токсичности для крыс более 0,5 единиц). Исходя из вышеперечисленных параметров, из 408 синтетически доступных соединений, удовлетворяющих фармакофорной модели, выбрано 10 соединений с наилучшими фармакокинетическими параметрами. Химические структуры и названия согласно систематической номенклатуре ИЮПАК для соединений-лидеров отображены на рис. 2. Фармакокинетические параметры для данных соединений представлены в табл. 2.

Оценивая фармакокинетические параметры, можно сделать вывод о том, что по абсорбции показатели полного соответствия характерны для соединений D, G и J, а для структур C, H, I отмечено по одному частично соответствующему показателю. Соединение A является ингибитором Р-гликопротеина, что говорит о предположительно высокой вероятности его межлекарственных взаимодействий. Соединения B, E, F не удовлетворяют параметрам пассивной диффузной абсорбции, оцениваемой по методу параллельного анализа проницаемости искусственных мембран, однако для данных соединений характерны положительные характеристики Caco-2, HIA и  $F_{30\%}$ , что позволяет рассмотреть их в качестве кандидатов для дальнейшего изучения.

Положительные и удовлетворительные характеристики распределения наблюдаются для соединений A, C, D, E, G, I, J. Для соединения H характерен высокий показатель проникновения через гематоэнцефалический барьер, что может обуславливать побочные эффекты со стороны центральной нервной системы; также соединение H является ингибитором белков-транспортёров OATP1B1 и OATP1B3, что может приводить к межлекарственным взаимодействиям. Соединение J ингибирует белок BCPR, что может способствовать невосприимчивости к проводимой противоопухолевой терапии, также соединение J незначительно ингибирует транспортеры OATP1B1 и OATP1B3, что может характеризовать его взаимодействия с другими веществами. Ингибирование OATP1B1 и OATP1B3 свойственно и для соединений B, C, F, G, причем для C и G – незначительное.

Показатели, характеризующие метаболизм соединений A–J, в целом удовлетворительные, однако для некоторых из соединений имеются незначительные взаимодействия с изоферментами биотрансформации. В частности, ингибирование CYP3A4 и CYP2C9 характерно для соединений A, D, G, H; ингибирование CYP1A2 и CYP2C19 – для соединения H; ингибирование CYP2D6 – для соединений A и C.

При оценке показателей токсичности можно сделать вывод о том, что все соединения, кроме H (показатель нефротоксичности превышает допустимую норму), имеют положительные или удовлетворительные характеристики, причем для соединения G все показатели положительные.

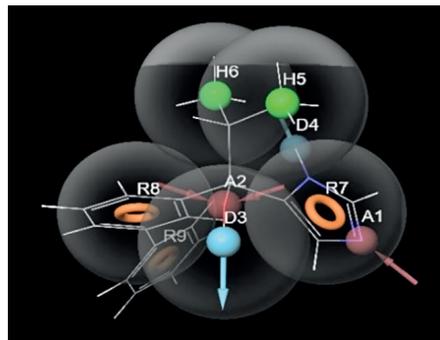


Рис. 1. Общая фармакофорная модель на основе структуры лиганда CYP17A1

Fig. 1. General pharmacophore model based on the structure of CYP17A1 ligand

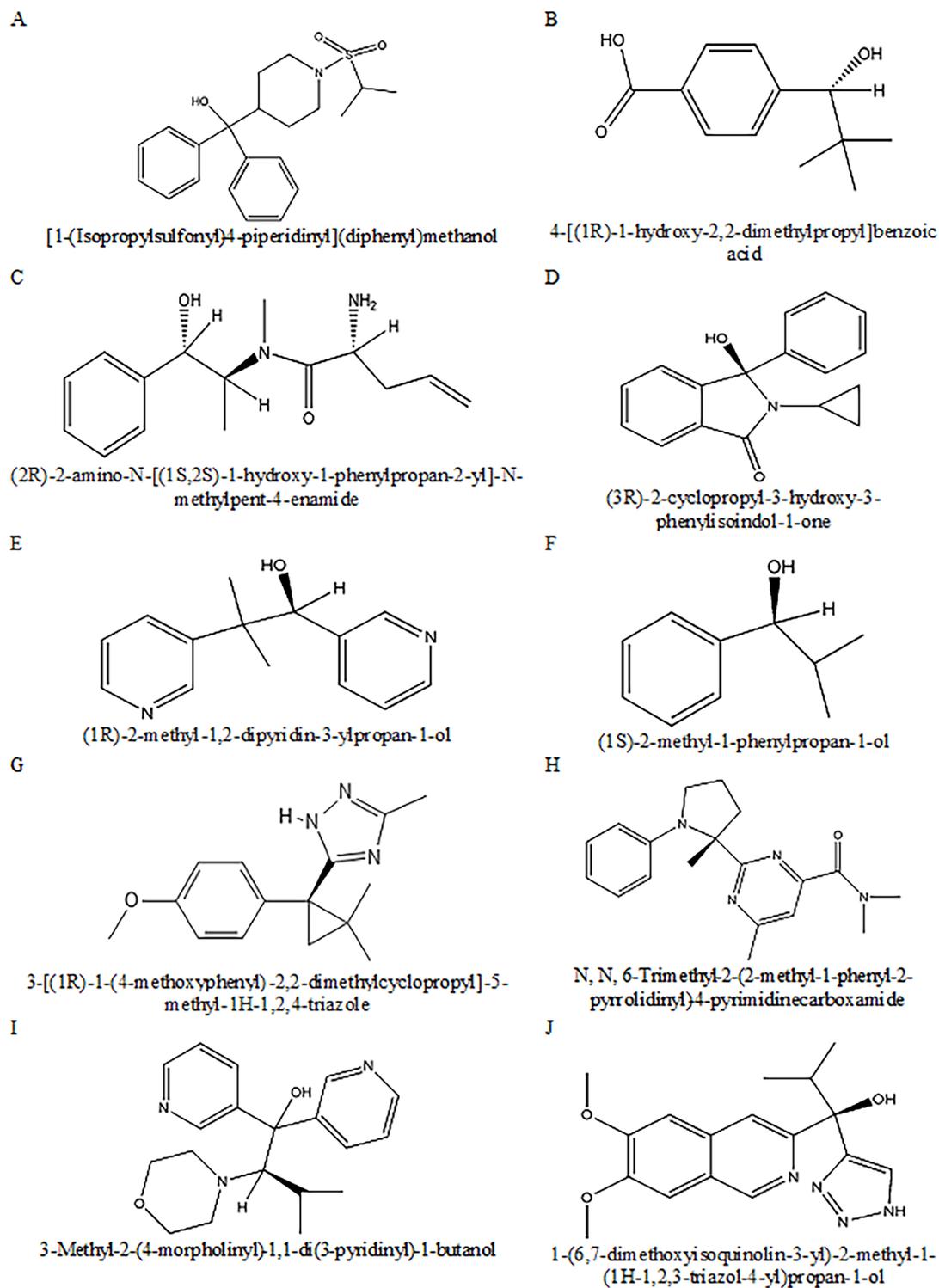


Рис. 2. Химические структуры идентифицированных соединений-лидеров с названиями согласно систематической номенклатуре ИЮПАК

Fig. 2. Chemical structures of identified lead compounds with names according to the IUPAC systematic nomenclature

Т а б л и ц а 2. Фармакокинетические параметры ADMET для соединений А–J

Table 2. ADMET pharmacokinetic parameters for compounds A–J

Соединение Compound	Показатель всасывания Suction indicator						
	Проницаемость Caco-2 Permeability Caco-2	РАМРА	Ингибитор Р-гликопротеина P-glycoprotein inhibitor	НИА	F <sub>30%</sub>		
A	-4,731	Удовлетворительный	Да	Соответствует	+		
B	-4,951	Не соответствует	Нет	Соответствует	+		
C	-4,886	Удовлетворительный	Нет	Соответствует	+		
D	-4,448	Соответствует	Нет	Соответствует	+		
E	-4,63	Не соответствует	Нет	Соответствует	+		
F	-4,799	Не соответствует	Незначительно	Соответствует	+		
G	-4,615	Соответствует	Нет	Соответствует	+		
H	-4,692	Соответствует	Незначительно	Соответствует	+		
I	-4,693	Удовлетворительный	Нет	Соответствует	+		
J	-5,122	Соответствует	Нет	Соответствует	+		
Соединение Compound	Показатель распределения Distribution indicator					Показатель экскреции Excretion indicator	
	Ингибитор BCPR Inhibitor BCPR	Ингибитор белков OATP1B1/B3 Protein inhibitor OATP1B1/B3	PPB	VD <sub>ss</sub>	BBB	CL	T <sub>1/2</sub>
A	Нет	Нет	85,2 %	0,209	Нет	6,478	0,951 Короткий
B	Нет	Да	82,8 %	0,435	Нет	3,286	1,883 Средний
C	Нет	Незначительно	40,5 %	0,043	Нет	7,963	1,262 Средний
D	Нет	Нет	90,0 %	0,447	Незначительно	0,199	1,602 Средний
E	Нет	Нет	72,8 %	0,26	Нет	9,17	1,237 Средний
F	Нет	Да	79,9 %	0,351	Незначительно	11,296	1,625 Средний
G	Нет	Незначительно	87,1 %	0,178	Незначительно	9,337	0,641 Короткий
H	Нет	Да	71,7 %	0,165	Да	6,108	0,451 Короткий
I	Нет	Нет	35,2 %	0,063	Незначительно	9,24	0,925 Короткий
J	Да	Незначительно	89,4 %	0,101	Нет	8,146	1,884 Средний
Соединение Compound	Показатель метаболизма Metabolic indicator						
	Ингибитор CYP1A2 Inhibitor CYP1A2	Ингибитор CYP3A4 Inhibitor CYP3A4	Ингибитор CYP2C9 Inhibitor CYP2C9	Ингибитор CYP2C19 Inhibitor CYP2C19	Ингибитор CYP2D6 Inhibitor CYP2D6	Ингибитор CYP2B6 Inhibitor CYP2B6	
A	Нет	Да	Да	Нет	Да	Нет	
B	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	
C	Нет	Нет	Нет	Нет	Да	Нет	
D	Нет	Да	Да	Нет	Нет	Нет	
E	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	
F	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	
G	Нет	Да	Да	Нет	Нет	Нет	
H	Да	Да	Да	Да	Нет	Нет	
I	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	
J	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	Нет	

Соединение Compound	Показатель токсичности Toxicity indicator						
	Блокаторы ERG Blockers ERG	DILI	AMES	ROAT	Гематотоксичность Hematotoxicity	Канцерогенность Carcinogenicity	Нефротоксичность Nephrotoxicity
A	0,254	0,347	0,059	0,222	0,071	0,116	0,254
B	0,057	0,122	0,252	0,191	0,117	0,442	0,627
C	0,071	0,041	0,301	0,118	0,178	0,12	0,428
D	0,153	0,137	0,479	0,438	0,186	0,437	0,395
E	0,153	0,137	0,479	0,438	0,053	0,437	0,395
F	0,151	0,09	0,112	0,39	0,048	0,409	0,256
G	0,107	0,029	0,226	0,199	0,077	0,23	0,154
H	0,111	0,375	0,225	0,489	0,271	0,413	0,792
I	0,15	0,172	0,109	0,355	0,037	0,419	0,425
J	0,151	0,448	0,209	0,398	0,221	0,361	0,408

Согласно анализу фармакокинетических параметров наилучшие показатели характерны для соединений C, D, G и I (все характеристики положительные или удовлетворительные). Причем соединение I лидирует, так как у него отсутствуют взаимодействия с изоферментами биотрансформации. Также представляет интерес рассмотрение соединения E и J ввиду некоторых не критичных несоответствий по параметрам всасывания и распределения.

**Молекулярный докинг.** В табл. 3 представлены значения свободной энергии связывания с учетом вклада энергий ковалентных, водородных, липофильных, ван-дер-ваальсовых и электростатических взаимодействий, а также энергии десольватации для соединений A–J. Эффективность межмолекулярных взаимодействий, реализующихся в моделях комплексов белок–лиганд, подтверждается низкими значениями свободной энергии связывания для структур C, E, G, H, J. Значения свободной энергии связывания для вышеуказанных соединений меньше, чем значение свободной энергии связывания для абиратерона, полученное экспериментально (–12,8 ккал/моль) [15], что свидетельствует о высоком средстве данных соединений к активному центру СYP17A1.

Т а б л и ц а 3. Значения свободной энергии связывания с учетом вклада энергий ковалентных, водородных, липофильных, ван-дер-ваальсовых и электростатических взаимодействий, а также энергии десольватации для соединений A–J

T a b l e 3. The values of the free energy of binding with consideration of the contribution of the energies of covalent, hydrogen, lipophilic, van der Waals and electrostatic interactions, as well as the energy of desolvation for compounds A–J

Лиганд Ligand	$\Delta G_{\text{связ}}^{\text{связ}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{bond}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{ковал}}^{\text{ковал}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{coval}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{водородн}}^{\text{водородн}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{hydrogen}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{липофиль}}^{\text{липофиль}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{lipophilic}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{ван-дер-ваальс}}^{\text{ван-дер-ваальс}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{van der Waals}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{электрост}}^{\text{электрост}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{electrost}}, \text{kcal/mol}$	$\Delta G_{\text{десольват}}^{\text{десольват}}, \text{ккал/моль}$ $\Delta G_{\text{desolvate}}, \text{kcal/mol}$
A	–5,6	7,84	–0,27	–29,59	–23,32	1,01	41,05
B	26,68	1,03	0	–19,79	–27,69	52,95	20,4
C	–18,67	2,5	–0,38	–23,52	–43,44	16,17	32,83
D	6,35	8,2	–0,06	–28,29	–27,44	–12,19	68,92
E	–17,58	0,42	–0,03	–23,46	–33,39	–12,24	53,95
F	8,41	3,2	0	–18,73	–26,19	–11,08	61,19
G	–15,28	1,25	0	–23,49	–31,27	–7,6	46,73
H	–16,86	3,88	0	–26,21	–48,74	–7,56	63,19
I	23,53	11,43	0	–30,08	–19,98	–15,09	79,01
J	–13,38	8,63	–0,12	–17,93	–36,38	–32,37	67,37

На рис. 3 указаны аминокислотные остатки СYP17A1, которые участвуют в межмолекулярных взаимодействиях, реализующихся в структурных комплексах лигандов C, E, G, H, J с активным центром фермента. Анализ рис. 3 показывает, что эти лиганды образуют ван-дер-ваальсовые и липофильные контакты с функционально важными остатками каталитического центра СYP17A1

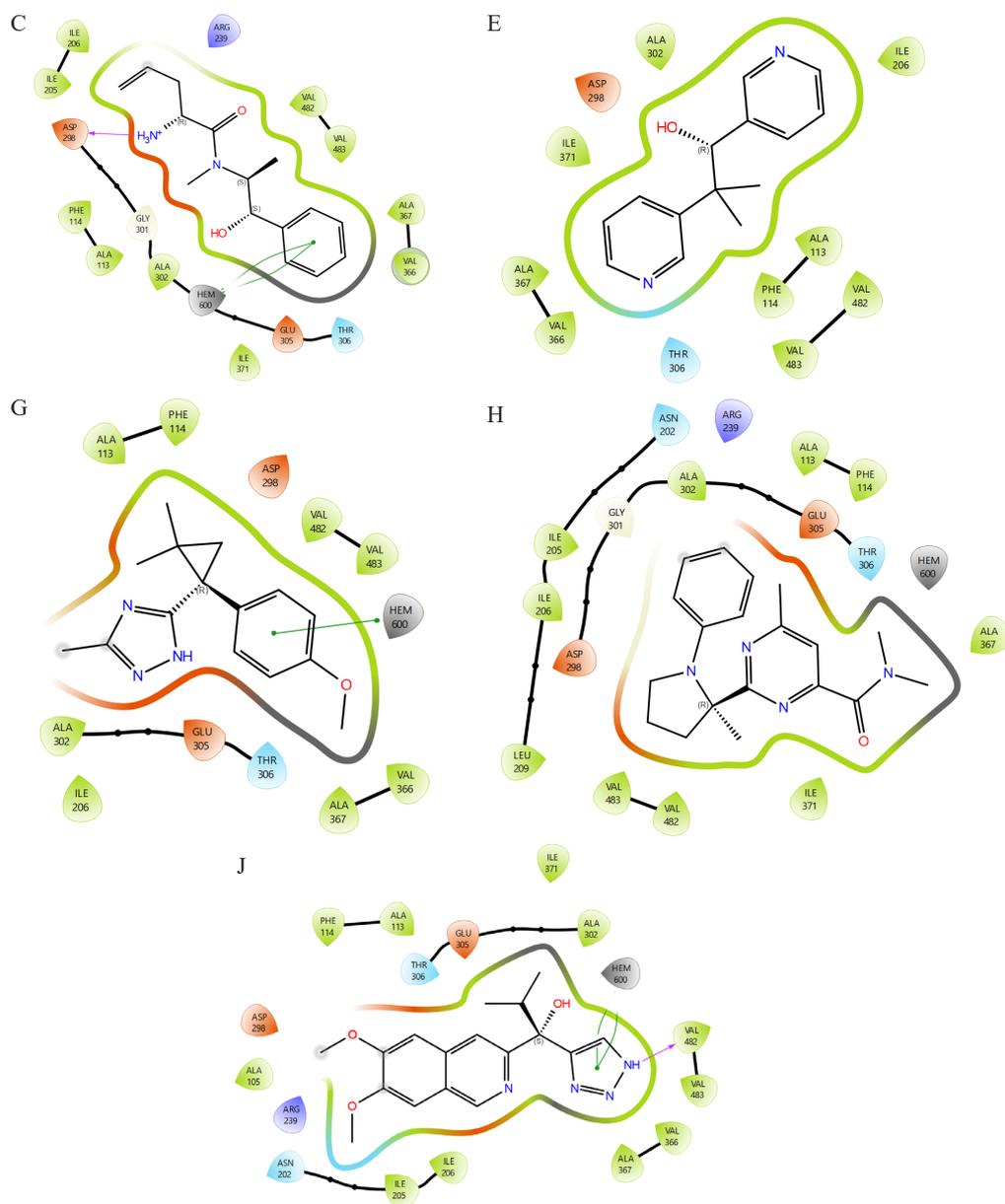


Рис. 3. Схематичное отображение соединений C, E, G, H, J, взаимодействующих с аминокислотными остатками и гем-группой активного центра CYP17A1 человека. Светло-зеленым цветом отображены гидрофобные аминокислоты, голубым цветом представлены полярные аминокислоты, образующие ван-дер-ваальсовы и липофильные контакты. Красным цветом обозначены положительно заряженные полярные аминокислотные остатки фермента, а синим цветом – отрицательно заряженные, которые обуславливают электростатические взаимодействия. Зеленой линией (линиями) представлен  $\pi$ -стэкинг с гем-группой фермента, фиолетовой стрелкой – водородная связь

Fig. 3. Schematic representation of compounds C, E, G, H, J, interacting with amino acid residues and heme-group of the active center of human CYP17A1. Light-green color shows hydrophobic amino acids, blue color represents polar amino acids that form van der Waals and lipophilic contacts. The red color indicates the positively charged polar amino acid residues of the enzyme, and the blue color indicates the negatively charged ones, which cause electrostatic interactions. Green line(s) represent(s)  $\pi$ -stacking with heme-group of enzyme, purple arrow – hydrogen bond

человека, такими как Asn-202 (соединения H, J), Val-482 (соединения C, E, H, J), Ala-367 (соединения C, E, G, H, J), Ile-371 (соединения C, E, H, J), Thr-306 (соединения C, E, G, J), Phe 114 (соединения C, E, G, H, J).

Полярные аминокислотные остатки активного центра фермента, такие как Asp-298 (соединения C, E, G, H, J), Arg-239 (соединения C, H, J), Glu-305 (соединения C, G, H, J) вносят вклад в электростатические взаимодействия между лигандом и ферментом,  $\pi$ -сопряженные системы

соединений С, G, J образуют  $\pi$ -стэкинг с гем-группой активного центра, а азот триазольного кольца соединения J участвует в образовании водородной связи с Val-482. В свою очередь, азот аминогруппы соединения С образует водородную связь с Asp-298 активного центра фермента. Химическое сродство соединений С, E, G, H с CYP17A1 обусловлено, главным образом, ван-дер-ваальсовыми и липофильными взаимодействиями, а соединения J – ван-дер-ваальсовыми и электростатическими контактами.

Подводя итоги по анализу фармакокинетических параметров и проведенному молекулярному докингу, можно сделать вывод о том, наилучшие показатели как по критериям ADMET, так и по значениям свободной энергии связывания характерны для соединений С, E, G, J.

Сравнение взаимодействия неселективного ингибитора абиратерона и потенциального селективного ингибитора 17,20-лиазы человека – соединения С, для которого характерно наименьшее значение свободной энергии связывания с CYP17A1 человека, представлено на рис. 4.

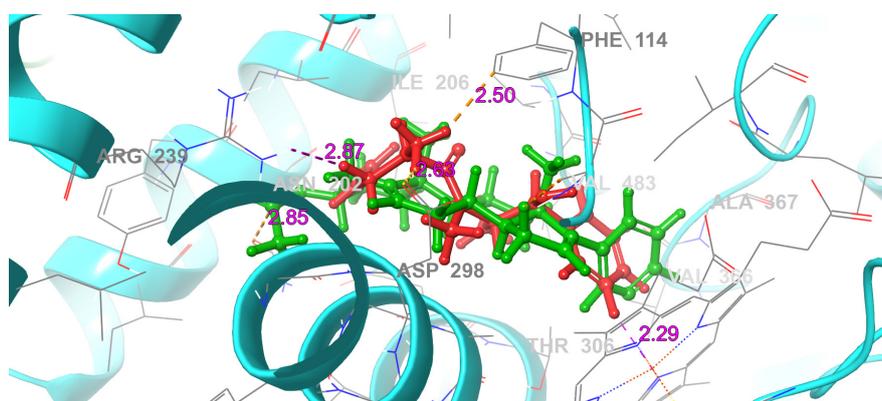


Рис. 4. Взаимодействие лигандов с CYP17A1 человека (PDB ID: 3RUK) с указанием аминокислотных остатков, принимающих участие в связывании и межатомных расстояний (Å) между атомами лиганда и фермента. Абиратерон обозначен зеленым цветом, соединение С – красным цветом

Fig. 4. Interaction of ligands with human CYP17A1 with the participation of amino acids, involved in binding and interatomic distances (Å) between the atoms of the ligand and the enzyme. Abiraterone is shown in green, compound C is shown in red

Анализ рис. 4 показывает, что для абиратерона характерны в большей степени взаимодействия с Asn-202 (2,85 Å) фермента за счет гидроксильной группы лиганда, а также с атомом железа гем-группы CYP17A1 (2,04 Å) посредством  $\pi$ -стэкинга с пиридиновым кольцом, и незначительное межмолекулярное взаимодействие с Asp-298 (3,71 Å). В свою очередь, для идентифицированного соединения С наблюдается взаимодействие его аминогруппы с Asp-298 (2,63 Å) посредством водородной связи, межмолекулярные взаимодействия с Arg-239 (2,87 Å), ван-дер-ваальсовы и липофильные взаимодействия с Phe-114 (2,50 Å), а также  $\pi$ -стэкинг с гем-группой за счет бензольного кольца соединения С (2,29 Å). Таким образом, можно предположить, что связывание с аминокислотными остатками Asp-298, Arg-239, Phe-114 обуславливает ингибирование 17,20-лиазной активности CYP17A1. Также стоит отметить, что взаимодействие с Asn-202 в большей степени влияет на ингибирование 17 $\alpha$ -гидроксилазной активности, но, с высокой вероятностью, не участвует в ингибировании 17,20-лиазной.

**Заключение.** В проведенной работе получена фармакофорная модель на основе структуры лиганда CYP17A1 человека. В ходе фармакофорного скрининга и оценки фармакокинетических параметров из 2,5 миллионов соединений выявлено 10 химических структур, которые соответствуют фармакофорной модели, обладают синтетической доступностью и приемлемыми фармакокинетическими показателями. Данные о величинах энергии связывания идентифицированных соединений с CYP17A1, полученные методом молекулярного докинга, указывают на высокое сродство соединений С, E, G, H, J к активному центру фермента. Связывание данных химических структур с CYP17A1 обусловлено ван-дер-ваальсовыми, липофильными, электростатическими и межмолекулярными водородными взаимодействиями с аминокислотными остатками

активного центра и  $\pi$ -стэкингом с гем-группой фермента. Оценена возможность влияния аминокислотных остатков Asp-298, Arg-239, Phe-114 и Asn-202 фермента CYP17A1 человека на реализацию ингибирования его 17,20-лиазной активности. В совокупности полученные данные дают основания предполагать, что соединения С, Е, G, J удовлетворяют как по фармакокинетическим параметрам, так и имеют высокую аффинность связывания с CYP17A1. Таким образом, химические соединения С, Е, G, J можно считать перспективными для тестирования *in vitro* и *in vivo*. Полученные результаты будут использованы для разработки новых противоопухолевых препаратов с минимальными побочными эффектами для лечения рака простаты, терапевтическое действие которых основано на ингибировании 17,20-лиазной активности CYP17A1.

### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Non-steroidal CYP17A1 Inhibitors: Discovery and Assessment / T. Wrobel, F. S. Jorgensen, A. V. Pandey [et al.] // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2023. – Vol. 66, N 10. – P. 6542–6566. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.3c00442>
2. Prospective computational design and *in vitro* bio-analytical tests of new chemical entities as potential selective CYP17A1 lyase inhibitors / N. J. Gumede, W. Nxumalo, K. Bisetty [et al.] // *Bioorganic Chemistry*. – 2020. – Vol. 94. – Art. 103462. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2019.103462>
3. Рак предстательной железы: лечение и диагностика // Республиканский научно-практический центр онкологии и медицинской радиологии имени Н. Н. Александрова. – URL: <https://omr.by/lechenie-opukholej/urologicheskie-opukholi/rak-predstatelnoj-zhelezy> (дата обращения: 11.06.2024).
4. Bird, I. M. The hunt for a selective 17,20 lyase inhibitors: learning lessons from nature / I. M. Bird, D. H. Abbott // *Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology*. – 2016. – Vol. 163. – P. 136–146. <https://doi.org/10.1016/j.jsbmb.2016.04.021>
5. Promising tools in prostate cancer research: selective non-steroidal cytochrome P450 17A1 inhibitors / S. Bonomo, C. H. Hansen, E. M. Petrunak [et al.] // *Scientific Reports*. – 2016. – Vol. 6. – Art. 29468. <https://doi.org/10.1038/srep29468>
6. Structural and functional evaluation of clinically relevant inhibitors of steroidogenic cytochrome P450 17A1 / E. M. Petrunak, S. A. Rogers, J. Aubé, E. E. Scott // *Drug Metabolism and Disposition*. – 2017. – Vol. 45, N 6. – P. 635–645. <https://doi.org/10.1124/dmd.117.075317>
7. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. – Минск, 2023. – 139 с.
8. Pharmacophore modeling and its applications / R. Tyagi, A. Singh, K. Chaudhary, M. Yadav // *Bioinformatics*. – 2022. – Vol. 1. – P. 269–289. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-89775-4.00009-2>
9. C-(17,20)-lyase inhibitors. Part 2: design, synthesis and structure-activity relationships of (2-naphthylmethyl)-1H-imidazoles as novel C-(17,20)-lyase inhibitors / N. Matsunaga, T. Kaku, A. Ojida [et al.] // *Bioorganic and Medicinal Chemistry*. – 2004. – Vol. 12, N 16. – P. 4313–4336. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.06.016>
10. 17,20-Lyase inhibitors. Part 4: Design, synthesis and structure-activity relationships of naphthylmethylimidazole derivatives as novel 17,20-lyase inhibitors / T. Kaku, N. Matsunaga, A. Ojida [et al.] // *Bioorganic and Medicinal Chemistry*. – 2011. – Vol. 19, N 5. – P. 1751–1770. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.01.017>
11. Pharmacophore model-based virtual screening workflow for discovery of inhibitors targeting *Plasmodium falciparum* Hsp90 / O. Mafethe, T. Ntseane, T. H. Dongola [et al.] // *ACS Omega*. – 2023. – Vol. 8, N 41. – P. 38220–38232. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c04494>
12. Pharmacophore modeling and 3D QSAR analysis of isothiazolidinedione derivatives as PTP1B inhibitors / G. S. Deora, P. Joshi, V. Rathore [et al.] // *Medicinal Chemistry Research*. – 2012. – Vol. 22. – P. 3478–3484. <https://doi.org/10.1007/s00044-012-0349-7>
13. 3D-QSAR pharmacophore modeling and *in silico* screening of phospholipase A2 $\alpha$  inhibitors / S. V. Jain, M. Ghate, K. Bhadoriya [et al.] // *Medicinal Chemistry Research*. – 2012. – Vol. 22. – P. 3096–3108. <https://doi.org/10.1007/s00044-012-0316-3>
14. ADMETlab 3.0. – URL: <https://admetlab3.scbdd.com> (date of access: 17.06.2024).
15. Slow-, tight-binding inhibition of CYP17A1 by abiraterone redefines its kinetic selectivity and dosing regimen / E. Cheong, P. C. Nair, R. W. Y. Neo [et al.] // *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*. – 2020. – Vol. 374, N 3. – P. 438–451. <https://doi.org/10.1124/jpet.120.265868>

### References

1. Wrobel T., Jorgensen F. S., Pandey A. V., Grudzinska A., Sharma K., Yakubu J., Bjorkling F. Non-steroidal CYP17A1 inhibitors: discovery and assessment. *Journal of Medicinal Chemistry*, 2023, vol. 66, no. 10, pp. 6542–6566. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.3c00442>
2. Gumede N. J., Nxumalo W., Bisetty K., Gilbert L. E., Medina-Hernandez M. J., Sagrado S. Prospective computational design and *in vitro* bio-analytical tests of new chemical entities as potential selective CYP17A1 lyase inhibitors. *Bioorganic Chemistry*, 2020, vol. 94, art. 103462. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2019.103462>
3. Prostate cancer: treatment and diagnosis. *N. N. Alexandrov National Cancer Centre of Belarus*. URL: <https://omr.by/lechenie-opukholej/urologicheskie-opukholi/rak-predstatelnoj-zhelezy> (accessed 11 June 2024) (in Russian).
4. Bird I. M., Abbott D. H. The hunt for a selective 17,20 lyase inhibitors: learning lessons from nature. *Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology*, 2016, vol. 163, pp. 136–146. <https://doi.org/10.1016/j.jsbmb.2016.04.021>

5. Bonomo S., Hansen C. H., Petrunak E. M., Scott E. E., Styrisshave B., Jørgensen F. S., Olsen L. Promising tools in prostate cancer research: selective non-steroidal cytochrome P450 17A1 inhibitors. *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, no. 1, art. 29468. <https://doi.org/10.1038/srep29468>

6. Petrunak E. M., Rogers S. A., Aubé J., Scott E. E. Structural and functional evaluation of clinically relevant inhibitors of steroidogenic cytochrome P450 17A1. *Drug Metabolism and Disposition*, 2017, vol. 45, no. 6, pp. 635–645. <https://doi.org/10.1124/dmd.117.075317>

7. Dzichenka Y. V. *Computer Modeling of the Structure and Reactivity of Molecules*. Minsk, 2023. 139 p. (in Russian).

8. Tyagi R., Singh A., Chaudhary K. K., Yadav M. Pharmacophore modeling and its applications. *Bioinformatics*, 2022, vol. 1, pp. 269–289. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-89775-4.00009-2>

9. Matsunaga N., Kaku T., Ojida A., Tanaka T., Hara T., Yamaoka M., Kusaka M., Tasaka A. C(17,20)-lyase inhibitors. Part 2: design, synthesis and structure-activity relationships of (2-naphthylmethyl)-1H-imidazoles as novel C(17,20)-lyase inhibitors. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 2004, vol. 12, no. 16, pp. 4313–4336. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.06.016>

10. Kaku T., Matsunaga N., Ojida A., Tanaka T., Hara T., Yamaoka M., Kusaka M., Tasaka A. 17,20-Lyase inhibitors. Part 4: design, synthesis and structure-activity relationships of naphthylmethylimidazole derivatives as novel 17,20-lyase inhibitors. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 2011, vol. 19, no. 5, pp. 1751–1770. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.01.017>

11. Mafethe O., Ntseane T., Dongola T. H., Shonhai A., Gumede N. J., Mokoena F. Pharmacophore model-based virtual screening workflow for discovery of inhibitors targeting *Plasmodium falciparum* Hsp90. *ACS Omega*, 2023, vol. 8, no. 41, pp. 38220–38232. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c04494>

12. Deora G. S., Joshi P., Rathore V., Kumar K. L., Ohlyan R., Kandale A. Pharmacophore modeling and 3D QSAR analysis of isothiazolidinedione derivatives as PTP1B inhibitors. *Medicinal Chemistry Research*, 2012, vol. 22, pp. 3478–3484. <https://doi.org/10.1007/s00044-012-0349-7>

13. Jain S. V., Ghate M., Bhadoriya K. S., Bari S. B., Sugandhi G., Mandwal P. 3D-QSAR pharmacophore modeling and *in silico* screening of phospholipase A<sub>2α</sub> inhibitors. *Medicinal Chemistry Research*, 2012, vol. 22, pp. 3096–3108. <https://doi.org/10.1007/s00044-012-0316-3>

14. *ADMETlab 3.0*. Available at: <https://admetlab3.scbdd.com> (accessed 17 June 2024).

15. Cheong E. J. Y., Nair P. C., Neo R. W. Y., Tu H. T., Lin F., Chiong E., Esuvaranathan K., Fan H., Szmulewitz R. Z., Peer C. J., Figg W. D., Chai C. L. L., Miners J. O., Chan E. C. Y. Slow-, tight-binding inhibition of CYP17A1 by abiraterone redefines its kinetic selectivity and dosing regimen. *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 2020, vol. 374, no. 3, pp. 438–451. <https://doi.org/10.1124/jpet.120.265868>

### Информация об авторах

*Шаладонова Марина Игоревна* – аспирант, мл. науч. сотрудник. Институт биоорганической химии НАН Беларуси (ул. Купревича, 5/2, 220084, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [m.shaladonova@gmail.com](mailto:m.shaladonova@gmail.com).

*Усанов Сергей Александрович* – член-корреспондент, д-р хим. наук, профессор. Институт биоорганической химии НАН Беларуси (ул. Купревича, 5/2, 220084, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [usanov@iboch.by](mailto:usanov@iboch.by).

### Information about the authors

*Shaladonova Marina I.* – Postgraduate Student, Junior Researcher. Institute of Bioorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (5/2, Kuprevich Str., 220084, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [m.shaladonova@gmail.com](mailto:m.shaladonova@gmail.com).

*Usanov Sergei A.* – Corresponding Member, D. Sc. (Chemistry), Professor. Institute of Bioorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (5/2, Kuprevich Str., 220084, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [usanov@iboch.by](mailto:usanov@iboch.by).

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

## БИОЛОГИЯ BIOLOGY

УДК 636.4.033:575.174.015.3  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-129-136>

Поступило в редакцию 11.07.2024  
Received 11.07.2024

**В. Н. Кипень, Е. В. Снытков, М. Е. Михайлова, член-корреспондент Р. И. Шейко**

*Институт генетики и цитологии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*

### АНАЛИЗ ОДНОНУКЛЕОТИДНОГО ПОЛИМОРФИЗМА С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ KASP ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОРОД ДОМАШНИХ СВИНЕЙ

**Аннотация.** Впервые в Республике Беларусь с целью дифференциации пород свиней дюрок, ландрас, йоркшир, белорусская крупная белая и белорусская мясная проведен широкомасштабный биоинформатический анализ геномов вида *Sus scrofa domesticus*, а также собственные молекулярно-генетические исследования, по результатам которых сформирован перечень полиморфных вариантов с высоким дифференцирующим потенциалом. Наиболее информативные SNP для дифференциации пород свиней – rs332196135, rs81322965, rs322056535, rs80967182, rs81333725, rs80789418, rs319844693, rs80859281, rs80855833, вошли в тест-системы. На основании статистического анализа генотипов, полученных *in silico* и с помощью технологии конкурентной аллель-специфической ПЦР, определены высокие значения точности и специфичности предложенных моделей. Разработаны методические рекомендации для быстрой и точной дифференциации пород свиней.

**Ключевые слова:** *Sus scrofa domesticus*, дюрок, ландрас, йоркшир, белорусская крупная белая, белорусская мясная, однонуклеотидный полиморфизм, дифференциация, конкурентная аллель-специфическая ПЦР, генотипирование *in silico*

**Для цитирования.** Анализ однонуклеотидного полиморфизма с применением технологии KASP для идентификации пород домашних свиней / В. Н. Кипень, Е. В. Снытков, М. Е. Михайлова, Р. И. Шейко // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 129–136. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-129-136>

**Viachaslau N. Kipen, Evgenij V. Snytkov, Mariya E. Mikhailova, Corresponding Member Ruslan I. Sheyko**

*Institute of Genetics and Cytology of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

### ANALYSIS OF SINGLE NUCLEOTIDE POLYMORPHISM USING KASP TECHNOLOGY FOR IDENTIFICATION OF DOMESTIC PIGS BREEDS

**Abstract.** For the first time in the Republic of Belarus, a large-scale bioinformatic analysis of the genomes of *Sus scrofa domesticus* species, as well as our own molecular genetic studies, was conducted in order to differentiate Duroc, Landrace, Yorkshire, Belarusian Large White, and Belarusian Meat pig breeds. As a result, a list of polymorphic variants with high differentiating potential was formed. The most informative SNPs for differentiating pig breeds are rs332196135, rs81322965, rs322056535, rs80967182, rs81333725, rs80789418, rs319844693, rs80859281, rs80855833. Based on the statistical analysis of genotypes obtained *in silico* and using competitive allele-specific PCR technology, high values of accuracy and specificity of the proposed models were determined. Methodological recommendations have been developed for the rapid and accurate differentiation of pig breeds.

**Keywords:** *Sus scrofa domesticus*, Duroc, Landrace, Yorkshire, Belarusian Large White, Belarusian Meat, single nucleotide polymorphism, differentiation, competitive allele-specific PCR, *in silico* genotyping

**For citation.** Kipen V. N., Snytkov E. V., Mikhailova M. E., Sheyko R. I. Analysis of single nucleotide polymorphism using KASP technology for identification of domestic pigs breeds. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 129–136 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-129-136>

**Введение.** Определение чистопородности сельскохозяйственных животных в системе селекции играет ключевую роль в развитии животноводства. Учитывая, что количественные характеристики обычно обусловлены множеством генов и их функциональным состоянием (полиген-

ность), выявление значимых корреляций между однонуклеотидными полиморфизмами и фенотипическими признаками может быть достигнуто лишь путем полногеномных исследований.

Определение чистопородности свиней может быть проведено с использованием маркеров двух типов – однонуклеотидных полиморфизмов (SNP, Single Nucleotide Polymorphism) и коротких tandemных повторов (STR, Short Tandem Repeat). Одним из основных преимуществ анализа с использованием STR является возможность мультиплексирования. Однако для успешной характеристики фенотипических признаков необходимо, чтобы ген, ответственный за данный признак, находился в одной и той же группе сцепления с STR. SNP-маркеры обычно более информативны в данном контексте, чем STR. Современная технология мультиплексирования SNP от компании Illumina<sup>®</sup> позволяет значительно увеличить эффективность и точность определения чистопородности свиней и других животных.

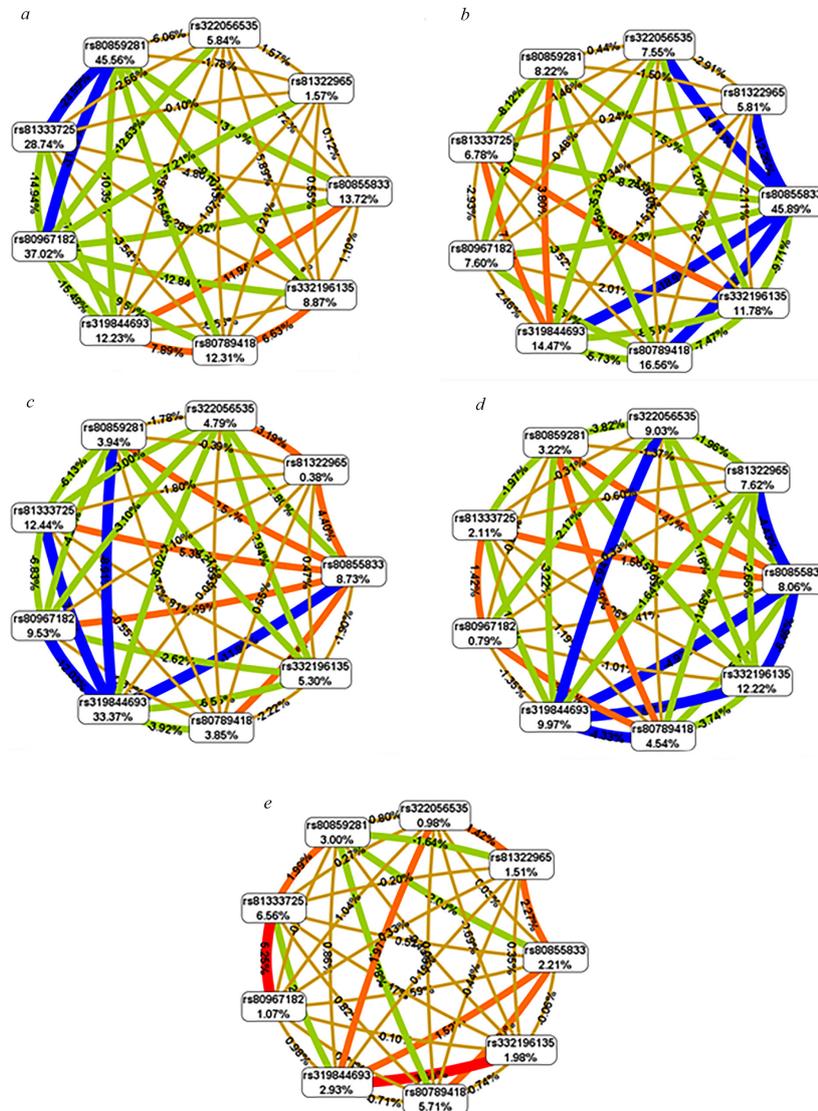
Компанией Illumina<sup>®</sup> разработан чип для полногеномного анализа SNP для животных вида *Sus scrofa* – PorcineSNP60 v2 Genotyping BeadChip, включающий в себя более 64 тыс. SNP [1]. За последние годы в научных журналах было опубликовано более 60 работ, посвященных поиску видо- и породоспецифичных SNP для вида *Sus scrofa*, в том числе с использованием Porcine BeadChip. Также SNP были исследованы в ряде работ для оценки локусов количественных признаков (QTL, Quantitative Trait Loci) или для решения задач по криминалистике [2–12]. Основной целью селекции сельскохозяйственных животных является сохранение и улучшение их породных качеств путем подбора подходящих пар для скрещивания, умелого управления линиями внутри породы и проведения межлинейных скрещиваний для достижения наилучших результатов от комбинации различных линий. Благодаря разнообразию животных в рамках одной породы и их сложной генетической структуре существует возможность достичь значительного прогресса для улучшения породы в заданном направлении. Кроме того, чистопородное разведение заводских линий направлено на обеспечение высококачественного племенного материала для производства животноводческой продукции. Многочисленные исследования подтверждают, что анализ SNP является эффективным и высокочувствительным методом выявления генетического разнообразия в породах и популяциях животных. С его помощью можно не только проверить происхождение животных, но и оценить генетические различия между разными породами, типами, стадами и группами животных.

Цель исследования – выявление SNP с высоким потенциалом дифференциации, необходимых для идентификации принадлежности образцов к определенной породе свиней, с использованием методов биоинформатики. На основании проведенного анализа предлагаются тест-системы, включающие несколько SNP, для идентификации пород свиней дюрок, ландрас, йоркшир, белорусская крупная белая и белорусская мясная.

**Материалы и методы исследования.** *Генотипирование in silico.* Генотипы *in silico* определяли с использованием оригинального программного обеспечения GENIS, написанного на языке Python3.10 [13]. Проведено для 248 особей вида *S. scrofa domesticus*, отсекуированные геномы которых представлены в базе Sequence Read Archive (SRA), номера проектов PRJNA712489, PRJNA671763, PRJNA626370, PRJNA622908, PRJNA553106, PRJNA550237, PRJNA520978, PRJNA507853, PRJNA506339, PRJNA488960, PRJNA487172, PRJNA485589, PRJNA393920, PRJNA378496, PRJNA358108, PRJNA343658, PRJNA322309, PRJNA309108, PRJNA260763, PRJNA255085, PRJEB9922, PRJEB30282, PRJEB1683. *Биологические образцы.* В исследование включены породы свиней йоркшир (ЙО), белорусская крупная белая (БКБ), белорусская мясная (БМ), дюрок (ДЮ) и ландрас (ЛА). Суммарно было проведено генетическое исследование 328 особей вида *Sus scrofa domesticus*. Образцы свиней поставлялись из селекционно-гибридных центров «Заднепровский», «Полесье-Агро» и «ЖодиноАгроПлемЭлита». *Выделение ДНК.* ДНК из образцов ушных выщипов выделяли с использованием набора ДНК-сорб-Б (Праймтех, Беларусь). *KASP-генотипирование.* Определение генотипа по SNP rs332196135 (Chr.3:118879246C>G, Sscrofa11.1, GCF\_000003025.6), rs81322965 (Chr.6:121005974A>G), rs322056535 (Chr.7:52269732A>G), rs80967182 (Chr.7:106301845A>G), rs81333725 (Chr.8:47482649G>T), rs80789418 (Chr.9:48882095A>G), rs319844693 (Chr.10:30081932A>G), rs80859281 (Chr.14:99099156C>T), rs80855833 (Chr.17:15827832G>T) осуществляли с использованием технологии конкурентной аллель-специфической ПЦР (KASP,

Kompetitive allele specific PCR с использованием KASP Assay mix (KASP by Design, KBD) и KASP Master mix (LGC Biosearch Technologies, Великобритания) в термоциклере QuantStudio 5 Real-Time PCR System (Thermo FC, США) согласно имеющимся рекомендациям. Статистический анализ данных. Дифференцирующий потенциал SNP определяли с использованием ROC-анализа в SPSS v.20.0. При наличии нижней границы асимптотического 95 %-ного доверительного интервала (ДИ) более 0,6 для параметра AUC (площадь под кривой) полиморфизм позиционировался как генетический маркер со значимым дифференцирующим потенциалом. Вероятность отнесения образца к одной из групп рассчитывали на основании логистической регрессии. Комплексную оценку дифференцирующего потенциала для совокупности SNP проводили с использованием программы MDR v. 3.0.2 [14].

**Результаты и их обсуждение.** Проведенное нами исследование включало два этапа – биоинформатический и молекулярно-генетический. На первом этапе были сформированы перечни геномов *Sus scrofa domesticus* (248 файлов) и SNP (7451 позиция в геноме). В перечень SNP вошли как ранее описанные SNP [15], так и SNP из Axiom® Porcine Genotyping Array (Affymetrix®). Часть SNP была взята из Pig Quantitative Trait Locus Database (Pig QTLdb). По результатам биоинформатического анализа выявлено, что для породы дюрок значения площади под кривой ошибок



Совокупный вклад нескольких SNP для дифференциации породности свиней: *a* – дюрок, *b* – ландрас, *c* – йоркшир, *d* – белорусская крупная белая, *e* – белорусская мясная

The cumulative contribution of several SNPs for the differentiation of pig breed: *a* – Duroc, *b* – Landrace, *c* – Yorkshire, *d* – Belarusian Large White, *e* – Belarusian Meat

AUC для наиболее значимых SNP составляли 0,671–0,831 ( $p$ -уровень  $(7,72 \cdot 10^{-6})$ – $(2,97 \cdot 10^{-18})$ ), для породы ландрас – AUC = 0,592–0,716 ( $p$ -уровень  $(4,88 \cdot 10^{-2})$ – $(3,56 \cdot 10^{-6})$ ), для породы йоркшир – AUC = 0,640–0,742 ( $p$ -уровень  $(4,16 \cdot 10^{-2})$ – $(4,34 \cdot 10^{-4})$ ), для породы крупная белая – AUC = 0,579–0,732 ( $p$ -уровень  $(4,89 \cdot 10^{-2})$ – $(7,97 \cdot 10^{-9})$ ). После генотипирования *in silico* с использованием программы GENIS нами был проведен статистический анализ, в результате которого общее количество информативных маркеров было сокращено до девяти.

Далее для этих SNP с использованием технологии KASP определены генотипы для 328 свиней пяти пород, разводимых в Беларуси. Результаты анализа с использованием метода MDR на массиве генотипов, полученных в процессе молекулярно-генетических исследований, представлены на рисунке. Вклад конкретного генотипа определялся величиной энтропии  $H$  (выраженной в %), при  $H = 100$  % генотип однозначно определяет, к какой группе (породе) относится образец. Наибольшее значение  $H$  для породы дюрок выявлено для SNP rs80859281 (45,56 %), для породы ландрас – rs80855833 (45,89 %), для йоркшира – rs319844693 (33,37 %), для БКБ – rs332196135 (12,22 %), для БМ – rs81333725 (6,56 %). Результаты молекулярно-генетического анализа для SNP представлены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Результаты генотипирования для особей пяти пород свиней по исследуемым SNP, %  
T a b l e 1. Results of genotyping for individuals of five breeds of pigs according to the studied SNPs, %

SNP	Генотип Genotype	Порода свиней Breeds of pigs				
		ДЮ ( $n = 46$ )	ЛА ( $n = 110$ )	ЙО ( $n = 77$ )	БКБ ( $n = 49$ )	БМ ( $n = 46$ )
rs80789418	AA	–	54,5	13,0	10,2	56,5
	AG	23,9	39,1	41,5	30,6	37,0
	GG	76,1	6,4	45,5	59,2	6,5
rs80855833	GG	–	70,9	7,8	–	19,6
	TG	10,9	29,1	23,4	49,0	52,1
	TT	89,1	–	68,8	51,0	28,3
rs80859281	CC	10,9	100	98,7	100	100
	CT	52,1	–	1,3	–	–
	TT	37,0	–	–	–	–
rs80967182	AA	71,7	–	–	6,1	6,5
	AG	28,3	22,7	5,2	14,3	30,4
	GG	–	77,3	94,8	79,6	63,1
rs81322965	AA	34,8%	67,3	58,4	18,4	63,0
	AG	47,8%	30,0	31,2	44,9	17,4
	GG	17,4%	2,7	10,4	36,7	19,6
rs81333725	GG	95,7	9,0	2,6	20,4	39,1
	TG	4,3	25,5	15,5	44,9	47,8
	TT	–	65,5	81,9	134,7	13,1
rs319844693	AA	100	86,4	5,2	18,4	78,3
	AG	–	10,9	31,2	57,1	17,4
	GG	–	2,7	63,6	24,5	4,3
rs322056535	AA	13,0	24,5	64,9	83,7	58,7
	AG	56,5	47,3	31,2	16,3	23,9
	GG	30,5	28,2	3,9	–	17,4
rs332196135	CC	100	91,8	44,2	20,4	63,0
	CG	–	6,4	33,7	46,9	34,8
	GG	–	1,8	22,1	32,7	2,2

Для каждой из пяти пород свиней выявлены особенности во встречаемости генотипов и аллелей по анализируемым SNP. Например, для породы свиней дюрок SNP rs332196235 и rs319844693 оказались мономорфными. Полиморфизм rs80859281 оказался мономорфным для пород свиней ландрас, БКБ и БМ. В целом для всех отобранных SNP выявлены различия по частоте распространения референсных аллелей.

Далее с использованием ROC-анализа было установлено, что наибольшим дифференцирующим потенциалом свиней породы дюрок обладают SNP rs80859281, rs80967182, rs81333725; для породы ландрас – rs80855833, rs80789418, rs332196135; для йоркшира – rs81333725, rs80855833, rs319844693; для БКБ – rs81322965, rs332196135, rs322066535; для БМ – rs81333725, rs80789418, rs319844693. Результаты ROC-анализа представлены в табл. 2.

Таблица 2. Результаты ROC-анализа

Table 2. ROC analysis results

SNP	AUC	Стандартная ошибка Standard error	p-уровень p-level	95 %-ный ДИ 95 % CI
<i>Дюрок</i>				
rs81333725	0,920	0,016	$7,15 \cdot 10^{-20}$	0,889–0,950
rs80859281	0,945	0,027	$4,07 \cdot 10^{-22}$	0,892–0,997
rs80967182	0,961	0,010	$1,08 \cdot 10^{-23}$	0,941–0,982
<i>Ландрас</i>				
rs332196135	0,688	0,029	$2,52 \cdot 10^{-8}$	0,632–0,745
rs80789418	0,759	0,027	$1,78 \cdot 10^{-14}$	0,707–0,812
rs80855833	0,908	0,016	$1,47 \cdot 10^{-33}$	0,877–0,939
<i>Йоркшир</i>				
rs80855833	0,714	0,032	$1,31 \cdot 10^{-8}$	0,652–0,776
rs81333725	0,741	0,029	$1,44 \cdot 10^{-10}$	0,685–0,797
rs319844693	0,895	0,021	$1,03 \cdot 10^{-25}$	0,855–0,935
<i>БКБ</i>				
rs81322965	0,737	0,039	$1,24 \cdot 10^{-7}$	0,661–0,813
rs322066535	0,738	0,032	$1,12 \cdot 10^{-7}$	0,674–0,801
rs332196135	0,786	0,037	$1,66 \cdot 10^{-10}$	0,714–0,858
<i>БМ</i>				
rs319844693	0,633	0,039	$3,80 \cdot 10^{-3}$	0,556–0,710
rs81333725	0,693	0,037	$2,76 \cdot 10^{-5}$	0,621–0,764
rs80789418	0,707	0,037	$6,44 \cdot 10^{-6}$	0,635–0,780

При оценке точности отнесения образца к одной из пяти пород свиней с использованием различных методов классификации получены данные, представленные в табл. 3.

Таблица 3. Точность классификации образцов (%)

Table 3. Sample classification accuracy (%)

Порода Breed	Метод классификации* Classification method*			
	LOG_all	LOG_LR	MP	MDR
Дюрок	100/100 (9 <sup>#</sup> )	100/99,6 (4)	100/100 (9)	99,2 (3)
Ландрас	85,5/92,7 (9)	84,5/91,3 (6)	88,9/87,5 (9)	90,0 (3)
Йоркшир	79,2/93,6 (9)	79,2/93,6 (5)	88,9/91,3 (9)	89,7 (3)
БКБ	51,0/95,7 (9)	38,8/96,8 (4)	75,0/97,1 (9)	84,6 (3)
БМ	34,8/95,4 (9)	32,6/95,4 (7)	66,7/97,2 (9)	79,5 (3)

Примечания: \* – LOG\_all – логистическая регрессия, принудительное включение всех 9 SNP, LOG\_LR – логистическая регрессия, включение – отношение правдоподобия, MP (Multilayer Perceptron) – многослойный перцептрон (90 % – обучающая выборка, 10 % – контрольная выборка), MDR (Multifactor Dimensionality Reduction) – многофакторное сокращение размерности; # – количество SNP в модели.

Notes: \* – LOG\_all – logistic regression, forced inclusion of all 9 SNPs, LOG\_LR – logistic regression, inclusion – likelihood ratio, MP (Multilayer Perceptron) – multilayer perceptron (90 % – training sample, 10 % – test sample), MDR (Multifactor Dimensionality Reduction) – multifactorial dimensionality reduction; # – number of SNPs in the model.

Наибольшая точность классификации показана для свиней породы дюрок. В зависимости от метода она варьировала в диапазоне от 99,2 до 100 %. Свиньи данной породы были впервые выведены в Северной Америке в 1860-х годах, они разводятся во всем мире благодаря своим особенностям: быстрому росту, высоким показателям качества мяса и др. Дюрок является одной из

наиболее популярных коммерческих пород в мире. Эта порода в генетическом плане отличается от остальных (ландрас, йоркшир, крупная белая) наименьшим полиморфизмом STR-локусов, что, возможно, указывает на высокое давление отбора [16; 17]. Позднее нами был оценен полиморфизм в генах *KDM3A* (rs58335217) и *DBX2* (rs81329035) для пяти пород, разводимых в Беларуси [18]. На основании проведенного исследования именно для свиней породы дюрок был выявлен породоспецифичный полиморфизм.

Для свиней пород ландрас и йоркшир точность классификации варьировала в диапазоне от 84,5–90,0 до 79,2–89,7 % соответственно. Порода ландрас была выведена в Дании в XIX в. путем скрещивания местных свиней с крупной белой породой. Ландрасы славятся своими выдающимися мясными качествами и являются одной из самых популярных пород свиней в мире. Порода ландрас в основном используется в мясном свиноводстве для производства высококачественной свинины. Их часто для улучшения мясных качеств скрещивают с другими породами, такими как крупная белая, дюрок или йоркширская. Йоркширские свиньи выведены в графстве Йоркшир (Англия, XVIII в.) путем скрещивания местных свиней с автохтонными (аборигенными) свињьями из Италии и Китая.

Для свиней пород белорусская крупная белая и белорусская мясная точность классификации составила 38,8–84,6 и 34,8–79,5 % соответственно. Для данных пород характерна сложная система скрещивания с применением других пород свиней. Порода свиней белорусская крупная белая была выведена в Беларуси в 1960-х годах путем скрещивания местных пород свиней с крупными белыми породами из Великобритании и Дании. Белорусская крупная белая – одна из наиболее популярных пород свиней в Беларуси и других странах, часто используется в скрещиваниях с другими породами для улучшения мясных качеств. Порода свиней белорусская мясная выведена в Беларуси путем трехпородного скрещивания ландраса, крупной белой и дюрока. Данная порода адаптирована к климатическим условиям Беларуси, обладает высокой устойчивостью к болезням, хорошей конверсией корма, стрессоустойчивостью.

На основании полученных результатов показано, что чем больше пород используется в селекционных процессах для выведения одной породы, тем частота аллеля для породоспецифичных SNP снижается и оказывается сопоставима с частотой в других породах, т. е. уникальность SNP нивелируется. В то же время идентификация чистых пород, без примесей других пород, совершенно не вызывает затруднений, и точность классификации стремится к 100 %.

**Заключение.** В результате широкомасштабного полногеномного биоинформатического анализа 248 особей вида *S. scrofa domestica*, а также молекулярно-генетического исследования 328 особей пяти пород свиней (дюрок, ландрас, йоркшир, белорусская крупная белая и белорусская мясная), разводимых в Беларуси, установлен высокий значимый дифференцирующий потенциал SNP: rs332196135, rs81322965, rs322056535, rs80967182, rs81333725, rs80789418, rs319844693, rs80859281, rs80855833. Показано, что при анализе трех полиморфизмов для каждой породы точность классификации находится в диапазоне 79,5–99,2 %: максимальное значение точности выявлено для свиней породы дюрок (99,2 %), высокие значения точности – для пород ландрас (90,0 %) и йоркшир (89,7 %), средняя точность – для белорусской крупной белой (84,6 %) и белорусской мясной (79,5 %). На основании полученных результатов разработаны методические рекомендации, которые используются в практике Института генетики и цитологии НАН Беларуси.

**Благодарности.** Молекулярно-генетические исследования выполнены в рамках ГПНИ «Биотехнологии-2» (2021–2025 гг.), подпрограмма «Геномика, эпигеномика, биоинформатика», НИР «Разработка системы генетического анализа для определения чистопородности свиней на основе изучения SNP-локусов» (№ 20210339). Программное обеспечение GENIS разработано в рамках НИР «Биоинформатический подход к анализу данных полногеномного секвенирования для поиска однонуклеотидных замен, способных дифференцировать близкородственные биологические виды» (БРФФИ, 2023–2025 гг., Б23-060).

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Acknowledgments.** The study was carried out within the framework of the State Scientific Research Program “Biotechnology-2” (2021–2025), subprogram “Genomics, epigenomics, bioinformatics”, research work “Development of a genetic analysis system for determining the purity of pigs based on the study of SNP loci” (No. 20210339). The GENIS software was developed as part of the research project “Bioinformatics approach to the analysis of whole genome sequencing data for the search for single nucleotide polymorphisms for the differentiation of closely related biological species” (BRFFR, 2023–2025, Б23-060).

**Conflict of interest.** The authors declare no conflicts of interest.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. PorcineSNP60 v2 Genotyping BeadChip. – URL: [https://www.illumina.com/content/dam/illumina-marketing/documents/products/datasheets/datasheet\\_porcinesnp60.pdf](https://www.illumina.com/content/dam/illumina-marketing/documents/products/datasheets/datasheet_porcinesnp60.pdf) (date of access: 02.07.2024).
2. Identification of high utility SNPs for population assignment and traceability purposes in the pig using high-throughput sequencing / A. M. Ramos, H. J. Megens, R. P. M. A. Crooijmans [et al.] // *Animal Genetics*. – 2011. – Vol. 42, N 6. – P. 613–620. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2052.2011.02198.x>
3. Genome-wide association study for ham weight loss at first salting in Italian Large White pigs: towards the genetic dissection of a key trait for dry-cured ham production / L. Fontanesi, G. Schiavo, M. Gallo [et al.] // *Animal Genetics*. – 2017. – Vol. 48, N 1. – P. 103–107. <https://doi.org/10.1111/age.12491>
4. Genetic diversity analysis of two commercial breeds of pigs using genomic and pedigree data / R. Zanella, J. O. Peixoto, F. F. Cardoso [et al.] // *Genetics Selection Evolution*. – 2016. – Vol. 48. – Art. 24. <https://doi.org/10.1186/s12711-016-0203-3>
5. Genome-wide study on intramuscular fat in Italian Large White pig breed using the PorcineSNP60 BeadChip / R. Davoli, D. Luise, V. Mingazzini [et al.] // *Journal of Animal Breeding and Genetics*. – 2016. – Vol. 133, N 4. – P. 277–282. <https://doi.org/10.1111/jbg.12189>
6. A genome-wide association study in Large White and Landrace pig populations for number piglets born alive / S. Bergfelder-Drüing, C. Grosse-Brinkhaus, B. Lind [et al.] // *PLoS One*. – 2015. – Vol. 10, N 3. – Art. e0117468. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0117468>
7. A genomewide association study for average daily gain in Italian Large White pigs / L. Fontanesi, G. Schiavo, G. Galimberti [et al.] // *Journal of Animal Science*. – 2014. – Vol. 92, N 4. – P. 1385–1394. <https://doi.org/10.2527/jas.2013-7059>
8. A genome-wide association study to detect QTL for commercially important traits in Swiss Large White boars / D. Becker, K. Wimmers, H. Luther [et al.] // *PLoS One*. – 2013. – Vol. 8, N 2. – Art. e55951. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0055951>
9. Estimation of U.S. Yorkshire breed composition using genomic data / Y. Huang, R. O. Bates, C. W. Ernst [et al.] // *Journal of Animal Science*. – 2014. – Vol. 92, N 4. – P. 1395–1404. <https://doi.org/10.2527/jas.2013-6907>
10. Uimari, P. Whole-genome SNP association analysis of reproduction traits in the Finnish Landrace pig breed / P. Uimari, A. Sironen, M. L. Sevón-Aimonen // *Genetics Selection Evolution*. – 2011. – Vol. 43. – Art. 42. <https://doi.org/10.1186/1297-9686-43-42>
11. Multi-breed genome-wide association study reveals novel loci associated with the weight of internal organs / Y. He, X. Li, F. Zhang [et al.] // *Genetics Selection Evolution*. – 2015. – Vol. 47. – Art. 87. <https://doi.org/10.1186/s12711-015-0168-7>
12. Оценка интрогрессии генов свиньи домашней (*Sus scrofa domestica*) в генофонд дикого кабана (*Sus scrofa scrofa*) на основе исследования полиморфизма генов *MC1R* и *NR6A1* / В. Н. Кипень, А. О. Рябцева, С. А. Котова [и др.] // *Молекулярная и прикладная генетика*. – 2019. – Т. 26. – С. 83–95.
13. Кипень, В. Н. GENIS – методологический подход для генотипирования *in silico* (апробация на результатах секвенирования для *Sus scrofa*) / В. Н. Кипень, Е. В. Снытков // *Математическая биология и биоинформатика*. – 2024. – Т. 19, № 1. – P. 36–51. <https://doi.org/10.17537/2024.19.36>
14. Multifactor-dimensionality reduction reveals high-order interactions among estrogen–metabolism genes in sporadic breast cancer / M. D. Ritchie, L. W. Hahn, N. Roodi [et al.] // *American Journal of Human Genetics*. – 2001. – Vol. 69, N 1. – P. 138–147. <https://doi.org/10.1086/321276>
15. Дифференциация пород домашних свиней с использованием расширенного биоинформатического анализа SNP / В. Н. Кипень, Е. В. Снытков, М. Е. Михайлова, Р. И. Шейко // *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. – 2022. – Т. 66, № 3. – С. 301–309. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2022-66-3-301-309>
16. Kharzinova, V. R. The pattern of genetic diversity of different breeds of pigs based on microsatellite analysis / V. R. Kharzinova, N. A. Zinovieva // *Вавиловский журнал генетики и селекции*. – 2020. – Т. 24, № 7. – С. 747–754. <https://doi.org/10.18699/vj20.669>
17. Микросателлитные маркеры в исследовании полиморфизма пород свиньи домашней (*Sus scrofa domestica*) / А. О. Рябцева, С. А. Котова, А. Е. Гребенчук [и др.] // *Журнал белорусского государственного университета. Биология*. – 2021. – № 2. – С. 74–83. <https://doi.org/10.33581/2521-1722-2021-2-74-83>
18. Анализ полиморфизма генов *KDM3A* и *DBX2* для дифференциации свиней породы дюрок вида *Sus scrofa domestica* / В. Н. Кипень, М. Е. Михайлова, Е. В. Снытков, Р. И. Шейко // *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. – 2023. – Т. 67, № 2. – С. 119–125. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2023-67-2-119-125>

## References

1. *PorcineSNP60 v2 Genotyping BeadChip*. Available at: [https://www.illumina.com/content/dam/illumina-marketing/documents/products/datasheets/datasheet\\_porcinesnp60.pdf](https://www.illumina.com/content/dam/illumina-marketing/documents/products/datasheets/datasheet_porcinesnp60.pdf) (accessed 2 July 2024).
2. Ramos A. M., Megens H. J., Crooijmans R. P. M. A., Schook L. B., Groenen M. A. M. Identification of high utility SNPs for population assignment and traceability purposes in the pig using high-throughput sequencing. *Animal Genetics*, 2011, vol. 42, no. 6, pp. 613–620. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2052.2011.02198.x>
3. Fontanesi L., Schiavo G., Gallo M., Baiocco C., Galimberti G., Bovo S., Russo V., Buttazzoni L. Genome-wide association study for ham weight loss at first salting in Italian Large White pigs: towards the genetic dissection of a key trait for dry-cured ham production. *Animal Genetics*, 2017, vol. 48, no. 1, pp. 103–107. <https://doi.org/10.1111/age.12491>
4. Zanella R., Peixoto J. O., Cardoso F. F., Cardoso L. L., Biegelmeier P., Cantão M. E., Otaviano A., Caetano A. R., Ledur M. C. Genetic diversity analysis of two commercial breeds of pigs using genomic and pedigree data. *Genetics Selection Evolution*, 2016, vol. 48, art. 24. <https://doi.org/10.1186/s12711-016-0203-3>

5. Davoli R., Luise D., Mingazzini V., Zambonelli P., Braglia S., Serra A., Russo V. Genome-wide study on intramuscular fat in Italian Large White pig breed using the PorcineSNP60 BeadChip. *Journal of Animal Breeding and Genetics*, 2016, vol. 133, no. 4, pp. 277–282. <https://doi.org/10.1111/jbg.12189>
6. Bergfelder-Drüing S., Grosse-Brinkhaus C., Lind B., Erbe M., Schellander K., Simianer H., Tholen E. A genome-wide association study in Large White and Landrace pig populations for number piglets born alive. *PLoS One*, 2015, Vol. 10, no. 3, art. e0117468. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0117468>
7. Fontanesi L., Schiavo G., Galimberti G., Calò D. G., Russo V. A genomewide association study for average daily gain in Italian Large White pigs. *Journal of Animal Science*, 2014, vol. 92, no. 4, pp. 1385–1394. <https://doi.org/10.2527/jas.2013-7059>
8. Becker D., Wimmers K., Luther H., Hofer A., Leeb T. A genome-wide association study to detect QTL for commercially important traits in Swiss Large White boars. *PLoS One*, 2013, vol. 8, no. 2, art. e55951. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0055951>
9. Huang Y., Bates R. O., Ernst C. W., Fix J. S., Steibel J. P. Estimation of U.S. Yorkshire breed composition using genomic data. *Journal of Animal Science*, 2014, vol. 92, no. 4, pp. 1395–1404. <https://doi.org/10.2527/jas.2013-6907>
10. Uimari P., Sironen A., Sevón-Aimonen M. L. Whole-genome SNP association analysis of reproduction traits in the Finnish Landrace pig breed. *Genetics Selection Evolution*, 2011, vol. 43, art. 42. <https://doi.org/10.1186/1297-9686-43-42>
11. He Y., Li X., Zhang F., Su Y., Hou L., Chen H., Zhang Z., Huang L. Multi-breed genome-wide association study reveals novel loci associated with the weight of internal organs. *Genetics Selection Evolution*, 2015, vol. 47, art. 87. <https://doi.org/10.1186/s12711-015-0168-7>
12. Kipen V. N., Rabcava A. O., Kotava S. A., Zhurina N. V., Handza A. I., Tsybovsky I. S. Polymorphism analysis of *MC1R* and *NR6A1* genes to evaluate the level of introgression of domestic swine (*Sus scrofa domesticus*) genes in wild boar (*Sus scrofa scrofa*) population. *Molekulyarnaya i prikladnaya genetika = Molecular and Applied Genetics*, 2019, vol. 26, pp. 83–95 (in Russian).
13. Kipen V. N., Snytkov E. V. GENIS – methodological approach for *in silico* genotyping (validation on *Sus scrofa* sequencing). *Matematicheskaya biologiya i bioinformatika = Mathematical Biology and Bioinformatics*, 2024, vol. 19, no. 1, pp. 36–51 (in Russian). <https://doi.org/10.17537/2024.19.36>
14. Ritchie M. D., Hahn L. W., Roodi N., Bailey L. R., Dupont W. D., Parl F. F., Moore J. H. Multifactor-dimensionality reduction reveals high-order interactions among estrogen-metabolism genes in sporadic breast cancer. *American Journal of Human Genetics*, 2001, vol. 69, no. 1, pp. 138–147. <https://doi.org/10.1086/321276>
15. Kipen V. N., Snytkov E. V., Mikhailova M. E., Sheyko R. I. Breed differentiation of domestic pigs using SNP – extended bioinformatical analysis. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2022, vol. 66, no. 3, pp. 301–309 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2022-66-3-301-309>
16. Kharzinova V. R., Zinovieva N. A. The pattern of genetic diversity of different breeds of pigs based on microsatellite analysis. *Vavilovskii Zhurnal Genetiki i Seleksii = Vavilov Journal of Genetics and Breeding*, 2020, vol. 24, no. 7, pp. 747–754. <https://doi.org/10.18699/vj20.669>
17. Rabtsava A. A., Kotava S. A., Hrebanchuk A. Ya., Gandzha A. I., Zhuryna N. V., Tsybovsky I. S. Microsatellite markers in the study of polymorphism of domestic pig breeds (*Sus scrofa domesticus*). *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Biologiya = Journal of the Belarusian State University. Biology*, 2021, vol. 2, pp. 74–83 (in Russian). <https://doi.org/10.33581/2521-1722-2021-2-74-83>
18. Kipen V. N., Mikhailova M. E., Snytkov E. V., Sheyko R. I. Analysis of *KDM3A* and *DBX2* gene polymorphism for differentiation of *Sus scrofa domesticus* duroc pigs. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2023, vol. 67, no. 2, pp. 119–125 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2023-67-2-119-125>

## Информация об авторах

Кипень Вячеслав Николаевич – канд. биол. наук, доцент, вед. науч. сотрудник. Институт генетики и цитологии НАН Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: v.kipen@igc.by. ORCID: 0000-0002-7822-0746.

Снытков Евгений Владимирович – науч. сотрудник. Институт генетики и цитологии НАН Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: evsnytkov@gmail.com. ORCID: 0000-0001-7961-1952.

Михайлова Мария Егоровна – канд. биол. наук, доцент, заведующий лабораторией. Институт генетики и цитологии НАН Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: M.Mikhailova@igc.by. ORCID: 0000-0001-6087-5069.

Шейко Руслан Иванович – член-корреспондент, д-р с.-х. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. Институт генетики и цитологии НАН Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: R.I.Sheyko@igc.by. ORCID: 0000-0001-5442-566X.

## Information about the authors

Kipen Viachaslau N. – Ph. D. (Biology), Associate Professor, Leading Researcher. Institute of Genetics and Cytology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.kipen@igc.by. ORCID: 0000-0002-7822-0746.

Snytkov Evgenij V. – Researcher. Institute of Genetics and Cytology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: evsnytkov@gmail.com. ORCID: 0000-0001-7961-1952.

Mikhailova Mariya E. – Ph. D. (Biology), Associate Professor, Head of the Laboratory. Institute of Genetics and Cytology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: M.Mikhailova@igc.by. ORCID: 0000-0001-6087-5069.

Sheyko Ruslan I. – Corresponding Member, D. Sc. (Agrarian), Professor, Chief Researcher. Institute of Genetics and Cytology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: R.I.Sheyko@igc.by. ORCID: 0000-0001-5442-566X.

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

УДК 634.739.3:736(476)  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-137-143>

Поступило в редакцию 18.11.2024  
Received 18.11.2024

**Член-корреспондент Ж. А. Рупасова<sup>1</sup>, Н. Б. Павловский<sup>1</sup>, академик Ф. И. Привалов<sup>1</sup>,  
М. Н. Мандрик-Литвинкович<sup>2</sup>, академик Э. И. Коломиец<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Центральный ботанический сад Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь  
<sup>2</sup>Химический синтез и биотехнологии, Минск, Республика Беларусь

## **ВЛИЯНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДСТВ ЗАЩИТЫ И РЕГУЛЯЦИИ РОСТА РАСТЕНИЙ НА БИОФЛАВОНОИДНЫЙ КОМПЛЕКС ПЛОДОВ *VACCINIUM CORYMBOSUM* L. (ГОЛУБИКИ ВЫСОКОРОСЛОЙ) В УСЛОВИЯХ БЕЛАРУСИ**

**Аннотация.** Приведены результаты сравнительного исследования состава Р-витаминного комплекса плодов голубики высокорослой в зависимости от обработок опытной культуры биологическими регуляторами роста Оксидат торфа с микроэлементами и Ростмомент (каждый в концентрации 0,4 %), а также новым бактериальным препаратом фунгицидного действия Экоберит в концентрациях 1, 2 и 5 %. Наиболее выраженное стимулирующее действие на биосинтез собственно антоцианов, катехинов и общий выход биофлавоноидов оказывал Оксидат торфа. Экоберит в концентрации 5 % преимущественно стимулировал образование катехинов, в концентрации 2 % – флавонолов, а в концентрации 1 % ингибировал синтез лейкоантоцианов, собственно антоцианов, но при этом оказывал стимулирующее действие на образование катехинов и флавонолов. Применение Ростмомента снижало синтез лейкоантоцианов, антоциановых пигментов и катехинов, что в целом привело к обеднению плодов биофлавоноидами. Максимальная эффективность обогащения ягодной продукции голубики Р-витаминами достигалась при обработке растений Оксидатом торфа в концентрации 0,4 % и Экоберитом в концентрациях 2 и 5 %.

**Ключевые слова:** голубика высокорослая, плоды, биофлавоноидный комплекс, антоциановые пигменты, флавонолы, катехины, биологические фунгицидные препараты

**Для цитирования.** Влияние биологических средств защиты и регуляции роста растений на биофлавоноидный комплекс плодов *Vaccinium corymbosum* L. (голубики высокорослой) в условиях Беларуси / Ж. А. Рупасова, Н. Б. Павловский, Ф. И. Привалов [и др.] // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 137–143. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-137-143>

**Corresponding Member Zhanna A. Rupasova<sup>1</sup>, Nikolay B. Pavlovsky<sup>1</sup>, Academician Fedor I. Privalov<sup>1</sup>,  
Marina N. Mandrik-Litvinkovich<sup>2</sup>, Academician Emilia I. Kolomiets<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Central Botanical Garden of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus  
<sup>2</sup>Chemical Synthesis and Biotechnology, Minsk, Republic of Belarus,

## **THE EFFECT OF BIOPREPARATION FOR PLANT PROTECTION AND GROWTH REGULATION ON BIOFLAVONOID COMPLEX OF *VACCINIUM CORYMBOSUM* L. (HIGHBUSH BLUEBERRY) IN THE CONDITIONS OF BELARUS**

**Abstract.** The results of a comparative study of the composition of the P-vitamin complex of tall blueberry fruits are presented depending on the treatments of the experimental crop with biological growth regulators Oxidate torpha with trace elements and Rostmoment (each in a concentration of 0.4 %), as well as various concentrations (1, 2 and 5 %) of a new bacterial preparation of fungicidal action Ecoberit. Oxidate torpha had the most pronounced stimulating effect on the biosynthesis of anthocyanins, catechins and the total yield of bioflavonoids. Ecoberit at a concentration of 5 % mainly stimulated the formation of catechins, at a concentration of 2 % – flavonols, and at a concentration of 1 % it inhibited the synthesis of leucoanthocyanins, anthocyanins proper, but at the same time had a stimulating effect on the formation of catechins and flavonols. The use of Rostmoment reduced the synthesis of leucoanthocyanins, anthocyanin pigments and catechins, which generally led to fruit depletion with bioflavonoids. The maximum efficiency of enriching blueberry berry products with P-vitamins is achieved by treating plants with Oxidate torpha in concentration 0,4 % and Ecoberit in concentrations of 2 and 5 %.

**Keywords:** highbush blueberry, fruits, bioflavonoid complex, anthocyanin pigments, flavonols, catechins, biological fungicidal preparations

**For citation.** Rupasova Zh. A., Pavlovsky N. B., Privalov F. I., Mandrik-Litvinkovich M. N., Kolomiets E. I. The effect of biopreparation for plant protection and growth regulation on bioflavonoid complex of *Vaccinium corymbosum* L. (highbush blueberry) in the conditions of Belarus. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 137–143 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-137-143>

**Введение.** Общеизвестно, что плоды голубики высокорослой являются природным источником широкого спектра биологически активных соединений, в том числе биофлавоноидов, оказывающих на организм человека многостороннее, в том числе Р-витаминное, действие при наиболее выраженной физиологической активности антоциановых пигментов, катехинов и флавонолов [1]. Высокие пищевые и лечебно-профилактические свойства плодов данного вида позволяют отнести их к продуктам премиум-класса, используемым в детском и диетическом питании населения. Исследованиями ученых Центрального ботанического сада Национальной академии наук Беларуси, выполненными в разные годы во всех агроклиматических зонах республики, подтверждена повышенная способность интродуцированных сортов голубики высокорослой к биосинтезу в плодах биофлавоноидов, но вместе с тем показана выраженная зависимость параметров их накопления от воздействия как регулируемых, так и нерегулируемых абиотических факторов [2].

В результате мониторинговых исследований фитосанитарной ситуации в насаждениях голубики в юго-западной части Беларуси [3] выявлена значительная поражаемость растений болезнями, доминирующее положение среди которых принадлежит ожогу побегов, или раку стеблей (*Fusicoccum putrefaciens*), а также фомопсисному увяданию ветвей (*Phomopsis vaccinii*), что негативно сказывается не только на урожайности, но и на качестве плодов. В последние годы в мировой практике при проведении защитных мероприятий на промышленных плантациях данной культуры для получения высококачественной экологически чистой ягодной продукции широко практикуется применение микробных препаратов фунгицидного действия. Но поскольку большинство из них обладает направленным спектром антимикробного действия к отдельным патогенам, это инициировало создание белорусскими учеными экологически безопасных биопестицидов комплексного действия с фитозащитной активностью, предназначенных для повышения продуктивности голубики, одним из которых явился бактериальный препарат фунгицидного действия Экоберит. Он представляет собой консорциум из штаммов бактерий рода *Bacillus* с ростстимулирующей, антимикробной, азотфиксирующей и фосфатмобилизующей активностями. Предполагается, что его применение при производстве саженцев голубики и обработке прикорневой зоны плодоносящих растений позволит получать посадочный материал и ягодную продукцию высокого качества.

Вместе с тем учитывая экспериментально установленную нами в плодах зависимость скорости биосинтеза органических соединений разной химической природы от воздействия внешних факторов [4; 5], следовало ожидать, что с применением данного препарата могут изменяться биохимические характеристики ягодной продукции, в том числе содержание биофлавоноидов, и обусловленный ими уровень Р-витаминной и антиоксидантной активности. В связи с этим в 2024 г. в условиях опытной культуры на генеративных растениях районированного сорта Bluescop голубики высокорослой проведены сравнительные исследования влияния разных доз Экоберита и двух видов биологических препаратов ростстимулирующего действия – регулятора роста Ростомонт, а также Оксидата торфа «Голубика» с микроэлементами на биофлавоноидный комплекс плодов. Действующим веществом первого из них являются дрожжи рода *Saccharomyces* и продукты их метаболизма, а его препаративная форма представлена водорастворимыми гранулами (ВГ) с количеством жизнеспособных клеток в пределах  $10 \pm 3$  %. Второй препарат представляет собой 4 %-ный водный концентрат биологически активных веществ, содержащихся в природном продукте – торфе. В состав препарата входят гуминовые и фульвовые кислоты – до 80 %, 16 аминокислот, из которых 9 незаменимых, моно- и полисахариды, фенолы, хиноны, макро- и микроэлементы, а также производные витаминов группы В, D, D<sub>3</sub>, РР.

**Материалы и методы исследования.** Полевые исследования выполнены в южной агроклиматической зоне республики (Ганцевичский р-н Брестской обл.). На протяжении весеннего периода температурный фон значительно превышал среднюю многолетнюю норму при дефиците атмосферных осадков в марте и в наибольшей степени в мае на фоне их избыточного выпадения в апреле, обусловившего достаточное увлажнение почвы и тем самым обеспечившего весьма комфортные условия для развития и более раннего, чем обычно, прохождения фенологических фаз опытными растениями.

Почва экспериментального участка – торфяно-глеевая, мелиорированная, развитая на слое пушицево-сфагнового верхового торфа, подстилаемого с глубины 50 см рыхлым, разнозернистым песком. Торф среднеразложившийся, с зольностью 15 % и содержанием  $P_2O_5$  – 131,  $K_2O$  – 180,  $Ca$  – 246,  $Mg$  – 32 мг/кг. Реакция почвенного раствора ( $pH_{H_2O}$ ) в пристволевой зоне посадок голубики варьировалась в диапазоне 4,9–6,2, тогда как у мульчирующего слоя (древесные опилки) она составляла 4,9–5,3, а в междурядьях – 4,7–5,1.

Схема опыта включала 6 вариантов обработки растений: 1 – контроль (обработка водой); 2, 3 – обработка 0,4 %-ными водными растворами препаратов Ростмомент и Оксидат торфа соответственно; 4–6 – обработка 1, 2 и 5 %-ными водными растворами Экоберита соответственно. Полив и обработки растений обозначенными препаратами осуществлялись в начале фазы бутонизации и далее 4 раза с интервалом в 15–20 дней до начала созревания плодов при норме расхода рабочего раствора 10 л/растение.

В период плодоношения опытных растений в высушенных при температуре 60 °С измельченных пробах плодов голубики каждого варианта определяли содержание основных компонентов биофлавоноидного комплекса, в том числе суммарное количество антоциановых пигментов – по методу T. Swain, W. E. Hillis [6], с построением градуировочной кривой по кристаллическому цианидину, полученному из плодов аронии черноплодной и очищенному по методике Ю. Г. Скориковой и Э. А. Шафтан [7]; собственно антоцианов и суммы катехинов (с использованием ванилинового реактива) – фотоэлектроколориметрическим методом [8, 9]; суммы флавонолов (в пересчете на рутин) – спектрофотометрическим методом [9]. Все аналитические определения выполнены в 3-кратной повторности. Данные статистически обработаны с использованием программы Excel.

**Результаты и их обсуждение.** Как и следовало ожидать, плоды голубики оказались весьма богаты биофлавоноидами, общее количество которых изменялось по вариантам опыта в диапазоне 8909–14776 мг/100 г сухой массы при расхождении в нем крайних значений в 1,7 раза, что однозначно указывало на существенное влияние испытываемых агроприемов на параметры накопления этих чрезвычайно ценных в физиологическом плане соединений (табл. 1).

Доминирующее положение в составе биофлавоноидного комплекса плодов голубики принадлежало антоциановым пигментам, общая доля которых при содержании 5408–11362 мг/100 г составляла 61–77 % (табл. 2). При этом на долю собственно антоцианов, содержание которых изменялось в интервале 2540–7620 мг/100 г, приходилось 27–52 %, тогда как относительная доля лейкоантоцианов при содержании 2128–3842 мг/100 г составляла 24–39 %. Долевое участие флавонолов в Р-витаминном комплексе плодов голубики в рамках эксперимента варьировалось в диапазоне 18–36 % при содержании 2299–3696 мг/100 г, тогда как таковое катехинов не превышало 3–7 % при содержании 248–674 мг/100 г.

Вместе с тем на фоне применения испытываемых фунгицидных препаратов в составе данного комплекса обнаружены заметные сдвиги в соотношении основных групп полифенолов относительно контроля, указывавшие на то, что их применение, за исключением Оксидата торфа, способствовало снижению в нем долевого участия общего количества антоциановых пигментов на 7–11 %, особенно на фоне обработок Ростмоментом, а также минимальной дозой Экоберита. Столь значительное ослабление позиций данных соединений в составе Р-витаминного комплекса в большинстве случаев было обусловлено снижением относительной доли лейкоантоцианов на 5–15 %, наиболее значительным и примерно одинаковым при использовании Ростмомента и Оксидата торфа. При этом в последнем случае отмечено максимальное в эксперименте увеличение доли собственно антоцианов (почти на 20 % по сравнению с контролем), обусловившее, в отличие от остальных вариантов с обработками, усиление позиций антоциановых пигментов в целом на 5 % относительно контроля. Менее выразительное, чем при использовании Оксидата торфа, увеличение долевого участия собственно антоцианов в составе биофлавоноидного комплекса плодов голубики, не превышавшее 3–4 % относительно контроля, наблюдалось также при использовании Ростмомента, а также максимальной дозы Экоберита, но это, тем не менее, не способствовало повышению в нем роли антоциановых пигментов в целом.

Т а б л и ц а 1. Содержание биофлавоноидов в сухой массе плодов голубики высокорослой в вариантах полевого опыта с применением биопрепаратов, мг/100 г

T a b l e 1. Content of bioflavonoids in the dry mass of highbush blueberry fruits in field experiment variants with plant treatments with biopreparations, mg/100 g

Вариант опыта Experimental variant	Собственно антоцианы Anthocyanins proper		Лейкоантоцианы Leucoanthocyanins		Сумма антоциановых пигментов Total anthocyanin pigments	
	$X \pm st$	$t_{ct}$	$X \pm st$	$t_{ct}$	$X \pm st$	$t_{ct}$
Контроль	3220,0 ± 20,0	—	3774,0 ± 50,0	—	6994,0 ± 32,6	—
Ростмомент, 0,4 %	3280,0 ± 52,9	1,1	2128,0 ± 84,7	-16,7*	5408,0 ± 137,6	-11,2*
Оксидат торфа, 0,4 %	7620,0 ± 227,2	19,3*	3742,0 ± 373,9	-0,1	11362,0 ± 187,5	23,0*
Экоберит, 1 %	2540,0 ± 80,0	-8,2*	3258,0 ± 97,5	-4,7*	5798,0 ± 32,2	-26,1*
Экоберит, 2 %	3360,0 ± 11,5	6,1*	3842,0 ± 68,0	0,8	7202,0 ± 58,1	3,1*
Экоберит, 5 %	3660,0 ± 91,7	4,7*	3022,0 ± 121,7	-5,7*	6682,0 ± 32,6	-6,8*
	Флавонолы Flavonols		Катехины Catechins		Сумма биофлавоноидов Total bioflavonoids	
	$X \pm st$	$t_{ct}$	$X \pm st$	$t_{ct}$	$X \pm st$	$t_{ct}$
Контроль	2299,0 ± 29,4	—	394,0 ± 7,2	—	9687,0 ± 54,2	—
Ростмомент, 0,4 %	3252,8 ± 17,0	28,0*	248,0 ± 11,1	-11,0*	8908,8 ± 114,1	-6,2*
Оксидат торфа, 0,4 %	2741,8 ± 90,1	4,7*	672,0 ± 12,5	19,3*	14775,8 ± 259,2	19,2*
Экоберит, 1 %	3184,7 ± 61,4	13,0*	582,0 ± 6,9	18,8*	9564,7 ± 88,5	-1,2
Экоберит, 2 %	3695,5 ± 136,3	10,0*	492,0 ± 6,9	9,8*	11389,5 ± 125,0	12,5*
Экоберит, 5 %	2912,1 ± 29,5	14,7*	674,2 ± 0,9	38,6*	10268,3 ± 27,4	9,6*

П р и м е ч а н и е. \* – статистически значимые по  $t$ -критерию Стьюдента различия с контролем при  $p < 0,05$ .  
N o t e: \* – statistically significant differences with the control according to Student's  $t$ -test at  $p < 0.05$ .

Т а б л и ц а 2. Долевое участие основных групп биофлавоноидов в составе Р-витаминного комплекса плодов *V. corymbosum* в вариантах полевого опыта, %

T a b l e 2. Proportion of the main groups of bioflavonoids in the P-vitamin complex of *V. corymbosum* fruits in field experiment variants, %

Вариант опыта Experimental variant	Собственно антоцианы Anthocyanins proper	Лейкоантоцианы Leucoanthocyanins	Сумма антоциановых пигментов Total anthocyanin pigments	Флавонолы Flavonols	Катехины Catechins
Контроль	33	39	72	24	4
Ростмомент, 0,4 %	37	24	61	36	3
Оксидат торфа, 0,4 %	52	25	77	18	5
Экоберит, 1 %	27	34	61	33	6
Экоберит, 2 %	29	34	63	33	4
Экоберит, 5 %	36	29	65	28	7

Заметим, что снижение долевого участия последних в составе Р-витаминного комплекса плодов в большинстве опытных вариантов с обработками по сравнению с контролем сопровождалось увеличением такового флавонолов на 4–12 %, наиболее значительным при использовании Ростмомента, и лишь на фоне применения Оксидата торфа наблюдалось ослабление в нем роли данных соединений (табл. 2). Что касается катехинов, то из-за незначительной их доли в составе данного комплекса, ограниченного лишь 3–7 %, различия с контролем по этому признаку вариантов с обработками оказались маловыразительными и не превышали 1–3 %. Тем не менее нельзя не обратить внимания на тенденцию к увеличению долевого участия катехинов на фоне испытываемых агроприемов, особенно при использовании максимальной дозы Экоберита.

Как видим, доминирующей тенденцией в изменении соотношения основных компонентов Р-витаминного комплекса плодов голубики при внесении испытываемых биопрепаратов являлось снижение в нем долевого участия антоциановых пигментов на 7–11 % относительно контроля. Указанная закономерность наиболее ярко проявлялась при обработках Ростмоментом, а также минимальной дозой Экоберита преимущественно за счет ослабления позиций лейкоантоцианов на фоне усиления таковых флавонолов и отчасти катехинов. Лишь применение Окси-

дата торфа, несмотря на максимальное в эксперименте снижение доли лейкоантоцианов, сопоставимое с таковым при использовании Ростмомента, напротив, способствовало усилению роли антоциановых пигментов в результате значительной активизации биосинтеза собственно антоцианов.

Для количественной оценки степени влияния испытываемых агроприемов на биофлавоноидный комплекс плодов голубики в вариантах с применением испытываемых биопрепаратов были определены относительные различия с контролем исследуемых показателей, приведенные в табл. 3.

Т а б л и ц а 3. Относительные различия с контролем вариантов полевого опыта с применением биопрепаратов по содержанию в плодах биофлавоноидов, %

Table 3. Relative differences with the control of field experiment variants with plant treatments with fungicidal preparations in terms of bioflavonoid content in fruits, %

Показатель Index	Ростмомент, 0,4 % Rostmoment, 0,4 %	Оксидат торфа, 0,4 % Oxidate torpha, 0,4 %	Экоберит Ecoberit		
			1 %	2 %	5 %
Собственно антоцианы	–	+136,6	–21,1	+4,3	+13,7
Лейкоантоцианы	–43,6	–	–13,7	–	–19,9
Сумма антоциановых пигментов	–22,7	+62,5	–17,1	+3,0	–4,5
Катехины	–37,1	+70,6	+47,7	+24,9	+71,1
Флавонолы	+41,5	+19,3	+38,5	+60,7	+26,7
Сумма биофлавоноидов	–8,0	+52,5	–	+17,6	+6,0
Совокупный эффект	–69,9	+341,5	+34,3	+110,5	+93,1

Примечание. Прочерк означает отсутствие статистически значимых по *t*-критерию Стьюдента различий с контролем при  $p < 0,05$ .

Note. A dash indicates the absence of statistically significant differences with the control according to Student's *t*-test at  $p < 0.05$ .

Таким образом, наиболее эффективным агроприемом в обогащении ягодной продукции биофлавоноидами оказалось внесение Оксидата торфа, что подтверждалось увеличением их общего количества на 53 % по сравнению с контролем, преимущественно за счет активизации биосинтеза собственно антоцианов и катехинов. Внесение Экоберита способствовало обогащению плодов лишь катехинами на 25–71 % и флавонолами на 27–61 %, наибольшему в первом случае при использовании его максимальной, а во втором – средней концентрации и сопровождавшемся заметным ослаблением либо крайне незначительным усилением накопления антоциановых пигментов. Противоположные по знаку изменения в содержании обозначенных соединений обусловили отсутствие значимых различий с контролем по общему количеству Р-витаминов при использовании минимальной дозы этого препарата, тогда как применение его более высоких доз способствовало усилению накопления в плодах биофлавоноидов на 6–18 % при наибольшей результативности 2 %-ной концентрации Экоберита. Заметим, что данный эффект был обусловлен преимущественно активизацией биосинтеза флавонолов, а на фоне его максимальной концентрации – катехинов (табл. 3). Лишь в единичном случае – при применении Ростмомента выявлено обеднение плодов Р-витаминами на 8 % по сравнению с контролем, связанное с ингибированием биосинтеза катехинов и близких им по химической природе лейкоантоцианов на 37 и 44 % соответственно. При этом, несмотря на отсутствие различий с контролем в содержании собственно антоцианов при активизации накопления флавонолов на 42 %, в изменении суммарного количества биофлавоноидов под действием данного препарата был получен отрицательный эффект.

На основании полученных результатов выявлены варианты опыта с наибольшими и соответственно наименьшими значениями анализируемых признаков. Так, наиболее выраженное индивидуальное стимулирующее действие на накопление в плодах собственно антоцианов и общий выход биофлавоноидов оказывало использование Оксидата торфа, а флавонолов – применение Экоберита в 2 %-ной концентрации. При этом минимальное содержание в плодах флавонолов выявлено в контроле, лейкоантоцианов и катехинов – при использовании Ростмомента, а собственно антоцианов – при внесении в почву минимальной дозы Экоберита.

Для выявления интегральной картины результативности испытываемых биопрепаратов в отношении исследуемых компонентов биофлавоноидного комплекса плодов голубики, в каждом варианте опыта было осуществлено суммирование относительных размеров выявленных различий с контролем показателей накопления данных соединений, с учетом их знака, дающее представление о совокупном результирующем эффекте от испытываемых агроприемов (табл. 3). Как видим, только применение Ростмомента оказало весьма выразительное ингибирующее воздействие на биосинтез Р-витаминов, тогда как при использовании Экоберита и Оксидата торфа получены позитивные результаты, причем более значительные во втором случае. При этом для бактериального препарата наименее эффективным приемом в плане обогащения плодов биофлавоноидами оказалось использование его в минимальной испытанной концентрации (1 %), а наиболее результативным – в концентрации 2 %.

**Закключение.** В результате сравнительного исследования в опытной культуре влияния биологических препаратов – регуляторов роста Ростмомент и Оксидат торфа с микроэлементами (каждый в концентрации 0,4 %), а также нового бактериального препарата фитозащитного действия Экоберит в 1, 2 и 5 %-ной концентрациях на биофлавоноидный комплекс плодов голубики высокорослой установлено их значительное влияние на содержание и соотношение в нем основных групп полифенолов.

Наиболее выраженное стимулирующее действие на биосинтез собственно антоцианов, катехинов и общий выход биофлавоноидов оказывало применение Оксидата торфа. Использование 5 %-ной концентрации Экоберита способствовало преимущественному обогащению плодов катехинами, а 2 %-ной – флавонолами, тогда как 1 %-ная концентрация препарата оказывала стимулирующее действие на биосинтез и катехинов, и флавонолов. Применение Ростмомента ингибировало биосинтез катехинов и лейкоантоцианов, что приводило не только к снижению относительной доли антоциановых пигментов в составе Р-витаминного комплекса плодов, но и к уменьшению в них общего количества биофлавоноидов. Наиболее значительное обогащение ягодной продукции голубики Р-витаминами установлено на фоне внесения Экоберита в 2 %-ной и особенно 5 %-ной концентрациях и в наибольшей степени Оксидата торфа.

#### Список использованных источников

1. Карабанов, И. А. Флавоноиды в мире растений / И. А. Карабанов. – Минск, 1981. – 80 с.
2. Возделывание голубики на торфяных выработках Припятского Полесья (физиолого-биохимические аспекты развития) / Ж. А. Рупасова, А. П. Яковлев, В. Н. Решетников [и др.]. – Минск, 2016. – 242 с.
3. Плескацевич, Р. И. Наиболее распространенные болезни в плодоносящих насаждениях голубики высокой / Р. И. Плескацевич, Е. Е. Берлинчик // Голубиководство в Беларуси: итоги и перспективы: материалы респ. науч.-практ. конф., Минск, 17 авг. 2012 г. / НАН Беларуси, Центр. ботан. сад; редкол.: В. В. Титок [и др.]. – Минск, 2012. – С. 49–53.
4. Эффективность микробных удобрений при возделывании голубики на выработанных торфяниках Беларуси / Ж. А. Рупасова, А. П. Яковлев, В. Н. Решетников [и др.]. – Минск, 2020. – 236 с.
5. Влияние препаратов с фунгицидной активностью на накопление органических кислот и углеводов в плодах голубики высокорослой (*Vaccinium corymbosum* L.) в условиях Беларуси / Ж. А. Рупасова, Н. Б. Криницкая, В. С. Задаля [и др.] // Экологические системы и приборы. – 2023. – № 8. – С. 25–32.
6. Swain, T. The phenolic constituents of *Prunus domestica*. 1. The quantitative analysis of phenolic constituents / T. Swain, W. E. Hillis // Journal of the Science of Food and Agriculture. – 1959. – Vol. 10, N 1. – P. 63–68. <https://doi.org/10.1002/jsfa.2740100110>
7. Скорикова, Ю. Г. Методика определения антоцианов в плодах и ягодах / Ю. Г. Скорикова, Э. А. Шафтан // Труды 3 Всесоюзного семинара по биологически активным (лечебным) веществам плодов и ягод. – Свердловск, 1968. – С. 451–461.
8. Методика определения антоцианов в плодах аронии черноплодной / В. Ю. Андреева, Г. И. Калинкина, Н. Э. Коломиец, Н. В. Исайкина // Фармация. – 2013. – № 3. – С. 19–21.
9. Методы биохимического исследования растений / под ред. А. И. Ермакова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Ленинград, 1987. – 430 с.

#### References

1. Karabanov I. A. *Flavonoids in the Plant World*. Minsk, 1981. 80 p. (in Russian).
2. Rupasova Zh. A., Yakovlev A. P., Reshetnikov V. N., Lishtvan I. I., Vasilevskaya T. I., Krinitskaya N. B. *Growing Blueberries in the Peat Bogs of Pripyat Polesie (Physiological and Biochemical Aspects of Development)*. Minsk, 2016. 242 p. (in Russian).

3. Pleskacevich R. I., Berlinchik E. E. The most common diseases in highbush blueberry fruiting plantations. *Golubikvodstvo v Belarusi: itogi i perspektivy: materialy respublikanskoi nauchno-prakticheskoi konferentsii, Minsk, 17 avgusta 2012 g.* [Blueberry Growing in Belarus: Results and Prospects: Materials of the Republican Scientific and Practical Conference, Minsk, August 17, 2012]. Minsk, 2012, pp. 49–53 (in Russian).

4. Rupasova Zh. A., Yakovlev A. P., Reshetnikov V. N., Kolomiets E. I., Aleschenkova Z. M. *Efficiency of Microbial Fertilizers in Blueberry Cultivation on Depleted Peatlands in Belarus.* Minsk, 2020. 236 p. (in Russian).

5. Rupasova Zh. A., Krinitskaya N. B., Zadalia V. S., Pavlovsky N. B., Raltsevich A. V., Goncharova L. V., Shpitalnaya T. V., Bely P. N., Kolomiets E. I., Aleshchenkova Z. M., Mandrik-Litvinkovich M. N., Skorina V. V. Influence of preparations with fungicidal activity on the accumulation of organic acids and carbohydrates in blueberry fruit (*Vaccinium corymbosum* L.) under the conditions of Belarus. *Ekologicheskie sistemy i pribory = Ecological Systems and Devices*, 2023, no. 8, pp. 25–32 (in Russian).

6. Swain T., Hillis W. E. The phenolic constituents of *Prunus domnestica*. 1. The quantitative analysis of phenolic constituents. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 1959, vol. 10, no. 1, pp. 63–68. <https://doi.org/10.1002/jsfa.2740100110>

7. Skorikova Yu. G., Shaftan E. A. Methodology for determination of anthocyanins in fruits and berries. *Trudy 3 Vsesoyuznogo seminarov po biologicheski aktivnym (lechebnym) veshchestvam plodov i yagod* [Proceedings of the 3rd All-Union Seminar on Biologically Active (Healing) Substances of Fruits and Berries]. Sverdlovsk, 1968, pp. 451–461 (in Russian).

8. Andreyeva V. Yu., Kalinkina G. I., Kolomiets N. E., Isaikina N. V. Procedure for determination of antocyanins in the black chokeberries (*Aronia melanocarpa*). *Farmatsiya = Pharmacy*, 2013, no. 3, pp. 19–21 (in Russian).

9. Ermakov A. I., ed. *Methods of Biochemical Study of Plants.* Leningrad, 1987. 430 p. (in Russian).

### Информация об авторах

*Рупасова Жанна Александровна* – член-корреспондент, д-р биол. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. Центральный ботанический сад НАН Беларуси (ул. Сурганова, 2в, 220012, Минск, Республика Беларусь). E-mail: t.vasileuskaya@cbg.org.by.

*Павловский Николай Болеславович* – канд. биол. наук, доцент, заведующий лабораторией. Центральный ботанический сад НАН Беларуси (ул. Сурганова, 2в, 220012, Минск, Республика Беларусь). E-mail: pavlovskiy@tut.by.

*Привалов Федор Иванович* – академик, д-р с.-х. наук, профессор, директор. Центральный ботанический сад НАН Беларуси (ул. Сурганова, 2в, 220012, Минск, Республика Беларусь). E-mail: office@cbg.org.by.

*Мандрик-Литвинкович Марина Николаевна* – канд. биол. наук, доцент, заведующий лабораторией. Химический синтез и биотехнологии (ул. Купревича, 2, 220084, Минск, Республика Беларусь). E-mail: mandryk@biotech.bas-net.by.

*Коломиец Эмилия Ивановна* – академик, д-р биол. наук, профессор, генеральный директор. Химический синтез и биотехнологии (ул. Купревича, 2, 220084, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kolomiets@biotech.bas-net.by.

### Information about the authors

*Rupasova Zhanna A.* – Corresponding Member, D. Sc. (Biology), Professor, Chief Researcher. Central Botanical Garden of the National Academy of Sciences of Belarus (2v, Sarganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: t.vasileuskaya@cbg.org.by.

*Pavlovsky Nikolay B.* – Ph. D. (Biology), Associate Professor, Head of the Laboratory. Central Botanical Garden of the National Academy of Sciences of Belarus (2v, Sarganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pavlovskiy@tut.by.

*Privalov Fedor I.* – Academician, D. Sc. (Agrarian), Professor, Director. Central Botanical Garden of the National Academy of Sciences of Belarus (2v, Sarganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: office@cbg.org.by.

*Mandrik-Litvinkovich Marina N.* – Ph. D. (Biology), Associate Professor, Head of the Laboratory. Chemical Synthesis and Biotechnology (2, Kuprevich Str., 220084, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mandryk@biotech.bas-net.by.

*Kolomiets Emilia I.* – Academician, D. Sc. (Biology), Professor, General Director. Chemical Synthesis and Biotechnology (2, Kuprevich Str., 220084, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kolomiets@biotech.bas-net.by.

**МЕДИЦИНА**  
**MEDICINE**УДК 616.36-008.6-092.9:612.55:612.017.4.067  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-144-149>Поступило в редакцию 01.10.2024  
Received 01.10.2024**Член-корреспондент Ф. И. Висмонт***Белорусский государственный медицинский университет, Минск, Республика Беларусь***ЗНАЧИМОСТЬ ТИРЕОИДНОГО СТАТУСА В ФОРМИРОВАНИИ ОСОБЕННОСТЕЙ  
ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ТЕЛА У КРЫС И КРОЛИКОВ В ЗАВИСИМОСТИ  
ОТ ВЫРАЖЕННОСТИ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЭНДОТОКСИНЕМИИ**

**Аннотация.** С помощью физиологических, биохимических и фармакологических методов в опытах на крысах и кроликах показано, что направленность и характер изменений температуры тела с учетом действия бактериального липополисахарида – эндотоксина *E. coli* зависят от выраженности эндотоксинемии, состояния детоксикационной функции печени. Выявлено, что при введении бактериального эндотоксина в организм в следовых концентрациях повышаются, а при выраженной эндотоксинемии снижаются температура тела и активность процессов детоксикации. Установлено, что неоднозначная направленность и характер изменений температуры тела в условиях развития эндотоксинемии зависят от ее выраженности, состояния детоксикационной функции печени и тиреоидного статуса организма.

**Ключевые слова:** детоксикационная функция печени, бактериальная эндотоксинемия, температура тела

**Для цитирования.** Висмонт, Ф. И. Значимость тиреоидного статуса в формировании особенностей изменения температуры тела у крыс и кроликов в зависимости от выраженности бактериальной эндотоксинемии / Ф. И. Висмонт // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 144–149. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-144-149>

**Corresponding Member Frantishek I. Vismont***Belarusian State Medical University, Minsk, Republic of Belarus***IMPORTANCE OF THYROID STATUS IN FORMING CHARACTERISTICS  
OF BODY TEMPERATURE CHANGES IN RATS AND RABBITS DEPENDING ON THE SEVERITY  
OF BACTERIAL ENDOTOXINEMIA**

**Abstract.** Using physiological, biochemical and pharmacological methods in experiments on rats and rabbits, it was shown that the direction and nature of body temperature changes, taking into account the action of bacterial lipopolysaccharide – endotoxin *E. coli*, depend on the severity of endotoxemia, the state of the liver detoxification function. It was revealed that when bacterial endotoxin is introduced into the body in trace concentrations, body temperature and the activity of detoxification processes increase, and in the case of severe endotoxemia, they decrease. It has been established that the ambiguous direction and nature of changes in body temperature in the conditions of endotoxemia development depend on its severity, the state of the liver's detoxification function and the thyroid status of the body.

**Keywords:** detoxication function of the liver, bacterial endotoxemia, body temperature

**For citation.** Vismont F. I. Importance of thyroid status in forming characteristics of body temperature changes in rats and rabbits depending on the severity of bacterial endotoxemia. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 144–149 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-144-149>

**Введение.** Всестороннее изучение процессов жизнедеятельности при различных состояниях и заболеваниях – важная задача современной медицины. Общеизвестно, что в патогенезе нарушений жизнедеятельности при экстремальных состояниях организма, вызванных действием самых разнообразных по своей природе раздражителей, и различных заболеваниях как инфекционной, так и неинфекционной природы, сопровождающихся повышением температуры тела,

в механизмах поддержания температурного гомеостаза и резистентности к факторам среды обитания и, в частности, при бактериальной эндотоксинемии, особо важное значение имеет функциональное состояние печени и образуемые ею в процессе метаболизма многочисленные физиологически активные вещества, в избытке высвобождающиеся во внутреннюю среду организма [1–4].

Известно, что от функционального состояния печени у животных и человека во многом зависит выраженность эндотоксинемии [1; 5], а также содержание в крови йодсодержащих гормонов щитовидной железы [6; 7], имеющих важное значение в процессах детоксикации, терморегуляции и резистентности к экстремальным факторам среды обитания [8; 9]. Показано, что между процессами детоксикации в печени, активностью системы гипофиз–щитовидная железа и регуляцией температуры тела существует тесная взаимосвязь [10–12]. Рядом исследователей показано, что печень играет значимую роль в метаболизме гормонов щитовидной железы, обеспечивая регуляцию их обмена и поддержание оптимальной концентрации в крови [6; 7]. Концентрация йодсодержащих гормонов щитовидной железы в крови определяется не только процессами их образования, но и в значительной мере контролируется тканевыми ферментами дейодиназами, а также активностью процессов метаболизма и выведения их из организма [6; 7; 13]. Установлено, что от функционального состояния печени зависит активность процессов дейодирования йодсодержащих гормонов щитовидной железы [7; 13], участвующих в регуляции температуры тела [8; 11]. В литературе указывается, что у людей и крыс более 2/3 циркулирующего 3,5,3'-трийодтиронина, высокоэффективного тиреоидного гормона, продуцируется в периферических органах из тироксина путем 5'-дейодирования последнего, и что конверсия  $T_4$  в  $T_3$ , происходящая в печени и почках, может участвовать в регуляции концентрации данных гормонов в сыворотке крови [6; 7]. А как известно, конверсия  $T_4$  в  $T_3$  – одно из ведущих звеньев клеточного метаболизма тиреоидных гормонов во многом определяет тиреоидный статус организма.

Однако значение детоксикационной функции печени, эндотоксинемии в регуляции температуры тела и формировании тиреоидного статуса организма до сих пор остается неясным.

Цель исследований – выяснение особенностей изменений температуры тела в зависимости от выраженности эндотоксинемии и состояния детоксикационной функции печени и механизмов их формирования.

В задачи исследования входило:

исследовать детоксикационную функцию печени у крыс и кроликов в условиях бактериальной эндотоксинемии;

установить характер изменений детоксикационной функции печени и температуры тела у животных в условиях острого токсического поражения печени четыреххлористым углеродом;

выяснить особенности изменения температуры тела и процессов детоксикации у крыс на введение животным бактериального эндотоксина в условиях острого токсического поражения печени четыреххлористым углеродом.

**Материалы и методы исследования.** Опыты выполнены на взрослых ненаркотизированных белых крысах самцах массой 160–220 г и кроликах обоего пола массой 2,5–3,0 кг. Животные до постановки эксперимента адаптировались к условиям вивария, получали полноценный пищевой рацион в соответствии с нормами содержания лабораторных животных. Рацион крыс состоял из комбикорма КК-92/ПХЧ-5, количество которого определялось нормами кормления лабораторных животных. Питьевой режим соответствовал принципу *ad libitum*.

В связи с тем, что в литературе имеются данные о том, что у животных в течение суток происходят значительные колебания уровня ряда гормонов и биогенных аминов в крови, которые сопровождаются изменениями в энергетическом и пластическом обмене, терморегуляции, опыты проводили в строго определенное время (8–12 часов утра). Все наблюдения производили в термонейтральных условиях (20–22 °С).

В работе использованы известные экспериментальные модели: бактериальной эндотоксинемии, острого токсического поражения печени четыреххлористым углеродом ( $CCl_4$ ), гипо- и гипертиреоза. Применяли современные биохимические и физиологические методы исследования.

Для создания модели бактериальной эндотоксинемии использовали бактериальный липополисахарид (ЛПС) – эндотоксин *E. coli* (серия 0111:B4 Sigma, США), который вводили однократно: крысам – внутрибрюшинно, кроликам – в краевую вену уха.

Острое токсическое поражение печени вызывали интрагастральным введением животным масляного раствора  $CCl_4$  (приготовленного на оливковом масле в соотношении 1 : 1) в дозе 5,0 мл/кг крысам и 2,0 мл/кг кроликам.

Экспериментальный гипотиреоз воспроизводили с помощью тиреостатика мерказолила (Укрмедпрепараты, Украина), который в дозе 25,0 мг/кг на 1 %-ном крахмальном растворе вводили крысам интрагастрально ежедневно в течение 20 дней. Для создания модели гипертиреоза использовали синтетический препарат трийодтиронина гидрохлорид (Liothyronin, Berlin Chemie, Германия), который на 1 %-ном крахмальном растворе вводили животным интрагастрально ежедневно в течение 20 дней в дозе 30,0 мкг/кг.

Взятие для исследований крови и ткани печени у животных проводилось сразу после декапитации. Кровь после декапитации собирали в охлажденные центрифужные пробирки с добавлением гепарина и центрифугировали 10 мин (5000 g при +4 °C). Полученную плазму отбирали пипеткой и использовали в дальнейшем: для определения «средних молекул» и степени токсичности крови. По содержанию в крови веществ группы «средних молекул» (СМ), степени токсичности плазмы крови (СТК) и продолжительности наркотического сна (ПНС) судили о детоксикационной функции печени. Определение содержания СМ производили методом кислотного этанола осаждения, разработанным В. М. Мойным с соавт.<sup>1</sup>, СТК-способом, предложенным О. А. Радьковой с соавт.<sup>2</sup>. О ПНС у крыс (гексенал 100,0 мг/кг, внутривентриально) судили по времени нахождения животных в боковом положении.

Уровень в плазме крови тиреотропного гормона (ТТГ), трийодтиронина ( $T_3$ ) и тетрайодтиронина ( $T_4$ ) определяли радиоиммунным методом с помощью тест-наборов ХОП ИБОХ НАН Беларуси.

Ректальную температуру (в прямой кишке на глубине 3,0 и 5,0 см у крыс и кроликов соответственно) измеряли с помощью электротермометра ТПЭМ-1. В ряде опытов регистрацию температуры тела у крыс осуществляли при помощи телеметрической установки Mini Mitter (модель 4000, США).

Эксперименты на крысах и кроликах проводились в соответствии с этическими нормами обращения с животными. Полученные цифровые данные обработаны общепринятыми методами вариационной биологической статистики с помощью критерия Стьюдента. Все данные представлялись в виде среднего арифметического и стандартной ошибки среднего арифметического ( $\bar{X} \pm S_x$ ). Достоверность результатов учитывали при  $p < 0,05$ .

**Результаты и их обсуждение.** Установлено, что направленность и характер изменений температуры тела, ее гормональной регуляции при действии ЛПС зависят от выраженности эндотоксинемии, состояния детоксикационной функции печени. Показано, что в условиях действия в организме ЛПС в следовых концентрациях повышается, а при выраженной эндотоксинемии снижается температура тела, активность детоксикации и системы гипофиз–щитовидная железа. В опытах установлено, что внутривентриальное введение крысам ( $n = 12$ ) ЛПС в дозе 5,0 мкг/кг приводит к медленному повышению температуры тела и слабо выраженной гипертермии. Температура тела повышалась на 1,3, 1,2, 1,8, 1,2 и 0,7 °C ( $p < 0,001$ ) через 120, 180, 240, 300 и 330 мин после инъекции эндотоксина и составляла  $38,9 \pm 0,11$ ;  $38,8 \pm 0,12$ ;  $39,4 \pm 0,10$ ;  $38,8 \pm 0,13$  и  $38,3 \pm 0,12$  °C соответственно. Введение в кровоток ЛПС (0,5 мкг/кг) кроликам ( $n = 9$ ) приводило к быстрому и значительному повышению ректальной температуры. Температура тела у животных через 30, 60, 120 и 180 мин после введения ЛПС возрастала на 0,6, 1,3, 1,6 и 1,2 °C ( $p < 0,001$ ) и составляла соответственно  $39,2 \pm 0,12$ ;  $39,9 \pm 0,10$ ;  $40,2 \pm 0,11$  и  $39,8 \pm 0,12$  °C. Развитие эндотоксиновой лихорадки у крыс и кроликов сопровождалось, наряду с повышением температуры тела, активацией детоксикационной функции печени, о чем свидетельствовало снижение ПНС, СТК и содержание СМ в плазме крови [12; 13]. ЛПС в большей дозе (50 мг/кг у крыс и 10 мг/кг у кроликов) вызывал выраженную гипотермию.

<sup>1</sup> Авторское свидетельство 1520445 СССР, VRB F 01 № 33/50. Способ определения веществ группы средних молекул в биологических жидкостях: заявлено 02.11.87; опубл. 07.11.89 / В. М. Мойн, В. В. Николайчик, В. В. Кировский, Г. А. Лобачева, Л. И. Мазур // Открытия. Изобретения. – 1989. – № 41. – С. 415.

<sup>2</sup> Авторское свидетельство 1146570 СССР, МКИ б 01 № 1/28. Способ определения токсичности биологических жидкостей: заявлено 23.06.82; опубл. 23.03.85 / О. А. Радькова, Г. А. Бояринов, И. Н. Балишина, К. В. Крылов // Открытия. Изобретения. – 1985. – № 41. – С. 415.

Опыты показали, что в условиях эндотоксической лихорадки повышается, а при выраженной эндотоксинемии снижается активность тиреотропной функции гипофиза и изменяется содержание в крови йодсодержащих гормонов щитовидной железы, имеющих важное значение в механизмах терморегуляции и адаптации к экстремальным условиям существования. Внутривентриальное введение ЛПС (5,0 мкг/кг) крысам ( $n = 7$ ) приводило через 120 и 180 мин после инъекции к повышению на 32,1 % ( $p < 0,05$ ) и 40,7 % ( $p < 0,05$ ) уровня ТТГ в плазме крови. Содержание  $T_3$  в крови животных снижалось на 33,3 % ( $p < 0,05$ ), а концентрация  $T_4$  повышалась на 24,2 % ( $p < 0,05$ ) только на 180 мин лихорадки.

Изменение содержания ТТГ, три- и тетраидтиронина в плазме крови и температуры тела у крыс после внутривентриального введения ЛПС в дозе 5,0 мкг/кг представлены в таблице.

**Изменения содержания ТТГ, три- и тетраидтиронина в плазме крови и температуры тела у крыс после внутривентриального введения ЛПС в дозе 5,0 мкг/кг ( $\bar{X} \pm S_x$ )**

**Changes in the content of TSH, tri- and tetraiodothyronine in blood plasma and body temperature in rats after intraperitoneal injection of LPS at a dose of 5.0  $\mu$ g/kg ( $\bar{X} \pm S_x$ )**

Группа животных Group of animals	ТТГ, мМЕ/л TSH, mIU/l	$T_3$ , нмоль/л $T_3$ , nmol/l	$T_4$ , нмоль/л $T_4$ , nmol/l	Температура тела, °C Body temperature, °C
Контрольная ( $K_1$ ) ( $n = 9$ ) – интактные животные	$2,7 \pm 0,32$	$1,5 \pm 0,12$	$56,8 \pm 5,24$	$37,2 \pm 0,11$
Контрольная ( $K_2$ ) – после введения физраствора через				
120 мин ( $n = 7$ )	$2,8 \pm 0,31$	$1,3 \pm 0,12$	$66,6 \pm 5,71$	$37,6 \pm 0,12$
180 мин ( $n = 7$ )	$2,7 \pm 0,35$	$1,2 \pm 0,09$	$55,8 \pm 4,83$	$37,6 \pm 0,09$
Опытная – после введения ЛПС через				
120 мин ( $n = 7$ )	$3,7 \pm 0,40^*$	$1,0 \pm 0,13$	$61,8 \pm 5,25$	$38,8 \pm 0,13^*$
180 мин ( $n = 7$ )	$3,8 \pm 0,44^*$	$0,8 \pm 0,10^*$	$69,3 \pm 5,13^*$	$38,6 \pm 0,12^*$

Примечания: \* – изменения достоверны по отношению к  $K_1$  ( $p < 0,05$ );  $n$  – число животных.

Notes: \* – changes are significant in relation to  $K_1$  ( $p < 0,05$ );  $n$  – number of animals.

Действие ЛПС у кроликов ( $n = 7$ ) через 30 и 60 мин после введения бактериального эндотоксина в кровотоки вызывало повышение уровня ТТГ (на 22,1 %,  $p < 0,05$  и 26,7 %,  $p < 0,05$  соответственно) и снижение концентрации  $T_4$  (на 51,1 %,  $p < 0,05$  и 24,3 %,  $p < 0,05$  соответственно). Концентрация  $T_3$  в крови в этих условиях понижалась на 35,6 % ( $p < 0,05$ ) по сравнению с контрольным уровнем, если действие ЛПС длилось 60 мин. Содержание ТТГ,  $T_3$  и  $T_4$  в плазме крови у животных контрольной группы ( $n = 8$ ) через 30 и 60 мин после введения в кровотоки апириногенного физраствора составляло:  $31,2 + 2,15$  мМЕ/л,  $8,9 \pm 0,63$  нмоль/л,  $72,1 \pm 12,30$  нмоль/л и  $30,5 \pm 2,84$  мМЕ/л,  $8,5 \pm 0,60$  нмоль/л,  $73,6 \pm 10,21$  нмоль/л соответственно.

В опытах на крысах установлено, что через 20 дней после ежедневного интрагастрального введения экзогенного  $T_3$  в дозе 30 мкг/кг у гипертиреоидных животных температура тела повышалась на 0,7 °C ( $p < 0,05$ ,  $n = 10$ ). При этом концентрация в плазме крови  $T_3$  увеличивалась с  $1,3 \pm 0,15$  до  $2,0 \pm 0,27$  нмоль/л (на 53,8 %,  $p < 0,05$ ,  $n = 8$ ), а  $T_4$  снижалась с  $52,4 \pm 4,11$  до  $40,8 \pm 3,51$  нмоль/л (на 22,1%,  $p < 0,05$ ,  $n = 8$ ).

У гипотиреоидных крыс имело место снижение температуры тела и концентрации йодсодержащих гормонов щитовидной железы в плазме крови. Так, до начала введения на 1 %-ном растворе крахмала тиреостатика мерказолила в дозе 25 мг/кг ректальная температура у крыс опытной группы составляла  $37,6 \pm 0,11$  °C ( $n = 8$ ), а через 20 дней его применения снижалась на 0,8 °C ( $p < 0,05$ ). У животных контрольной группы, получавших интрагастрально 1 %-ный раствор крахмала, ректальная температура была равной  $37,5 \pm 0,12$  °C ( $n = 7$ ). Концентрация  $T_3$  и  $T_4$  в плазме крови у гипотиреоидных крыс, по сравнению с контрольной группой (интрагастральное введение 1 %-ного крахмального раствора в течение 20 дней), снижалась в 2,6 раза ( $p < 0,05$ ) и 3,2 раза ( $p < 0,05$ ) и составляла соответственно  $0,54 \pm 0,07$  нмоль/л ( $n = 7$ ) и  $16,4 \pm 1,05$  нмоль/л ( $n = 7$ ). Уровень ТТГ в плазме крови повышался на 61,5 % ( $p < 0,05$ ,  $n = 6$ ) и составлял  $2,1 \pm 0,23$  мМЕ/л.

Как известно, развитие эндотоксинемии зависит не только и не столько от поступления в кровотоки избыточного количества эндотоксинов, сколько от недостаточности детоксикационной

и антиэндотоксиновой защиты. Подтверждение было получено в опытах с введением ЛПС животным с функциональной недостаточностью печени.

В опытах на кроликах и крысах установлено, что в условиях острого токсического поражения печени  $\text{CCl}_4$  лихорадочная реакция на эндотоксин не возникает. Опыты также показали, что в зависимости от функционального состояния печени, ее детоксикационной функции, одна и та же доза ЛПС может привести к повышению температуры тела, не оказывая на нее влияния или вызывать гипотермию. Установлено, что действие ЛПС в условиях предварительной затравки животного  $\text{CCl}_4$  усугубляет нарушения в системе гипофиз–щитовидная железа, вызываемые гепатотропным ядом [11; 12].

Известно, что конверсия тетраодтирониона в триодтиронин, в основном происходящая в печени, – одно из ведущих звеньев метаболизма тиреоидных гормонов [6; 7; 13]. В связи с изложенными выше данными представляло интерес выяснить влияние гипо- и гипертиреоза на состояние детоксикационной функции печени и формирование терморегуляторных реакций организма у крыс при бактериальной эндотоксинеми.

Установлено, что направленность и характер изменений в процессах теплообмена и детоксикации в условиях действия бактериального эндотоксина зависит от активности системы гипофиз–щитовидная железа, уровня триодтирониона в крови. Выявлено, что у гипертиреодных крыс (ежедневное введение в течение 20 дней на 1 %-ном крахмальном растворе триодтирониона гидрохлорида в дозе 30 мкг/кг) действие бактериального эндотоксина сопровождается более выраженной активацией процессов детоксикации и теплообразования и что развитие эндотоксиновой лихорадки протекает с более высокими значениями подъема температуры тела. Установлено, что у крыс ( $n = 7$ ) с экспериментальным гипертиреозом имело место повышение температуры тела на  $0,7^\circ\text{C}$  ( $p < 0,05$ ) и детоксикационной функции печени. Так, ПНС сокращалась на 26,5 % ( $p < 0,05$ ) по отношению к контролю и составляла  $21,4 \pm 2,65$  мин, содержание в плазме крови СМ снижалось на 21,6 % ( $p < 0,05$ ), а СТК уменьшалась на 19,8 % ( $p < 0,05$ ). У крыс с экспериментальным гипотиреозом (ежедневное введение в течение 20 дней на 1 %-ном крахмальном растворе тиреостатика мерказолила в дозе 25 мг/кг) развитие лихорадочной реакции на ЛПС характеризуется вялым течением, более низкой активностью процессов детоксикации и энергетического обеспечения организма. Действие в организме эндотоксина у таких животных не сопровождается развитием характерных изменений детоксикационной функции печени и содержания триодтирониона в крови. Так, до начала введения мерказолила ректальная температура у крыс опытной группы составляла  $37,3 \pm 0,10^\circ\text{C}$  ( $n = 12$ ), а через 60 дней его применения снижалась на  $0,9^\circ\text{C}$  ( $p < 0,05$ ). ПНС у гипотиреодных крыс ( $n = 8$ ) увеличивалась на 29,4 % ( $p < 0,05$ ), а содержание СМ возрастало на 18,8 % ( $p < 0,05$ ). СТК в этих условиях повышалась на 17,1 % ( $p < 0,05$ ) по сравнению с контрольной группой.

Следовательно, есть основания заключить, что тиреоидный статус организма и состояние печени, ее детоксикационной функции, взаимосвязаны и имеют важное значение в поддержании температурного гомеостаза.

**Заключение.** Полученные данные дали основание полагать, что:

направленность и характер изменений температуры тела в условиях развития эндотоксинеми зависят от ее выраженности, состояния детоксикационной функции печени и тиреоидного статуса организма;

в зависимости от функционального состояния печени, ее детоксикационной функции (одноразовая или трехкратная затравка животных четыреххлористым углеродом) одна и та же доза бактериального эндотоксина может привести у крыс к повышению температуры тела, не оказывая на нее влияния или вызывать гипотермию;

уровень йодсодержащих гормонов в крови и, триодтирониона в частности, наряду с процессами детоксикации, определяет характер изменения температуры тела на действие бактериального эндотоксина.

#### Список использованных источников

1. Маянский, Д. Н. Клетки Купфера и патология печени / Д. Н. Маянский // Патологическая физиология и экспериментальная терапия. – 1985. – № 4. – С. 80–86.

2. Тэйлор, Б. С. Индуцибельная синтаза оксида азота в печени: регуляция и функции / Б. С. Тэйлор, Л. Х. Аларсон, Т. Р. Биллиар // *Биохимия*. – 1998. – Т. 63, № 7. – С. 905–923.
3. Moshage, H. Cytokines and the hepatic acute phase response / H. Moshage // *Journal of Pathology*. – 1997. – Vol. 181, N 3. – P. 257–266. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1096-9896\(199703\)181:3%3C257::aid-path756%3E3.0.co;2-u](https://doi.org/10.1002/(sici)1096-9896(199703)181:3%3C257::aid-path756%3E3.0.co;2-u)
4. Nitric oxide in the liver: physiopathological roles / H. Suzuki, M. Menegazzi, A. Carcereri de Prati [et al.] // *Advances in Neuroimmunology*. – 1995. – Vol. 5, N 4. – P. 379–410. [https://doi.org/10.1016/0960-5428\(95\)00024-0](https://doi.org/10.1016/0960-5428(95)00024-0)
5. Яковлев, М. Ю. Системная эндотоксемия / М. Ю. Яковлев. – М., 2021. – 184 с.
6. Туракулов, Я. Х. Активность конверсии тироксина в трийодтиронин в печени и почках крыс / Я. Х. Туракулов, Т. П. Ташкоджаева, Г. М. Артыкбаева // *Проблемы эндокринологии*. – 1991. – Т. 37, № 4. – С. 44–46.
7. Kelly, G. S. Peripheral metabolism of thyroid hormones: a review / G. S. Kelly // *Alternative Medicine Review*. – 2000. – Vol. 4. – P. 306–333.
8. Влияние экспериментального гипо- и гипертиреоза на циркадианные ритмы температуры тела крыс / А. Н. Герасевич, Д. В. Никифоров, И. А. Теребей [и др.] // *Биологические ритмы: материалы Междунар. науч.-практ. конф., ГНП «Беловежская пушча», 26–28 апр. 1999 г. / гл. ред. В. Е. Гайдук. – Брест, 1999. – С. 72–73.*
9. Городецкая, И. В. Зависимость эффективности адаптации к теплу от тиреоидного статуса организма / И. В. Городецкая // *Весті Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя біялагічных навук*. – 2000. – № 3. – С. 109–113.
10. Грищенко, К. Н. Роль клеток Купфера в формировании тиреоидного статуса и терморегуляторных реакций организма на действие бактериального эндотоксина / К. Н. Грищенко, Ф. И. Висмонт // *Здравоохранение*. – 2002. – № 5. – С. 32–35.
11. Висмонт, Ф. И. Роль эндотоксемии в формировании тиреоидного статуса организма и терморегуляции / Ф. И. Висмонт // *Здравоохранение*. – 2011. – № 9. – С. 26–29.
12. Висмонт, Ф. И. Роль эндотоксемии в дизрегуляторной патологии / Ф. И. Висмонт // *Здравоохранение*. – 2012. – № 1. – С. 17–21.
13. Deiodination of thyroid hormone by human liver / T. J. Visser, E. Kaptein, O. T. Terpstra, E. P. Krenning // *Journal of Clinical Endocrinology and Metabolism*. – 1988. – Vol. 67, N 1. – P. 17–24. <https://doi.org/10.1210/jcem-67-1-17>

## References

1. Mayanskii D. N. Kupffer cells and liver pathology. *Patologicheskaya fiziologiya i eksperimental'naya terapiya = Pathological Physiology and Experimental Therapy*, 1985, vol. 29, no. 4, pp. 80–86 (in Russian).
2. Teylor B. S., Alarson L. H., Billiar T. R. Inducible nitric oxide synthase in the liver: regulation and function. *Biokhimiya = Biochemistry*, 1998, vol. 63, no. 7, pp. 905–923 (in Russian).
3. Moshage H. Cytokines and the hepatic acute phase response. *Journal of Pathology*, 1997, vol. 181, no. 3, pp. 257–266. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1096-9896\(199703\)181:3%3C257::aid-path756%3E3.0.co;2-u](https://doi.org/10.1002/(sici)1096-9896(199703)181:3%3C257::aid-path756%3E3.0.co;2-u)
4. Suzuki H., Menegazzi M., Carcereri de Prati A., Mariotto S., Armato U. Nitric oxide in the liver: physiopathological roles. *Advances in Neuroimmunology*, 1995, vol. 5, no. 4, pp. 379–410. [https://doi.org/10.1016/0960-5428\(95\)00024-0](https://doi.org/10.1016/0960-5428(95)00024-0)
5. Yakovlev M. Yu. *Systemic Endotoxemia*. Moscow, 2021. 184 p. (in Russian).
6. Turakulov Ya. Kh., Tashkodzhayeva T. P., Artykbayeva G. M. Activity of thyroxine conversion to triiodothyronine in the liver and kidneys of rats. *Problemy endokrinologii = Problems of Endocrinology*, 1991, vol. 37, no. 4, pp. 44–46 (in Russian).
7. Kelly G. S. Peripheral metabolism of thyroid hormones: a review. *Alternativ Medical Review*, 2000, vol. 5, no. 4, pp. 306–333.
8. Gerasevich A. N., Nikiforov D. V., Terebei I. A., Popitich P. P., Blazhei N. A. Effect of experimental hypo- and hyperthyroidism on circadian rhythms of body temperature in rats. *Biologicheskiye ritmy: materialy Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii, GNP «Belovezhskaya pushcha»* [Biological Rhythms: Materials of the International Scientific and Practical Conference, Belovezhskaya Pushcha National Park]. Brest, 1999, pp. 72–73 (in Russian).
9. Gorodetskaya I. V. Dependence of the effectiveness of adaptation to heat on the thyroid status of the organism. *Vesti Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya biyalagichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Biological series*, 2000, no. 3, pp. 109–113 (in Russian).
10. Grishchenko K. N., Vismont F. I. The role of Kupffer cells in the formation of thyroid status and thermoregulatory reactions of the body to the action of bacterial endotoxin. *Zdravookhraneniye = Healthcare*, 2002, no. 5, pp. 32–35 (in Russian).
11. Vismont F. I. Role of endotoxemia in body thyroid status and thermoregulation formation. *Zdravookhraneniye = Healthcare*, 2011, no. 9, pp. 26–29 (in Russian).
12. Vismont F. I. Endotoxemia role in deregulating pathologies. *Zdravookhraneniye = Healthcare*, 2012, no. 1, pp. 17–21 (in Russian).
13. Visser T. J., Kaptein E., Terpstra O. T., Krenning E. P. Deiodination of thyroid hormone by human liver. *Journal of Clinical Endocrinology and Metabolism*, 1988, vol. 67, no. 1, pp. 17–24. <https://doi.org/10.1210/jcem-67-1-17>

## Информация об авторе

Висмонт Франтишек Иванович – член-корреспондент, д-р мед. наук, профессор, заведующий кафедрой. Белорусский государственный медицинский университет (пр-т Дзержинского, 83, 220116, Минск, Республика Беларусь). E-mail: patfiz@bsmu.by.

## Information about the author

Vismont Frantisek I. – Corresponding Member, D. Sc. (Medicine), Professor, Head of the Department. Belarusian State Medical University (83, Dzerzhinsky Ave, 220116, Minsk, Belarus). E-mail: patfiz@bsmu.by.

**ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ****TECHNICAL SCIENCES**

УДК 544.023.221[678+661.682; 661.847.2]004.89  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-150-158>

Поступило в редакцию 06.11.2024  
Received 06.11.2024

**Д. В. Сапсалёв<sup>1,2</sup>, Г. Б. Мельникова<sup>1</sup>, Т. Н. Толстая<sup>1</sup>, академик С. А. Чижик<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси,  
Минск, Республика Беларусь*

<sup>2</sup>*Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка,  
Минск, Республика Беларусь*

**ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА  
ЛЕНГМЮРА–БЛОДЖЕТТ ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛКАРБАЗОЛА  
С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ**

**Аннотация.** Разработана методика формирования тонкопленочных наноструктурированных покрытий на основе поливинилкарбазола (ПВК) с наночастицами диоксида кремния и оксида цинка методом Ленгмюра–Блоджетт (ЛБ). На основании анализа изотермы сжатия монослоя ПВК и данных атомно-силовой микроскопии о структурно-морфологических характеристиках ЛБ-пленок, сформированных способом горизонтального осаждения на поверхности гидрофилизированных кремниевых подложек при различных значениях поверхностного давления ( $\pi$ ), установлено, что плотные покрытия на основе ПВК формируются при  $\pi = 15$  мН/м. Оптимальное содержание наночастиц (на 1 моль полимера) в суспензиях для получения однородных наноструктурированных покрытий составляет до  $24,44 \cdot 10^3$  моль (для  $\text{SiO}_2$ ) и до  $4,53 \cdot 10^3$  моль (для  $\text{ZnO}$ ). Описан характер влияния введения наночастиц на структуру, смачиваемость и локальные механические характеристики формируемых композиционных покрытий. На основании рассчитанных значений модуля сжатия монослоев ПВК, ПВК– $\text{SiO}_2$ , ПВК– $\text{ZnO}$  и комплекса полученных в ходе выполнения работы экспериментальных данных показано, что модуль сжатия полимерных и нанокomпозиционных монослоев Ленгмюра–Блоджетт может быть использован в качестве количественного критерия оценки плотности формируемых покрытий.

**Ключевые слова:** метод Ленгмюра–Блоджетт, поливинилкарбазол, тонкие нанокomпозиционные пленки, атомно-силовая микроскопия, неорганические наночастицы

**Для цитирования.** Особенности формирования, структура и свойства Ленгмюра–Блоджетт пленок поливинилкарбазола с неорганическими наночастицами / Д. В. Сапсалёв, Г. Б. Мельникова, Т. Н. Толстая, С. А. Чижик // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 150–158. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-150-158>

**Dmitry V. Sapsaliou<sup>1,2</sup>, Galina B. Melnikova<sup>1</sup>, Tatyana N. Tolstaya<sup>1</sup>, Academician Sergei A. Chizhik<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Science of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*  
<sup>2</sup>*Belarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank, Minsk, Republic of Belarus*

**FEATURES OF FORMATION, STRUCTURE AND PROPERTIES OF LANGMUIR–BLODGETT FILMS  
OF POLY(VINYL CARBAZOLE) WITH INORGANIC NANOPARTICLES**

**Abstract.** A technique for the forming of thin-film nanostructured coatings based on poly(vinyl carbazole) (PVCz) with silicon dioxide and zinc oxide nanoparticles using the Langmuir–Blodgett (LB) method has been developed. Based on the analysis of the PVCz monolayer compression isotherm and atomic force microscopy data on the structural and morphological characteristics of LB films formed by horizontal deposition on the surface of hydrophilized silicon substrates at different values of surface pressure ( $\pi$ ), it has been established that the densest PVCz-based coatings are formed at  $\pi = 15$  mN/m. The optimal content of nanoparticles (per 1 mol of polymer) in suspensions for obtaining uniform nanostructured coatings is up to  $24.44 \cdot 10^3$  mol (for  $\text{SiO}_2$ ) and up to  $4.53 \cdot 10^3$  mol (for  $\text{ZnO}$ ). The effect of the introduction of nanoparticles on the structure, wettability and local mechanical characteristics of the formed composite coatings is described. Based on the calculated values of the compression modulus of PVCz, PVCz– $\text{SiO}_2$ , PVCz– $\text{ZnO}$  monolayers and a set of experimental data obtained during the

work, it is shown that the compression modulus of polymer and nanocomposite LB monolayers can be used as a quantitative criterion for assessing the density of the formed coatings.

**Keywords:** Langmuir–Blodgett method, poly(vinyl carbazole), thin nanocomposite films, atomic force microscopy, inorganic nanoparticles

**For citation.** Sapsaliou D. V., Melnikova G. B., Tolstaya T. N., Chizhik S. A. Features of formation, structure and properties of Langmuir–Blodgett films of poly(vinyl carbazole) with inorganic nanoparticles. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 150–158 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-150-158>

**Введение.** Наноконпозиционные материалы на основе высокомолекулярных соединений широко применяются в науке и технике, что обусловлено уникальным комплексом их свойств (электрических, магнитных, оптических и пр.) [1–3]. Исследования в области получения и определения перспектив практического использования полимер-неорганических наноконпозитов связаны, главным образом, с подбором соответствующих полимеров, оптимизацией условий получения материалов для минимизации агрегации нанонаполнителя и обеспечения наличия требуемых характеристик у формируемого композита (получение материалов с заранее заданными свойствами) [2; 4].

Для решения обозначенных задач необходим точный контроль структуры формируемых наноконпозитов, что возможно с использованием метода Ленгмюра–Блоджетт (ЛБ). Данный метод обеспечивает высокую степень контроля толщины пленки формируемого материала и ее молекулярной организации, что не может быть достигнуто другими распространенными способами (спин-коатинг, полив, распыление и пр.) получения полимерных наноконпозитов [5]. Например, в [6] приводится методика получения наноконпозиционных пленок ЛБ состава полималеиновый моноэфир–наночастицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (ПММЭ–нч  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) путем переноса комплексных монослоев ПММЭ–нч  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  в гидрозольной субфазе наночастиц  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  на твердые подложки. Однородное распределение наночастиц в полимерной матрице подтверждено результатами просвечивающей электронной и атомно-силовой микроскопии. Получены высокоориентированные наноконпозиционные структуры полииндола с наночастицами Ag. Равномерное распределение наночастиц в полимерной матрице установлено микро- и макроскопическими методами анализа поверхности [7].

Следует отметить, что полимеры являются более сложными материалами для реализации технологии ЛБ по сравнению с классическими объектами – низкомолекулярными амфифилами. Исследователям при работе с высокомолекулярными соединениями необходимо учитывать разнообразие возможных свойств макромолекул (полидисперсность, жесткость цепи, растворимость в том или ином растворителе, поверхностная активность и пр.) [8]. Указанные обстоятельства, в совокупности с многообразием возможных составов полимер–нанонаполнитель, обуславливают отсутствие системности в представлении информации по покрытиям ЛБ на основе высокомолекулярных соединений.

В частности, для тонких пленок карбазолсодержащих полимеров показаны перспективы применения в электронике, оптике, фотовольтаике, сенсорики [9; 10] и т. д. Тем не менее, информация по данному направлению исследований представлена отдельными сообщениями, чем и обусловлена актуальность фундаментальных исследований.

Цель работы – разработка методики формирования тонкопленочных покрытий Ленгмюра–Блоджетт на основе поливинилкарбазола (ПВК) с наночастицами диоксида кремния и оксида цинка; изучение структуры, локальных механических и гидрофильных свойств сформированных покрытий.

**Материалы и методы исследования.** Формирование пленок ЛБ осуществляли способом горизонтального осаждения с использованием установки «Автоматизированный комплекс для модифицирования поверхностей мембран молекулярными и ультратонкими слоями» (Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси) на поверхности гидрофилизированных кремниевых пластин (ориентация 111, размеры  $1,5 \times 1,5$  см) [11].

Поверхностное давление формирования монослоев определяли на основании анализа изотерм «поверхностное давление – площадь на молекулу» ( $\pi$ - $A$ -изотерм), регистрируемых при ско-

рости сжатия монослоя 0,4 мм/с. Модуль сжатия ( $k$ ) монослоев ЛБ рассчитывали для линейных участков изотерм сжатия, соответствующих фазовому состоянию «твердый кристалл» ( $\pi = 10\text{--}20$  мН/м), согласно формулам

$$\delta = -\frac{1}{A} \frac{dA}{d\pi},$$

$$k = \frac{1}{\delta},$$

где  $\delta$  – сжимаемость монослоя, м/мН;  $k$  – модуль сжатия монослоя, мН/м;  $A$  – значение площади на молекулу начала анализируемого линейного участка изотермы сжатия, нм<sup>2</sup>;  $d\pi$  – изменение поверхностного давления в пределах анализируемого линейного участка изотермы сжатия, мН/м;  $dA$  – изменение площади на молекулу в пределах анализируемого линейного участка изотермы сжатия, нм<sup>2</sup> [12; 13].

ЛБ-пленки ПВК (Sigma-Aldrich,  $M = 1100000$ ) формировали из его раствора в хлороформе с концентрацией 0,75 мг/мл. С целью получения покрытий, обладающих более развитой поверхностью, в структуру полимерной матрицы вводили наночастицы диоксида кремния и оксида цинка. Для этого раствор ПВК ( $c = 1,5$  мг/мл) смешивали с суспензиями наночастиц SiO<sub>2</sub> (Sigma-Aldrich,  $d = 10\text{--}20$  нм) и ZnO (Sigma-Aldrich,  $d < 100$  нм) различных концентраций в хлороформе, предварительно выдержанными в ультразвуковой ванне в течение 10 мин, в объемном соотношении 1 : 1, после чего повторяли процедуру обработки готовых суспензий ультразвуком в течение 5 мин. В результате были приготовлены рабочие суспензии для формирования ЛБ-покрытий, содержащие  $6,11 \cdot 10^3$ ,  $12,22 \cdot 10^3$ ,  $24,44 \cdot 10^3$ ,  $48,89 \cdot 10^3$ ,  $73,33 \cdot 10^3$  моль SiO<sub>2</sub> и  $1,13 \cdot 10^3$ ,  $2,26 \cdot 10^3$ ,  $4,53 \cdot 10^3$ ,  $9,05 \cdot 10^3$ ,  $18,11 \cdot 10^3$  моль ZnO из расчета на 1 моль полимера.

Структуру поверхности сформированных покрытий исследовали методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на установке NT-206 с использованием кремниевых кантилеверов NSC 11 A (Mickromasch, Эстония), средняя жесткость, согласно паспорту производителя, 3 Н/м. Локальные значения модуля упругости рассчитывали на основании данных, полученных при снятии кривых «подвода–отвода» (по 20 кривых для каждого образца) кантилевера к поверхности образца в контактном режиме работы АСМ с использованием функции Spectroscopy in point («статическая силовая спектроскопия») по модели Джонсона–Кенделла–Робертса [14]. Толщину монослойного покрытия ПВК на кремниевой подложке определяли по профилю покрытия с искусственно созданным дефектом, образованным в результате увеличения нагрузки при сканировании области минимальной площади ( $\approx 400$  нм<sup>2</sup>).

Гидрофильные свойства поверхности сформированных покрытий оценивали на установке DSA 100E (KRUSS, Германия) измерением краевого угла смачивания по двум рабочим жидкостям – дистиллированной воде и диодметану (Acros Organics, США). Контактный угол определяли методом лежащей капли (построением касательной в трехфазной точке: жидкость–подложка–воздух). Значения дисперсионной ( $\gamma^d$ ) и полярной ( $\gamma^p$ ) составляющих удельной поверхностной энергии рассчитывали по модели Оуэнса–Вендта–Рабея–Кьельбле [15].

**Результаты и их обсуждение.** Поверхностное давление выделения полимерных и наноконпозиционных ЛБ-покрытий определяли на основании анализа изотерм сжатия монослоев и данных АСМ о морфологических характеристиках пленок, сформированных на поверхности гидрофилизированных кремниевых подложек при различных  $\pi$ .

Установлено, что плотные пленки ПВК формируются на поверхности кремниевых пластин при величинах поверхностного давления от 10 мН/м, что соответствует началу участка изотермы сжатия, отвечающему фазовому состоянию монослоя «твердый кристалл». Наименьшим количеством дефектов характеризуются ЛБ-пленки ПВК, сформированные при  $\pi = 15$  мН/м; толщина покрытия, оцененная по профилю искусственно созданного дефекта, составила 5,9 нм. Увеличение поверхностного давления до 20 мН/м сопровождается значительным ростом стандартного отклонения величин среднеарифметической ( $R_a$ ) и среднеквадратичной ( $R_q$ ) шероховатости покрытий ЛБ (область сканирования  $5 \times 5$  мкм), что свидетельствует о начале реструктуризации пленки (рис. 1).

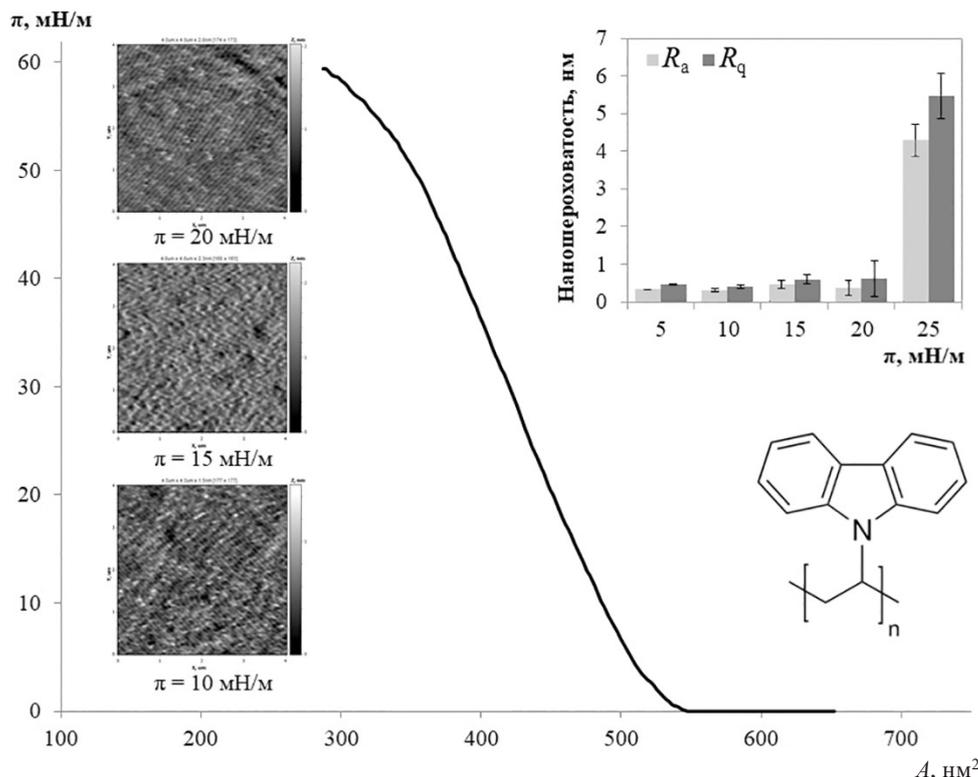


Рис. 1. Изотерма сжатия монослоя ПВК, а также данные АСМ о структуре и шероховатости полимерных покрытий, сформированных методом Ленгмюра–Блоджетт на поверхности гидрофилизированных кремниевых пластин, при различных значениях поверхностного давления

Fig. 1. Compression isotherm of a PVCz monolayer and AFM data on the structure and nanoroughness of polymer coatings formed by the Langmuir–Blodgett method on the surface of hydrophilized silicon wafers at different values of surface pressure

Полагаем, что подобное поведение ПВК на границе раздела субфаза–воздух обусловлено жесткостью его молекулярных цепей. При избыточном (свыше 20 мН/м) сжатии монослоя со стороны барьеров установки происходят локальные разрушения пленки ПВК с образованием неоднородных участков, наслаивающихся друг на друга. При дальнейшем увеличении  $\pi$  до 25 мН/м наблюдается многократный рост параметров шероховатости поверхности покрытий (рис. 1).

Таким образом, на основании анализа изотермы сжатия монослоя ПВК, данных АСМ о структуре покрытий, сформированных на кремниевых подложках при различных  $\pi$ , установлено, что плотные монослои ПВК с минимальным количеством дефектов формируются при  $\pi = 15$  мН/м. Выделение композиционных пленок с неорганическими наночастицами осуществляли при указанном значении  $\pi$ .

**Наноконпозиционные пленки ПВК.** Для оценки плотности наноконпозиционных пленок Ленгмюра–Блоджетт проанализирована зависимость модуля сжатия монослоев на основе ПВК от содержания в их составе наночастиц диоксида кремния и оксида цинка. Полученные результаты приведены в таблице.

Согласно полученным значениям  $k$ , введение неорганических наночастиц приводит к увеличению модуля сжатия монослоев на основе ПВК, что свидетельствует об их равномерном распределении и заполнении собственных дефектов полимерной матрицы. Плотные ЛБ-слои формируются из суспензий со следующими содержаниями (моль на 1 моль ПВК) наночастиц: для SiO<sub>2</sub> – 6,11 · 10<sup>3</sup> и 12,22 · 10<sup>3</sup>; для ZnO – 2,26 · 10<sup>3</sup> и 4,53 · 10<sup>3</sup>.

Установленные соответствия согласуются с результатами АСМ-анализа ЛБ-покрытий, сформированных на поверхности гидрофилизированных кремниевых пластин. Так, однородные наноконпозиционные ЛБ-пленки формируются при содержании наночастиц SiO<sub>2</sub> – до 24,44 · 10<sup>3</sup> моль; ZnO – до 4,53 · 10<sup>3</sup> моль (рис. 2, а–с; 3, а–с).

**Зависимость модуля сжатия ( $k$ ) монослоев ПВК–SiO<sub>2</sub> и ПВК–ZnO от содержания наночастиц в полимерной матрице (на участке  $\pi = 10\text{--}20$  мН/м)**  
**Dependence of the compression modulus ( $k$ ) of PVCz–SiO<sub>2</sub> and PVCz–ZnO monolayers on the content of nanoparticles in the polymer matrix (in the range of  $\pi = 10\text{--}20$  мН/м)**

Монослой Monolayer	Содержание наночастиц (моль на 1 моль ПВК) Content of nanoparticles (mole per 1 mole PVC)	Значения $k$ (мН/м) $k$ values (mN/m)
ПВК	0	93,5
ПВК–SiO <sub>2</sub>	$6,11 \cdot 10^3$	138,2
	$12,22 \cdot 10^3$	112,5
	$24,44 \cdot 10^3$	104,4
	$48,89 \cdot 10^3$	93,6
	$73,33 \cdot 10^3$	75,9
ПВК–ZnO	$1,13 \cdot 10^3$	102,4
	$2,26 \cdot 10^3$	131,2
	$4,53 \cdot 10^3$	144,4
	$9,05 \cdot 10^3$	103,7
	$18,11 \cdot 10^3$	100,9

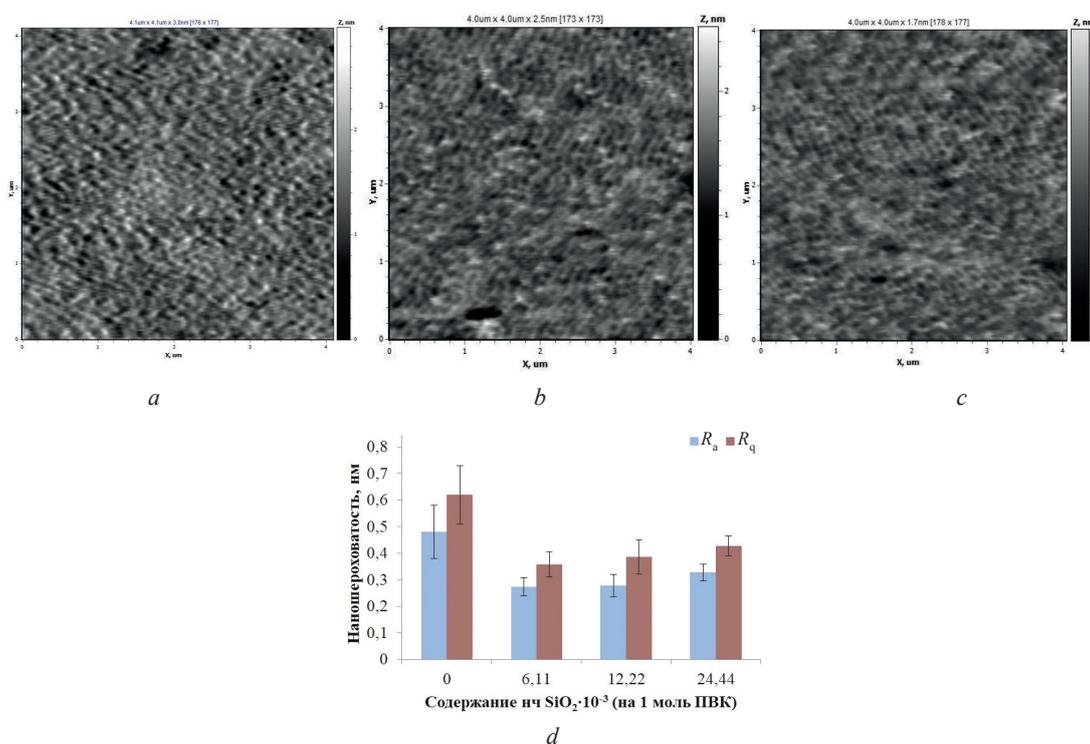


Рис. 2. Данные АСМ о структуре (а–с) и нанощероховатости (d) ЛБ-пленок ПВК–SiO<sub>2</sub>, сформированных способом горизонтального осаждения, на поверхности гидрофилизированных кремниевых пластин при  $\pi = 15$  мН/м. Мольное содержание наночастиц SiO<sub>2</sub> (на 1 моль ПВК): а –  $6,11 \cdot 10^3$ ; б –  $12,22 \cdot 10^3$ ; с –  $24,44 \cdot 10^3$

Fig. 2. AFM data on the structure (a–c) and nanoroughness (d) of PVCz–SiO<sub>2</sub> LB films formed by horizontal deposition on the surface of hydrophilized silicon wafers at  $\pi = 15$  мН/м. Molar content of SiO<sub>2</sub> nanoparticles (per 1 mole of PVCz): a –  $6.11 \cdot 10^3$ ; b –  $12.22 \cdot 10^3$ ; c –  $24.44 \cdot 10^3$

Превышение указанных содержаний наночастиц в рабочей суспензии для формирования покрытий ЛБ приводит к разупорядочиванию монослоя вследствие образования больших конгломератов наночастиц как сферической, так и неправильной формы, что сопровождается снижением значений модуля сжатия композиционных монослоев (таблица).

Уплотнение монослоев при введении в структуру матрицы ПВК наночастиц подтверждается также результатами оценки нанощероховатости ЛБ-пленок. Наноконпозиты, для монослоев которых рассчитанные значения модуля сжатия превышают значения для исходного полимера,

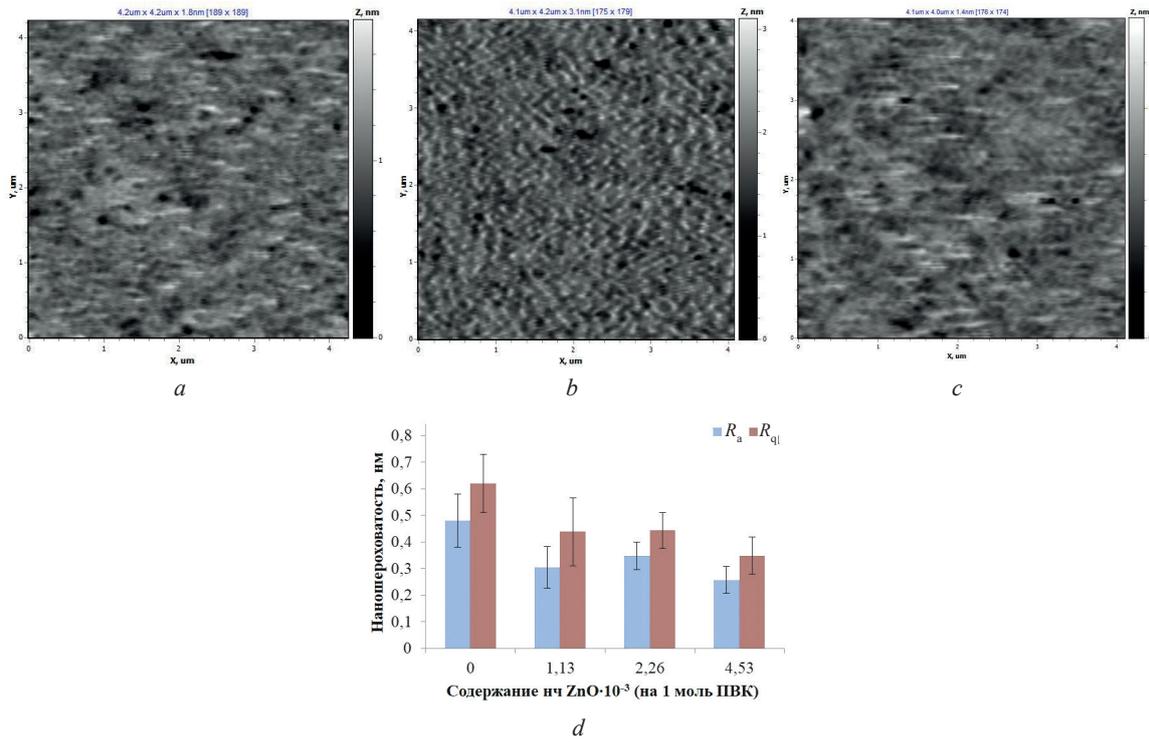


Рис. 3. Данные АСМ о структуре (а–с) и нанорoughности (d) ЛБ-пленок ПВК–ZnO, сформированных способом горизонтального осаждения, на поверхности гидрофилизированных кремниевых пластин при  $\pi = 15$  мН/м. Мольное содержание наночастиц ZnO (на 1 моль ПВК): а –  $1,13 \cdot 10^3$ ; б –  $2,26 \cdot 10^3$ ; с –  $4,53 \cdot 10^3$

Fig. 3. AFM data on the structure (a–c) and nanoroughness (d) of PVCz–ZnO LB films formed by horizontal deposition on the surface of hydrophilized silicon wafers at  $\pi = 15$  mN/m. Molar content of ZnO nanoparticles (per 1 mole of PVCz): a –  $1.13 \cdot 10^3$ ; b –  $2.26 \cdot 10^3$ ; c –  $4.53 \cdot 10^3$

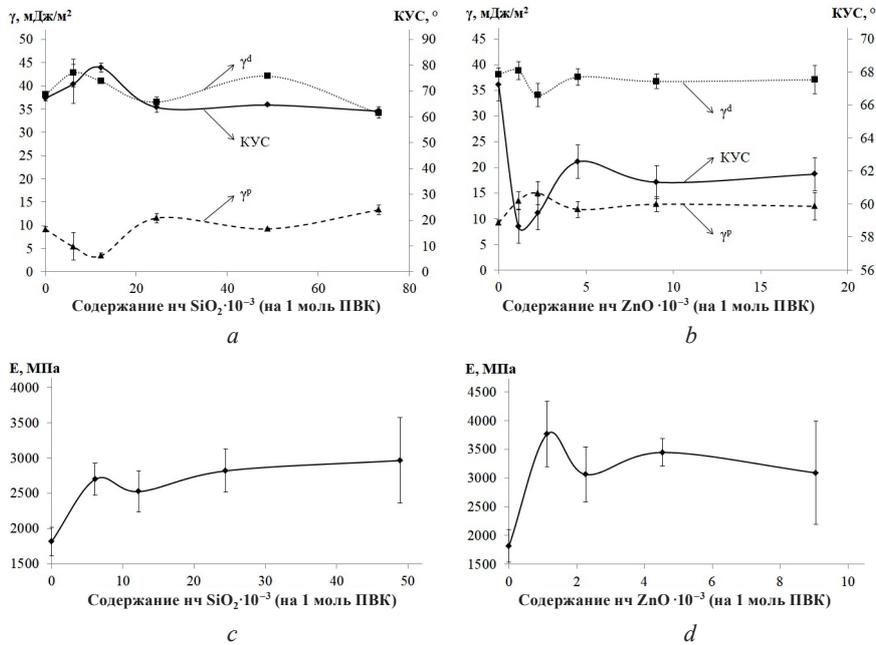


Рис. 4. Зависимости параметров смачиваемости (a, b) и значений локального модуля упругости (c, d) наноструктурированных покрытий ЛБ на основе ПВК от содержания неорганических наночастиц в полимерной матрице

Fig. 4. Dependences of wettability parameters (a, b) and local elastic modulus values (c, d) of nanostructured PVCz-based LB coatings on the content of inorganic nanoparticles in the polymer matrix

демонстрируют более низкие величины параметров  $R_a$  и  $R_q$  и их стандартного отклонения (таблица, рис. 2, *d*; 3, *d*).

Для композиционных покрытий ПВК–SiO<sub>2</sub> наблюдается рост значений краевого угла смачивания до содержания наночастиц в структуре пленки  $12,22 \cdot 10^3$  моль (рис. 4, *a*), что обусловлено заполнением наночастицами межмакромолекулярного пространства ПВК и уплотнением структуры. Последующее увеличение содержания наночастиц SiO<sub>2</sub> в составе композитов приводит к повышению смачиваемости за счет роста полярной составляющей удельной поверхностной энергии, обусловленного агрегацией избыточных количеств модификатора. Конгломераты наночастиц могут также выступать на поверхность из-за «выдавливания» больших агрегатов жесткими молекулярными цепями полимера.

Модификация ПВК наночастицами ZnO приводит к увеличению смачиваемости ЛБ-покрытий для всех исследуемых соотношений за счет роста полярной составляющей удельной поверхностной энергии (рис. 4, *b*). Максимальное значение  $\gamma^p$  ( $14,98$  мДж/м<sup>2</sup>) зафиксировано для пленки ПВК–ZnO ( $2,26 \cdot 10^3$  моль).

Введение наночастиц в структуру матрицы ПВК приводит к росту значений локального модуля упругости  $E$ , что позволяет сделать вывод об армирующем эффекте нанонаполнителей. Отмечается схожий характер зависимости  $E$  от содержания наночастиц для составов ПВК–SiO<sub>2</sub> и ПВК–ZnO: повышение значений при введении небольших количеств модификатора и последующий выход на плато (рис. 4, *c*, *d*).

**Заключение.** Разработана методика формирования тонкопленочных наноструктурированных покрытий на основе ПВК с наночастицами диоксида кремния и оксида цинка методом Ленгмюра–Блоджетт: концентрация полимера в растворе (суспензии) – 0,75 мг/мл; поверхностное давление выделения пленок – 15 мН/м; молярные содержания наночастиц в рабочих суспензиях – до  $24,44 \cdot 10^3$  моль (для SiO<sub>2</sub>) и до  $4,53 \cdot 10^3$  моль (для ZnO).

На основании рассчитанных значений модуля сжатия монослоев ПВК, ПВК–SiO<sub>2</sub>, ПВК–ZnO и комплекса экспериментальных данных о морфологических, гидрофильных и локальных механических свойствах ЛБ-пленок показано, что модуль сжатия полимерных и наноконпозиционных монослоев Ленгмюра–Блоджетт может быть использован в качестве количественного критерия оценки плотности формируемых покрытий.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственной программы научных исследований на 2021–2025 гг. «Энергетические и ядерные процессы и технологии», подпрограммы «Энергетические процессы и технологии» (задание 2.25).

**Acknowledgements.** The investigation was performed within the state program of scientific research for 2021–2025 “Energy and nuclear processes and technologies”, subprogram “Energy processes and technologies” (assignment 2.25).

### Список использованных источников

1. A Comprehensive review on polymer nanocomposites; classification, properties and potential applications / A. Khan, S. Iqbal, M. Khan [et al.] // Journal of Nanoscope. – 2023. – Vol. 4, N 1. – P. 45–74. <https://doi.org/10.52700/jn.v4i1.88>
2. Ganesan, V. Some issues in polymer nanocomposites: Theoretical and modeling opportunities for polymer physics / V. Ganesan // Journal of Polymer Science. Part B: Polymer Physics. – 2008. – Vol. 46, N 24. – P. 2666–2671. <https://doi.org/10.1002/polb.21587>
3. Hanemann, T. Polymer-nanoparticle composites: from synthesis to modern applications / T. Hanemann, D. V. Szabó // Materials. – 2010. – Vol. 3, N 6. – P. 3468–3517. <https://doi.org/10.3390/ma3063468>
4. Martín-García, B. Block copolymer assisted self-assembly of nanoparticles into Langmuir–Blodgett films: Effect of polymer concentration / B. Martín-García, M. Mercedes Velázquez // Materials Chemistry and Physics. – 2013. – Vol. 141, N 1. – P. 324–332. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2013.05.017>
5. Conjugated polymers as Langmuir and Langmuir–Blodgett films: Challenges and applications in nanostructured devices / R. Da Rocha Rodrigues, R. L. C. G. da Silva, L. Caseli, L. O. Peres // Advances in Colloid and Interface Science. – 2020. – Vol. 285. – Art. 102277. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102277>
6. Structure and characterization of nanocomposite Langmuir–Blodgett films of poly(maleic monoester)/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticle complexes / D. K. Lee, Yo. S. Kang, Ch. S. Lee, P. Stroeve // Journal of Physical Chemistry B. – 2002. – Vol. 106, N 29. – P. 7267–7271. <https://doi.org/10.1021/jp014446t>
7. Synthesis of uniformly dispersed large area polymer/AgNPs thin film at air-liquid interface for electronic application / R. Mishra, R. K. Pandey, S. Jana [et al.] // Materials Today Communications. – 2020. – Vol. 24. – Art. 101191. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101191>

8. Phase transitions in polymer monolayers: Application of the Clapeyron equation to PEO in PPO–PEO Langmuir films / L. Deschênes, J. Lyklema, C. Danis, F. Saint-Germain // *Advances in Colloid and Interface Science*. – 2015. – Vol. 222. – P. 199–214. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2014.11.002>
9. Jun-Fu, Liu. Langmuir–Blodgett films of poly-*N*-vinylcarbazole prepared by radical polymerization method / Jun-Fu Liu, Zu-Hong Lu, Kong-Zhang Yang // *Thin Solid Films*. – 1998. – Vol. 322, N 1–2. – P. 308–313. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(97\)00942-5](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(97)00942-5)
10. Room temperature operated ammonia gas sensor using polycarbazole Langmuir–Blodgett film / V. Saxena, S. Choudhury, S. C. Gadkari [et al.] // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2005. – Vol. 107, N 1. – P. 277–282. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2004.10.011>
11. Тонкие композиционные пленки полиметилметакрилата с наночастицами диоксида кремния / Д. В. Сапсалёв, Г. Б. Мельникова, В. А. Лапицкая [и др.] // *Журнал Белорусского государственного университета. Химия*. – 2021. – № 2. – С. 36–49. <https://doi.org/10.33581/2520-257X-2021-2-36-49>
12. Исследование структурных и пьезоэлектрических свойств пленок ПВДФ, полученных методом Ленгмюра–Блоджетт / И. А. Горбачев, А. В. Смирнов, Е. С. Шамсутдинова [и др.] // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2021. – Т. 85, № 6. – С. 777–782.
13. A Langmuir–Schaefer approach for the synthesis of highly ordered organoclay thin films / L. M. Toma, R. Y. N. Gengler, E. B. Prinsen [et al.] // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2010. – Vol. 12, N 38. – P. 12188–12197. <https://doi.org/10.1039/c0cp00286k>
14. Johnson, K. L. Surface energy and the contact of elastic solids / K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. – 1971. – Vol. 324, N 1558. – P. 301–313. <https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141>
15. Kaelble, D. H. Dispersion-polar surface tension properties of organic solids / D. H. Kaelble // *Journal of Adhesion*. – 1970. – Vol. 2, N 2. – P. 66–81. <https://doi.org/10.1080/0021846708544582>

## References

1. Khan A., Iqbal S., Khan M., Iqbal F., Musaddiq S., Masoom W., Sarwar A. A comprehensive review on polymer nanocomposites; classification, properties and potential applications. *Journal of Nanoscope*, 2023, vol. 4, no. 1, pp. 45–74. <https://doi.org/10.52700/jn.v4i1.88>
2. Ganesan V. Some issues in polymer nanocomposites: Theoretical and modeling opportunities for polymer physics. *Journal of Polymer Science. Part B: Polymer Physics*, 2008, vol. 46, no. 24, pp. 2666–2671. <https://doi.org/10.1002/polb.21587>
3. Hanemann T., Szabó D. V. Polymer-nanoparticle composites: from synthesis to modern applications. *Materials*, 2010, vol. 3, no. 6, pp. 3468–3517. <https://doi.org/10.3390/ma3063468>
4. Martín-García B., Mercedes Velázquez M. Block copolymer assisted self-assembly of nanoparticles into Langmuir–Blodgett films: Effect of polymer concentration. *Materials Chemistry and Physics*, 2013, vol. 141, no. 1, pp. 324–332. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2013.05.017>
5. Da Rocha Rodrigues R., Da Silva R. L. C. G., Caseli L., Péres L. O. Conjugated polymers as Langmuir and Langmuir–Blodgett films: Challenges and applications in nanostructured devices. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2020, vol. 285, art. 102277. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102277>
6. Lee D. K., Kang Y. S., Lee C. S., Stroeve P. Structure and characterization of nanocomposite Langmuir–Blodgett films of poly(maleic monoester)/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticle complexes. *Journal of Physical Chemistry B*, 2002, vol. 106, no. 29, pp. 7267–7271. <https://doi.org/10.1021/jp014446t>
7. Mishra R., Pandey R. K., Jana S., Upadhyay C., Prakash R. Synthesis of uniformly dispersed large area polymer/AgNPs thin film at air-liquid interface for electronic application. *Materials Today Communications*, 2020, vol. 24, art. 101191. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101191>
8. Deschênes L., Lyklema J., Danis C., Saint-Germain F. Phase transitions in polymer monolayers: Application of the Clapeyron equation to PEO in PPO–PEO Langmuir films. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2015, vol. 222, pp. 199–214. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2014.11.002>
9. Jun-Fu Liu, Zu-Hong Lu, Kong-Zhang Yang. Langmuir–Blodgett films of poly-*N*-vinylcarbazole prepared by radical polymerization method. *Thin Solid Films*, 1998, vol. 322, no. 1–2, pp. 308–313. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(97\)00942-5](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(97)00942-5)
10. Saxena V., Choudhury S., Gadkari S. C., Gupta S. K., Yakhmi J. V. Room temperature operated ammonia gas sensor using polycarbazole Langmuir–Blodgett film. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2005, vol. 107, no. 1, pp. 277–282. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2004.10.011>
11. Sapsaliou D. V., Melnikova G. B., Lapitskaya V. A., Tolstaya T. N., Kuznetsova T. A., Kotov D. A., Chizhik S. A. Thin composite polymethyl methacrylate films with silicon dioxide nanoparticles. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Khimiya = Journal of the Belarusian State University. Chemistry*, 2021, no. 2, pp. 36–49 (in Russian). <https://doi.org/10.33581/2520-257X-2021-2-36-49>
12. Gorbachev I. A., Smirnov A. V., Shamsutdinova E. S., Kashin V. V., Anisimkin V. I., Kolesov V. V., Kuznetsova I. E., Yudin S. G. Studying the structural and piezoelectric properties of PVDF films obtained using Langmuir–Blodgett technology. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2021, vol. 85, no. 6, pp. 603–607. <https://doi.org/10.3103/s1062873821060101>
13. Toma L. M., Gengler R. Y. N., Prinsen E. B., Gournis D., Rudolf P. A Langmuir–Schaefer approach for the synthesis of highly ordered organoclay thin films. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2010, vol. 12, no. 38, pp. 12188–12197. <https://doi.org/10.1039/c0cp00286k>

14. Johnson K. L., Kendall K., Roberts A. D. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1971, vol. 324, no. 1558, pp. 301–313. <https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141>

15. Kaelble D. H. Dispersion-polar surface tension properties of organic solids. *Journal of Adhesion*, 1970, vol. 2, no. 2, pp. 66–81. <https://doi.org/10.1080/0021846708544582>

### Информация об авторах

*Саспалёв Дмитрий Владимирович* – мл. науч. сотрудник. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Беларусь); аспирант. Белорусский государственный педагогический университет им. М. Танка (ул. Советская, 18, 220030, Минск, Республика Беларусь). E-mail: dsapsalev@list.ru.

*Мельникова Галина Борисовна* – канд. техн. наук, ст. науч. сотрудник. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: galachkax@gmail.com.

*Толстая Татьяна Николаевна* – науч. сотрудник. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: tolstaya.tn@yandex.ru.

*Чижик Сергей Антонович* – академик, д-р техн. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: chizhik\_sa@tut.by.

### Information about the authors

*Sapsaliou Dmitry V.* – Junior Researcher. A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus); Postgraduate Student. Belarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank (18, Sovetskaya Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: dsapsalev@list.ru.

*Melnikova Galina B.* – Ph. D. (Engineering), Senior Researcher. A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: galachkax@gmail.com.

*Tolstaya Tatyana N.* – Researcher. A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tolstaya.tn@yandex.ru.

*Chizhik Sergei A.* – Academician, D. Sc. (Engineering), Professor, Chief Researcher. A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: chizhik\_sa@tut.by.

ISSN 1561-8323 (Print)  
ISSN 2524-2431 (Online)

**СОЦИАЛЬНО-ГУМАНИТАРНЫЕ НАУКИ**  
**SOCIAL SCIENCES AND HUMANITIES**

УДК 165+167/168  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-159-167>

Поступило в редакцию 14.02.2025  
Received 14.02.2025

**В. К. Лукашевич**

*Институт философии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*

**ПРИНЦИП РЕЗОНАНСА В КОНТЕКСТЕ СОВРЕМЕННОГО  
НАУЧНОГО ДИСКУРСА**

*(Представлено академиком Е. М. Бабосовым)*

**Аннотация.** Эксплицирован способ обоснования принципа резонанса и определено его место в составе современного научного дискурса. Данный принцип войдет в него, будучи включенным в философские основания науки, где наряду с группой философских категорий как матрицей мышления выделяется группа философских принципов и норм научного познания, выражающих фундаментальные предпосылки и общую направленность познавательных процессов (принципы взаимодействия, воспроизводимости, рефлексивности, системности, детерминизма, наблюдаемости, простоты и др.). В этой группе должен быть зафиксирован и принцип резонанса, выражающий ориентированность научного познания на поиск резонансных процессов и механизмов их действия в исследуемой реальности и их значимость для ее адекватного интеллектуального и практического освоения. Показано, что принцип резонанса (как и всякое регулятивное средство познавательной деятельности, обосновывающее ее продуктивность) в свою очередь должен быть обоснован. В сообщении эксплицированы два типа его обоснования: когнитивное как обобщение и распространение какого-либо положения (идеи) в определенной сфере познавательной деятельности (в данном случае о креативном значении резонансных процессов) на всю сферу; практическое как успешная практическая деятельность в соответствии с требованиями обосновываемого принципа в технико-технологической сфере (строительстве, радиотехнике, приборостроении, практической медицине, разработке социогуманитарных технологий и др.), где принцип резонанса обеспечивает ориентированность научного дискурса не только на поиск существенно значимых резонансных процессов в исследуемой реальности, но и на создание механизмов их сознательного культивирования, а также по необходимости и нейтрализации. Непосредственно операциональная включенность принципа резонанса в познавательные процессы осуществляется в контексте рационального базиса исследования, коррелирующего с исторически обусловленными типами рациональности.

**Ключевые слова:** научный дискурс, рациональный базис научного исследования, резонанс, стохастический резонанс, экзистенциальный резонанс, принцип резонанса

**Для цитирования.** Лукашевич, В. К. Принцип резонанса в контексте современного научного дискурса / В. К. Лукашевич // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 159–167. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-159-167>

**Vladimir K. Lukashevich**

*Institute of Philosophy of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

**THE PRINCIPLE OF RESONANCE IN THE CONTEXT OF MODERN SCIENTIFIC DISCOURSE**

*(Communicated by Academician Yevgeny M. Babosov)*

**Abstract.** The place is determined and the method of substantiating the principle of resonance in the composition of modern scientific discourse is explicated. This principle will enter it, being included in the philosophical foundations of science, where, along with a group of philosophical categories, as a matrix of thinking, a group of philosophical principles and norms of scientific knowledge is distinguished, expressing the fundamental prerequisites and general orientation of cognitive processes (principles of interaction, reproducibility, reflexivity, consistency, determinism, observability, simplicity, etc.).

In this group, the principle of resonance should also be fixed, expressing the orientation of scientific knowledge towards the search for resonant processes and mechanisms of their action in the reality under study and their significance for its adequate intellectual and practical development. It is shown that the principle of resonance (like any regulatory means of cognitive activity that justifies its productivity) in turn must be substantiated. The article explicated two types of its substantiation: cognitive, as a generalization and distribution of any position (idea) in a certain area of cognitive activity (in this case, about the creative significance of resonant processes) to the entire area; practical as a successful practical activity in accordance with the requirements of the substantiated principle in the technical and technological field (construction, radio engineering, instrument making, practical medicine, development of socio-humanitarian technologies, etc.), where the principle of resonance ensures that the scientific discourse is oriented not only to the search for essentially significant resonant processes in the studied reality, but also on the creation of mechanisms for their conscious cultivation, as well as, if necessary, their neutralization. The direct operational inclusion of the resonance principle in cognitive processes is carried out in the context of a rational basis of research, which correlates with historically conditioned types of rationality.

**Keywords:** scientific discourse, rational basis of scientific research, resonance, stochastic resonance, existential resonance, resonance principle

**For citation.** Lukashevich V. K. The principle of resonance in the context of modern scientific discourse. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 159–167 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-159-167>

**Специфика контекста.** Термином «дискурс» обозначается способ интеллектуального освоения реальности, включающий предметные представления о ней, совокупность средств и путей ее осмысления, а также набор критериев ценности предметных представлений и регулятивных установок познания.

Коррелятивно формам общественного сознания выделяют несколько основных исторически сформировавшихся дискурсов: мифологический, повседневно-обыденный, религиозный, этический, эстетический, игровой и др., составляющих открытое множество, которое не отличается большой мощностью (количеством элементов), но тем не менее актуально обеспечивает духовно-культурную и прагматическую ориентацию людей в конкретных жизненных ситуациях.

Ядро каждого из дискурсов составляет рациональный базис, специфика которого определяет их возможности обеспечивать оправданные ориентации людей в духовном восприятии (познании) и практической ассимиляции (преобразовании) окружающей их реальности. Рациональность в широком смысле – это способность человеческого сознания направлять мышление, поведение и деятельность людей в соответствии с их специфическими интенциями и конкретными целями, а также с объективными законами познаваемой и преобразуемой реальности.

Более конкретно о том, что такое рациональный базис в составе научного дискурса можно пояснить, используя аналогию с понятием эмпирического базиса научного исследования. Как известно, это совокупность данных наблюдений и экспериментов, а также сопряженных с ними сведений исторического и статистического характера о познаваемом объекте. Считается, что в нем представлена та часть знания об исследуемой реальности, которая сохраняет инвариантное значение в русле дальнейших эмпирических и теоретических разработок и в определенной мере оказывает влияние на процесс формирования знания метатеоретического уровня, прежде всего научной картины исследуемой реальности.

Известно также, что эмпирическое знание в целом, соответственно и эмпирический базис научного исследования, включают в свой состав элементы, существенно различающиеся по генезису и когнитивному статусу, и что их принципиально неудаляемым, точнее, необходимым элементом являются рациональные (умственные, интеллектуальные, по философской терминологии, интеллигибельные) образования. Эти элементы квалифицируются нами как составляющие рационального базиса научного исследования. Они обуславливают интенциональность психических процессов, создают механизмы целеполагания, корректируют протекание когнитивных процессов в соответствии с заданными интенциями, целями и задачами научного поиска. К ним относят идеи, гипотезы, теории, исторические аналогии, конструкты как схемы исследуемой реальности и познавательных действий (операций, процедур), научную картину исследуемой реальности, идеалы и нормы научного исследования, типы научной рациональности, философские основания науки. Рациональный базис научного исследования как целостное интеллектуальное образование включает в свой состав совокупность взаимосвязанных знаний предметного, нормативного и рефлексивного характера [1; 2, с. 70–77], которые оцениваются как предметно до-

стоверные представления и креативно эффективные ориентации в перспективе дальнейшего когнитивного освоения реальности. Названное интеллектуальное образование имеет исторический характер, т. е. развивается и меняется вследствие влияний, исходящих из самой научной сферы, а также культуры социума, в котором существует и развивается наука.

Соответственно перманентной методологической проблемой выступает анализ динамики элементов рационального базиса научного дискурса. В настоящее время на переднем крае такого рода исследований оказываются вопросы о полноте содержательного понимания рационального базиса научного исследования и науки в целом, механизмах генезиса и функционирования его продуктивного потенциала в когнитивных процессах, аксиологическом значении и роли в условиях социального праксиологического выбора на основе научного знания в ключевых сферах жизнедеятельности общества (материальном производстве, в выборе экономических трендов, моделей социально-экономического и социально-политического уклада, ориентированности духовной жизни общества, общей направленности развития инновационного комплекса, путей поддержания необходимого качества жизни людей, качества среды обитания и др.). Особо следует выделить вопрос о динамике содержания и регулятивном статусе рационального базиса науки в русле концепции открытой рациональности [3–5], легитимизирующей масштабный релятивизм в понимании рациональности со всеми вытекающими отсюда реальными и потенциальными рисками праксиологического характера.

Исходной методологической посылкой анализа заявленных вопросов является квалификация элементов рационального базиса науки как процессов и результатов креативного взаимодействия предметного, нормативного и рефлексивного знания, ориентированного на поиск регулятивных идей, ограничивающих релятивизм в понимании рациональности и фундирующих ключевые направления когнитивного и праксиологического поиска. Совокупность такого рода идей составляет потенциал продуктивного функционирования рационального базиса науки, что фиксируется в виде представления о типах научной рациональности. Ключевым элементом каждого из них является рефлексивная составляющая, а глубина ее предметного содержания – критерием выделения самих типов.

В настоящее время доминирует известная типологическая концепция научной рациональности, в соответствии с которой на основании способа представленности в ее конкретном типе объективного, определяемого характеристиками исследуемой реальности, и субъективного содержания, генерируемого на основе интенций и предпочтений исследователя, выделяются три ее типа: 1) рациональность в классической науке, 2) рациональность в неклассической науке, 3) рациональность в постнеклассической науке [6].

Как уже было отмечено, рациональный базис науки включает в свой состав совокупность знаний предметного, нормативного и рефлексивного характера. Соответственно поиск его новых элементов должен вестись по всему когнитивному полю, ассимилируемому названными типами знания и в первую очередь там, где наблюдается явное запаздывание философско-методологической рефлексии в интеллектуальном освоении событий, происходящих в сфере научных исследований и их практических приложений.

Одним из отчетливо выраженных и востребованных логикой развития научного дискурса направлений такой работы и соответственно целью данного сообщения является рефлексивное осмысление резонансных процессов в контексте его (научного дискурса) динамики; направления, на наш взгляд, незаслуженно проигнорированного в русле философского анализа когнитивных процессов в науке. Достижение названной цели предполагает в качестве непосредственных задач работы исторический (по необходимости краткий) обзор основных способов когнитивной ассимиляции резонансных процессов в неживой природе, биосфере и социогуманитарной реальности и экспликацию оснований включения принципа резонанса в состав научного дискурса наряду с принципами (взаимодействия, воспроизводимости, детерминация, наблюдаемости, простоты и др.), выражающими фундаментальные предпосылки и общую направленность познавательных процессов.

**Предметно-проблемное поле анализа.** Резонанс – в широком смысле, отклик на определенное воздействие – известен с глубокой древности, причем его «известность» чаще всего обеспе-

чивалась указанием на возможные прагматически полезные влияния метеорологических и космических явлений на хозяйственные дела, медицинскую практику, эмоции людей, поведение живых существ и т. п. На мировоззренческом уровне можно найти фундаментальные объяснения такого рода влияний в форме мифологических и натурфилософских представлений.

В настоящее время резонансные процессы привлекают к себе растущее внимание представителей конкретных наук. По идущей от Г. Галилея «научомерной» традиции осмысление резонансных процессов осуществляется на основе рационально принятых предпосылок: во-первых, о наличии материальных носителей резонансных взаимодействий как сходных элементов в составе образований, взаимодействующих в резонансном режиме; во-вторых, о свойстве носителей резонансных взаимодействий вибрировать (испытывать регулярные параметрические колебания) как способе существования во взаимодействии со средой; в-третьих, о специфическом диапазоне частот колебаний в образованиях, взаимодействующих в режиме резонанса. Первая предпосылка показывает определенную преемственность с натурфилософским представлением о резонансном взаимодействии как взаимодействию чего-то с себе подобным (горячее вызывается горячим, холодное – холодным, легкое – легким и т. д.), которое так и не получило статуса всеобщего концептуального положения, но периодически поддерживается даже в современных публикациях [7]. Вторая предпосылка – итог осмысления резонансных процессов в конце XIX – начале XX в. в онтологическом аспекте – является фундаментальной, поскольку задает мировоззренческую ориентацию: все существующее вибрирует в определенных частотах, создавая гармонию и дисгармонию бытия, устойчивость и деструкции его образований, генезис новой реальности «на руинах старого мира», ее эволюцию от первичного хаоса к точкам роста и новым состояниям. Третья предпосылка – конкретизация второй на основе научных наблюдений и экспериментов, а также данных повседневного опыта в определенных сферах. Она обеспечивает ориентацию на исследование количественного аспекта резонансных взаимодействий, замеченного еще на ранних стадиях их когнитивной ассимиляции.

Общая картина событий в связи с этим достаточно знакомая и типичная. На ее переднем крае находятся исследования в сфере естествознания, где выработано наиболее общее понимание (понятие) резонанса. «Резонанс (от лат. *resono* – звучу в ответ, откликаюсь) – относительно большой селективный (избирательный) отклик колебательной системы (осциллятора) на периодическое воздействие с частотой, близкой к частоте ее собственных колебаний. При резонансе происходит резкое возрастание амплитуды вынужденных колебаний осциллятора... Различают резонанс, возникающий в результате воздействия внешней периодической силы на осциллятор, и параметрический резонанс, возникающий вследствие периодического изменения одного из энергоемких параметров осциллятора» [8, с. 629].

К основным фундаментальным результатам когнитивной ассимиляции резонансных процессов средствами современной науки относят представления об их средах и носителях. Доказано, что резонансные процессы имеют место в твердотельных образованиях, жидкостях, газах, плазме. Считается, что их масштабы простираются от размеров субатомного уровня до глобального и уровня галактических систем, в частности, масштабы орбитального резонанса (изменения орбит движущихся космических объектов) коррелируют со сферой действия гравитационных сил во Вселенной (до  $10^{15}$ – $10^{24}$  см).

Расширены первоначальные представления о механизмах детерминации резонансных процессов: экспериментально подтверждены представления об их возникновении под действием негомогенных по отношению к их специфике факторов. В частности, доказано, что механические, химические, акустические и другие резонансные процессы могут быть вызваны не только однородными причинами, которые ранее отыскивали по принципу «подобное производится подобным», но и электромагнитными колебаниями на фоне общего шумового воздействия.

Последнее обстоятельство (шумовое воздействие на резонансный процесс) оказалось в поле зрения сравнительно недавно (около 70 лет тому) в русле исследования стохастического резонанса. «Стохастический резонанс – это кооперативный эффект в нелинейных системах, при котором энергия шума, распределенная по широкому спектру, перекачивается в выходную энергию на частоте сигнала. При этом амплитуда ответа системы описывается функцией резонансного типа,

в которой аргументом является уровень шума» [9]. В этом русле ставятся фундаментальные проблемы в исследовании резонансных процессов (об их источниках, материальных носителях, динамике частот и др.), одновременно имеющие четко выраженное прикладное значение, в частности, в таких областях, как кольцевой лазер, магнитные системы, пассивные оптические бистабильные системы, системы с электронным парамагнитным резонансом, эксперименты с броуновскими частицами, эксперименты с магнитно-упругой лентой, туннельный диод, сверхпроводящие квантовые интерферометры (SQUID), ферромагнетики и сегнетоэлектрики, химические и биологические системы, социологические модели [10, с. 33–35].

К одним из наиболее значимых и результативных направлений исследования резонансных процессов в современной науке следует отнести анализ механизма их действия в эмерджентных контекстах, т. е. в русле формирования и развития систем. Этот механизм квалифицируют как «совместное резонансное действие» при переходе от первоначального хаоса к структурированным образованиям, «резонансное объединение структур» в русле эволюции систем. Известна также трактовка резонансных процессов как фактора объективирования субъективности сознания в русле общего подхода к анализу сознания с позиций квантовой теории.

Стремительно набирает масштабы и практическую значимость исследование резонансных процессов в прикладной сфере: радиотехнике (своего рода классическом направлении), практико-ориентированной биофизике и биохимии, практической медицине, практической психологии и др.

На фоне динамичного в современной науке роста содержательных представлений о резонансных процессах в неживой природе (и в определенной мере в биосфере) резонансные явления в социогуманитарной сфере освоены значительно слабее. Здесь доминируют суждения мировоззренческого уровня об их необходимом существовании и специфике механизмов реализации без сколь-нибудь существенного продвижения в исследовании этих механизмов. Своеобразный ренессанс получают мифологические формы когнитивного осмысления резонансных процессов, в которых акцентируется значение «воли Вселенной» и изначального присутствия в ее структуре психической составляющей. Тем не менее к настоящему времени накоплен значительный по объему (но не всегда убедительный по своей обоснованности научными данными и методами) материал, подлежащий дальнейшему анализу.

В самом широком социогуманитарном контексте резонанс – это резко повышенный общественный интерес к определенному событию (объекту, явлению, процессу), а более конкретно – совпадение во взглядах, мнениях. И то, и другое может быть представлено в качестве оснований позитивного резонанса как микромомента позитивности, возникающего когда имеются общие положительные эмоции, взаимная забота и временная поведенческая синхронность между людьми [11]. К анализу природы и значимости резонансных процессов для человека в разной степени обращались Ч. Тейлор и Н. Луман.

Наиболее развернутое представление о резонансных процессах в социуме предложено профессором Йенского университета Хартмутом Роза, разработанное в русле его концепции «социология отношения к миру» [12; 13]. Согласно автору, резонанс – это способ связи человека с любым объектом реальности посредством механизма вибрации («вибрационного провода») по трем осям (или измерениям): горизонтальной (сфера межличностных отношений), диагональной (сфера трудовой деятельности, потребления, досуга и др.) и вертикальной (сфера всеобъемлющих идей в религии, искусстве и др.). Резонанс может иметь как позитивные, так и отрицательные последствия для человека с элементами непредсказуемого и неконтролируемого. Неожиданным при этом является рассуждение Х. Розы о современном обществе как в своей основе безрезонансном (спасает ситуацию и вселяет надежду харизма – наиболее убедительное, по мнению автора, проявление социального резонанса).

Отмеченные концепции ориентируют на первоначальную работу в сфере субъективного, а не на анализ космических, физических, химических, биологических и в целом «естественно-научных» детерминант резонансных процессов в социогуманитарной сфере. Они задают контекст позитивности, о наличии которого в неживой природе и в определенной мере в биосфере трудно говорить без большой доли антропоморфности в такого рода подходе и результирующих его представлениях.

Безусловно, человек и социум включены в реальность как элементы мироздания, испытывающие влияние окружающей среды, в том числе и в русле резонансных механизмов. Иначе они вряд ли смогли существовать. Тем не менее механизм этого влияния весьма специфичен и не может быть истолкован сугубо на основе параметров физического, как и любого природного резонанса. Особенностью социогуманитарного резонанса является **выбор** по довольно широкому набору ориентиров и критериев, которые хотя и испытывают влияние определенных параметров природных резонансных процессов, но не сводятся к их источникам, периодам и др. Такого рода выбор (как это показывает анализ социогуманитарных технологий) осуществляется на основе знаний о конкретной целостной ситуации, которыми располагают субъекты социального взаимодействия. Ядром такого рода знаний является, во-первых, их внешний и внутренний опыт жизнедеятельности, накопленный в контексте сходных и несходных ситуаций в русле профессиональной деятельности, образовательной активности, реакций на различного рода рекламу, пиар-компании и др.; во-вторых, скрытые потенциалы социальной системы, составляющие основание ассимиляции индивидами и социальными группами предлагаемых схем поведения, и главный ресурс их более или менее длительного практикования [14; 15].

**Методологические следствия.** Масштабность и глубина проявлений резонансных процессов в неживой и живой природе и социальной реальности вызывают необходимость адекватно осмыслить их когнитивное измерение; в данном случае значимость их действия как одного из элементообразующих факторов научного дискурса. На наш взгляд, анализ такого рода (факторного) действия, осуществленный в данном сообщении, и в определенной мере в предшествующей ему работе, где дана более развернутая характеристика форм когнитивной ассимиляции резонансных процессов [16], а также пока еще в небольшом количестве работ других авторов, обуславливает необходимость введения в состав научного дискурса нового элемента, фиксирующего ориентацию на возможное наличие и сознательный учет действия резонансных процессов в исследуемой реальности. Этот элемент можно квалифицировать как принцип резонанса, входящий в философские основания науки [6, с. 231–287], где, как было ранее отмечено, наряду с группой философских категорий – матрицей мышления – выделяется группа философских принципов и норм научного познания, выражающих фундаментальные предпосылки и общую направленность познавательных процессов (принципы взаимодействия, воспроизводимости, рефлексивности, системности, детерминизма, данности сущности в явлениях, наблюдаемости, простоты и др.). В этой группе должен быть зафиксирован и принцип резонанса. **Принцип резонанса** – это когнитивный принцип, выражающий ориентированность научного познания на поиск резонансных процессов в исследуемой реальности, выявление механизмов их действия и значимости для адекватной интеллектуальной ориентации в научном поиске, а также направленности и форм эффективного практического действия.

Согласно наиболее употребимым пониманиям, принцип – это основа, первоначало, руководящая идея, основное правило поведения и деятельности; то, что лежит в основе некоторой совокупности фактов и знаний; центральное понятие, основание системы знания, представляющее собой обобщение и распространение какого-либо положения данной системы на все явления той области, из которой данный принцип абстрагирован. Акцентируя отметим, что он не только является основанием определенного содержания познавательных и практических действий, но и (как и любое из регулятивных средств человеческого познания и деятельности) в свою очередь нуждается в обосновании. В приведенных трактовках, за исключением последней, где принцип в явной форме представлен как обобщение частного (конкретного) знания, такого рода обоснование не зафиксировано. Но это не означает, что оно отсутствует. Наряду с легко узнаваемым в последней трактовке когнитивным обоснованием принципа он может быть обоснован практически, т. е. успешными практическими действиями в соответствии с его требованиями. Например, требования принципа простоты (наименьшего действия) практически оправданы целесообразностью последовательности действий, ценностью их конечного результата и др. Вполне корректно можно говорить о теологических, этических и эстетических основаниях принципов познания и деятельности.

Отметим также, что в определенном смысле вопреки акцентированию фундаментальной роли принципа как средства регуляции познавательных процессов далеко не всегда непосредственно с ним связывали истинностные характеристики знания. «Принцип, который... как бы кристаллизовался, – отмечал А. Пуанкаре, – уже не подчинен опытной проверке. Он ни верен, ни неверен; он удобен» [17, с. 264]. Соответственно для исследователя логически существует возможность принимать или не принимать определенный принцип, даже если он является регулятивным средством уровня философских оснований науки. Это наблюдалось и наблюдается, например, в отношении принципов простоты, детерминизма, данности сущности в явлениях и др. Ситуации такого рода тем более характерны для принципов, вновь вводимых в научный обиход. В частности, в настоящее время для принципа резонанса, реально претендующего на высокий метатеоретический статус.

Исторически явление резонанса первоначально понималось преимущественно в широком смысле – как отклик на определенное воздействие, усиливающее некоторые исходные параметры образования (вещи, явления, процесса), испытывающего внешнее воздействие. При этом отмечалась избирательность параметров воздействия, например, высота и сила воздействующего звука, степень выраженности (интенсивность) и длительность процессов, вызывающих резонансные явления, стабильность их действия и др.

Со временем при осмыслении резонансных процессов акцент был сделан на их вибрационную природу, а именно, на способность элементов (носителей) резонансного взаимодействия испытывать и соответственно возбуждать регулярные параметрические колебания в диапазоне сопоставимых (совпадающих или близких к совпадающим, а также кратных) частот. Такое понимание природы резонансных процессов было воспринято наукой в лице Г. Галилея и позднее Г. Гельмгольца, М. Фарадея, Л. И. Мандельштама, Т. Хаяси, Г. Каудерера, В. С. Шпинеля и др.

Наряду с пониманием природы резонансных процессов естественным образом вставал вопрос об их масштабах. В поисках ответа на данный вопрос, безусловно, следует учитывать позицию выдающегося физика XX в. Н. Теслы. «Все связи между явлениями, – утверждал он, – устанавливаются исключительно путем различного рода простых и сложных резонансов – согласованных вибраций физических систем» [7]. Она задает продуктивную когнитивную ориентацию в фундаментальных (космология, физика микромира, структура и механизмы биоты и др.) исследованиях, которая подтверждается многообразием и эффективностью практикоориентированных исследований резонансных процессов. В частности, в медицине, где наблюдается сращивание резонансных методов диагностики и направленного лечебного действия (магнитно-резонансная томография). Особо следует отметить растущие масштабы одного из направлений фармакологии, в русле которого разрабатываются средства стимуляции вибрационных процессов, подавляющих мелкие резонансы как возбудителей аномалий в организме. Что-то схожее начало практиковаться намного раньше в сфере радиотехники, где разрабатывались способы подавления резонансов, создающих помехи при движении сигналов. В настоящее время интересные события по своему масштабу и значению наблюдаются при разработке социогуманитарных технологий, создаваемых с учетом сознательного выбора (принятия или отторжения) предлагаемого людям образа поведения.

Отмеченные факты свидетельствуют о повышении эффективности научных исследований, в русле которых сознательно учитываются механизмы резонансного воздействия на изучаемые объекты (явления, процессы). Это дает основания квалифицировать такого рода учет как действие эпистемологического принципа резонанса. Наиболее наглядно такого рода когнитивная ориентация наблюдается в практикоориентированных трансдисциплинарных исследованиях. Ее когнитивная и практическая обоснованность, т. е. обоснованность принципа резонанса как познавательного регулятива, дает основание утверждать, что принцип резонанса прочно войдет в содержание научного дискурса в целом.

## Список использованных источников

1. Лукашевич, В. К. Рациональный базис науки: потенциал праксиологического выбора / В. К. Лукашевич // Вестник Белорусского государственного экономического университета. – 2014. – № 1. – С. 99–106.
2. Лукашевич, В. К. Креативное взаимодействие предметного, нормативного и рефлексивного знания в научном поиске / В. К. Лукашевич. – Минск, 2019. – 399 с.
3. Порус, В. Н. Парадоксальная рациональность / В. Н. Порус. – М., 1999. – 124 с.
4. Рациональность на перепутье: в 2 кн. – М., 1999. – 368 с.
5. Касавин, И. Т. Социальная философия науки и коллективная эпистемология / И. Т. Касавин. – М., 2016. – 264 с.
6. Степин, В. С. Теоретическое знание: структура, историческая эволюция / В. С. Степин. – М., 2000. – 743 с.
7. Аднорал, Н. Его величество резонанс / Н. Аднорал – URL: [https://www.manwb.ru/articles/science/natural\\_science/Resonans\\_NatAdnoral](https://www.manwb.ru/articles/science/natural_science/Resonans_NatAdnoral) (дата обращения: 23.01.2022).
8. Делягин, Н. Н. Резонанс / Н. Н. Делягин // Физический энциклопедический словарь. – М., 1983. – 629 с.
9. Макеев, В. Ю. Стохастический резонанс в биосистемах / В. Ю. Макеев // II Съезд биофизиков России: в 3 т. – М., 1999. – URL: <http://www.library.biophys.msu.ru/gettext?Serial=76150> (дата обращения: 23.01.2022).
10. Стохастический резонанс как индуцированный шумом эффект увеличения степени порядка / В. С. Анищенко, А. Б. Нейман, Ф. Мосс, Л. Шиманский-Гайер // Успехи физических наук. – 1999. – Т. 169, № 1. – С. 7–38.
11. Fredrickson, B. *Love 2.0: how our supreme emotion affects everything we think, do, feel, and become* / B. Fredrickson. – New York, 2013. – 250 p.
12. Роза, Х. Идея резонанса как социологическая концепция / Х. Роза // Глобальный диалог. – 2018. – Т. 8, № 2. – С. 41–44.
13. Rosa, H. *Resonanz. Eine soziologie der weltbeziehung* / H. Rosa. – Berlin, 2016. – 816 s.
14. Горохов, В. Г. Понятие «технология» в философии техники и особенность социально-гуманитарных технологий / В. Г. Горохов // Эпистемология и философия науки. – 2011. – Т. 28, № 2. – С. 110–123.
15. Иванов, В. Н. Социальные технологии / В. Н. Иванов, В. И. Патрушев. – 2-е изд., испр. и доп. – М., 2004. – 488 с.
16. Лукашевич, В. К. Формы когнитивной ассимиляции резонансных процессов / В. К. Лукашевич // Философские исследования. – 2022. – Вып. 9. – С. 193–203.
17. Пуанкаре, А. О науке: сборник / А. Пуанкаре; пер. с фр.; под ред. Л. С. Понтрягин. – М., 1983. – 560 с.

## References

1. Lukashevich V. K. Rational basis of science: the potential of praxeological choice. *Vestnik Belorusskogo gosudarstvennogo ekonomicheskogo universiteta* [Bulletin of the Belarusian State Economic University], 2014, no. 1, pp. 99–106 (in Russian).
2. Lukashevich V. K. *Creative interaction of subject, normative and reflective knowledge in scientific research*. Minsk, 2019. 399 p. (in Russian).
3. Porus V. N. *Paradoxical rationality (essays on scientific rationality)*. Moscow, 1999. 124 p. (in Russian).
4. *Rationality at a Crossroads, in 2 books*. Moscow, 1999. 368 p. (in Russian).
5. Kasavin I. T. *Social philosophy of science and collective epistemology*. Moscow, 2016. 264 p. (in Russian).
6. Stepin V. S. *Theoretical knowledge: structure, historical evolution*. Moscow, 2000. 743 p. (in Russian).
7. Adnoral Natalia. His majesty resonance. Available at: [https://www.manwb.ru/articles/science/natural\\_science/Resonans\\_NatAdnoral](https://www.manwb.ru/articles/science/natural_science/Resonans_NatAdnoral) (accessed 23 January 2022) (in Russian).
8. Delyagin N. N. Resonance. Prokhorov A. M. (ed.) *Physical Encyclopedic Dictionary*. Moscow, 1983, pp. 629 (in Russian).
9. Makeev V. Yu. Stochastic resonance in biosystems. *II S'ezd biofizikov Rossii: v 3 t.* [II Congress of biophysicists of Russia: in 3 vol.]. Moscow, 1999. Available at: <http://www.library.biophys.msu.ru/gettext?Serial=76150> (accessed 23 January 2022) (in Russian).
10. Anishchenko V. S., Neiman A. B., Moss F., Shimansky-Geier L. Stochastic resonance: noise-enhanced order. *Physical-USpekhi*, 1999, vol. 169, no. 1, pp. 7–38. <https://doi.org/10.1070/pu1999v042n01abeh000444>
11. Fredrickson B. *Love 2.0 : how our supreme emotion affects everything we think, do, feel, and become*. New York, 2013. 250 p.
12. Roza H. The idea of resonance as a sociological concept. *Global'nyy dialog* [Global Dialogue], 2018, vol. 8, no. 2, pp. 41–44 (in Russian).
13. Roza H. *Resonanz. Eine soziologie der weltbeziehung*. Berlin, 2016. 816 p. (in German).
14. Gorokhov V. G. The concept of «technology» in the philosophy of technology and the peculiarity of social and humanitarian technologies. *Epistemologiya i filosofiya nauki* [Epistemology and Philosophy of Science], 2011, vol. 28, no. 2, pp. 110–123 (in Russian).
15. Ivanov V. N., Patrushev V. I. *Social technologies*. 2nd ed. Moscow, 2004. 488 p. (in Russian).
16. Lukashevich V. K. Forms of cognitive assimilation of resonant processes. *Filosofskije issledovaniya* [Philosophical Research], 2022, vol. 9, pp. 193–203 (in Russian).
17. Poincaré H., Pонтрягин L. S. (ed.). *About science: collection*. Moscow, 1983. 560 p. (in Russian).

---

**Информация об авторе**

*Лукашевич Владимир Константинович* – д-р филос. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. Институт философии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 1/2, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: lukashevich46@bk.ru.

**Information about the author**

*Lukashevich Vladimir K.* – D. Sc. (Philosophy), Professor, Chief Researcher. Institute of Philosophy of the National Academy of Sciences of Belarus (1/2, Sorganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lukashevich46@bk.ru.

**АГРАРНЫЕ НАУКИ**  
**AGRARIAN SCIENCES**УДК 631.362.36/635.156  
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-168-176>Поступило в редакцию 28.10.2024  
Received 28.10.2024**Член-корреспондент В. В. Азаренко<sup>1</sup>, М. И. Курилович<sup>2</sup>, В. В. Голдыбан<sup>2</sup>**<sup>1</sup>*Отделение аграрных наук Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*<sup>2</sup>*Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по механизации сельского хозяйства, Минск, Республика Беларусь***ИДЕНТИФИКАЦИЯ ДЕФЕКТОВ В КЛУБНЯХ КАРТОФЕЛЯ  
ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ИХ СОРТИРОВКИ**

**Аннотация.** Предложен и описан способ идентификации и отделения некондиционных клубней картофеля из общего вороха на основе систем технического зрения и автоматической инспекции. Для сегментации внешних дефектов клубней картофеля на фоне транспортирующего конвейера в режиме реального времени использован метод, основанный на вычислении цветового порога. Для трекинга движущихся клубней картофеля использовался алгоритм центроидного трекинга. Для обучения искусственной нейронной сети был создан собственный набор данных, состоящий из изображений товарных и дефектных клубней картофеля. Представлены результаты экспериментальных исследований определения внутренних дефектов клубней картофеля с помощью метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и компьютерной томографии (КТ). Для создания скрытых дефектов в виде потемнений мякоти клубней был использован метод регулируемого удара о твердую поверхность. Описана методика проведения экспериментальных исследований и режимные параметры ЯМР и КТ. Проведен сравнительный анализ изображений, полученных при помощи ЯМР и КТ, с натурными снимками клубней в разрезе, что позволило с высокой точностью определить совпадение местоположения дефектов, выявленных неинвазивным методом с их реальным расположением в клубне. Работа продемонстрировала ценность ЯМР и КТ для детального неинвазивного способа определения скрытых дефектов клубней картофеля на автоматических сортировальных машинах.

**Ключевые слова:** клубни картофеля, сортировка, внутренние дефекты, внешние дефекты, искусственная нейронная сеть, ядерный магнитный резонанс,  $T_2$  релаксация

**Для цитирования.** Азаренко, В. В. Идентификация дефектов в клубнях картофеля для автоматизации процесса их сортировки / В. В. Азаренко, М. И. Курилович, В. В. Голдыбан // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2025. – Т. 69, № 2. – С. 168–176. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-168-176>

**Corresponding Member Vladimir V. Azarenko<sup>1</sup>, Maksim I. Kurylovich<sup>2</sup>, Viktor V. Goldyban<sup>2</sup>**<sup>1</sup>*Department of Agrarian Sciences of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*<sup>2</sup>*Scientific and Practical Center of the National Academy of Sciences of Belarus for Agricultural Mechanization, Minsk, Republic of Belarus***IDENTIFICATION METHODS OF DEFECTS IN POTATO TUBERS TO AUTOMATE  
THE PROCESS OF THEIR SORTING**

**Abstract.** A method for identifying and separating substandard potato tubers from a common pile based on machine vision and automatic inspection systems is proposed and described. A method based on calculating the color threshold is used for segmenting external defects of potato tubers against the background of a transport conveyor in real time. A centroid tracking algorithm is used to track moving potato tubers. A proprietary dataset consisting of images of commercial and defective potato tubers is created to train the artificial neural network. The results of experimental studies of determining internal defects of potato tubers using nuclear magnetic resonance (NMR) and computed tomography (CT) are presented.

A method of controlled impact on a hard surface is used to create hidden defects in the form of darkening of the tuber pulp. The methodology for conducting experimental studies and the operating parameters of NMR and CT are described. A comparative analysis of images obtained using NMR and CT with natural images of tubers in section was carried out, which made it possible to determine with high accuracy the coincidence of the location of defects detected by a non-invasive method with their real location in the tuber. The work demonstrated the value of NMR and CT for a detailed non-invasive method for determining hidden defects of potato tubers on automatic sorting machines.

**Keywords:** nuclear magnetic resonance, internal defects, external defects, artificial neural network, wireworm, deep processing of potatoes

**For citation.** Azarenko V. V., Kurylovich M. I., Goldyban V. V. Identification methods of defects in potato tubers to automate the process of their sorting. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2025, vol. 69, no. 2, pp. 168–176 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2025-69-2-168-176>

**Введение.** Картофель – важная часть продовольственного обеспечения в большинстве стран мира, и максимальным фактором его рыночной цены является внешний вид. В процессе предпродажной доработки картофеля отечественной промышленностью применяют механические сортировочные столы различных типов, позволяющие разделять материал по внешним признакам визуально, а удаление некондиции производится вручную. Ручная сортировка всегда характеризуется субъективностью, утомляемостью и высокой стоимостью труда работников. Использование автоматических сортировальных машин для идентификации и отделения некондиционных клубней картофеля из общего вороха позволит улучшить эффективность сортировки, повысить производительность и качество получаемого продукта.

Одной из проблем при производстве картофеля является наличие в клубнях скрытых внутренних дефектов. Внутренние дефекты невозможно выявить на инспекционных столах визуально без предварительного разрушения клубней. Существующие способы определения внутренних дефектов предусматривают предварительный случайный отбор образцов, их резку и визуальный осмотр. Этот метод весьма трудоемок и малоэффективен.

Для изучения внутренних дефектов клубней картофеля предложено использовать метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и компьютерной томографии (КТ), а для определения внешних дефектов оптический метод распознавания.

Исследования по определению внешних дефектов проводились учеными J. C. Noordam, G. W. Otten, T. J. M. Timmermans, B. H. van Zwol (Нидерланды) [1], A. Golmohammadi, F. Bejaei, H. Behfar (Иран) [2], R. Martelli (Италия) [3], M. Tavakoli, N. Mohsen (Иран) [4].

С целью повышения эффективности процесса сортировки необходима разработка неразрушающих методов оценки качества клубней картофеля на стадии переработки и предпродажной доработки, обеспечивающих достаточно высокую скорость и точность анализа. В связи с этим был разработан ряд неинвазивных аналитических методов, позволяющих улучшить характеристику дефектов клубней картофеля. Группа специалистов из Бельгии использовали метод ядерного магнитного резонанса и компьютерной томографии для обнаружения внутренних дефектов яблок. Среднее значение и дисперсия частотного распределения влаги на снимках ЯМР и интенсивности рентгеновского излучения на КТ являются параметрами, позволяющими отличить здоровые яблоки от пораженных. Автоматическая обработка изображений, основанная на установлении порогового значения, привела к сопоставимой точности классификации методом компьютерной томографии – до 89 % и 79 % – для ЯМР [5].

Широкое распространение метод компьютерной томографии нашел в почвоведении [6]. С помощью метода КТ изучается плотность сложения почв [7], структура крупных пор зоогенного происхождения [8], содержание воды [9] и пространственное распределение влажности в почве [10].

Рентгеновская компьютерная томография является эффективным неинвазивным инструментом для визуализации внутренних компонентов и показателей качества свежей сельскохозяйственной продукции.

На макроуровне применение рентгеновской КТ использовалось для исследования изменения структуры ткани вследствие развития мучнистости у груши [11] или нарушения потемнения и полостей у груши и яблока [12]. На микромасштабе рентгеновская КТ использовалась для визуализации и оценки пористости сельскохозяйственных продуктов, таких как манго [13], яблоко [14]. Метод КТ применяют для исследования развития клубней картофеля от начала до сбора урожая

в условиях стресса (жара, засуха) с целью координации селекционных усилий по улучшению устойчивости генотипов картофеля к абиотическому стрессу.

Цель работы – изучить возможность применения ЯМР и КТ для определения внутренних дефектов клубней картофеля и предложить методику его реализации, а также рассмотреть возможность использования оптического метода распознавания внешних дефектов.

**Материалы и методы исследований.** Для сортировки продовольственного картофеля по внешним дефектам РУП «НПЦ НАН Беларуси по механизации сельского хозяйства» разработан и изготовлен макетный образец для автоматической инспекции клубней картофеля, внешний вид которого представлен на рис. 1<sup>1</sup>.



Рис. 1. Макетный образец автоматической сортировальной машины

Fig. 1. Model of an automatic sorting machine

Макетный образец состоит из рамы, вальцово-подающего конвейера, механизмов привода, системы распознавания, состоящей из видеокамеры и персонального компьютера, и пневматической системы отделения.

Принцип действия разработанного макетного образца автоматической сортировальной машины заключается в следующем. Картофель, поступающий на вальцовый подающий конвейер перемещается в зону системы распознавания, где ему придается вращение посредством ременного привода. В зоне распознавания картофель успевает попасть на несколько кадров. Чтобы не перепутать клубни картофеля между собой в систему встраивается алгоритм трекинга движущихся объектов (рис. 2). Клубни картофеля, снятые видеокамерой, обрабатываются компьютерной программой. Идентифицированные клубни как некондиционные, перемещаясь вальцовым транспортирующим устройством к системе отделения, удаляются с вальцового конвейера струей сжатого воздуха. Не отделенные клубни продолжают движение по технологической линии.

Принцип распознавания внешних дефектов основан на обучении искусственной нейронной сети (ИНС), для этого был использован классификатор ResNet. Обучающая выборка была разделена на кондиционный и некондиционный картофель. Для тестирования результатов 20 % объема данных было отделено от обучающих. В результате тестирования обученной сети точность и полнота были равны более 0,99. Несмотря на это, на реальных данных сеть постоянно ошибалась. Это происходит из-за различия яркости и баланса белого на изображениях из обучающих данных и на реальных изображениях. Чтобы проверить это, во время обучения ИНС была добав-

<sup>1</sup> Патент ВУ 24103. Способ автоматической сортировки клубней картофеля и машина для их сортировки: № а20200166 : заявлено 12.06.2020 : опубл. 30.10.2023 / В. В. Голдыбан, А. Н. Антоненко, М. И. Курилович.



Рис. 2. Результат работы алгоритма трекинга объектов

Fig. 2. Result of the object tracking algorithm

лена аугментация данных, при которой случайным образом изменялись яркость и баланс белого обучающих изображений. В результате тестирования на данных, отделенных от обучающих, были получены следующие значения точности и полноты: 0,92 и 0,92 соответственно.

Для проведения исследований по обнаружению внутренних дефектов были подготовлены клубни картофеля с искусственно созданными в них скрытыми дефектами в виде потемнений мякоти. Для создания скрытых дефектов был использован полый цилиндр высотой 1000 мм и диаметром поперечного сечения 125 мм. На дне цилиндра был размещен ударный элемент диаметром 25 мм. Клубни сбрасывались с одинаковой высоты и ударялись об ударный элемент, обращенный к основанию клубня. Клубни падали и ударялись о полусферическую головку, прикрепленную к круглой плоской пластине. Расчетная энергия удара варьировалась от 303 до 994 мДж в зависимости от массы картофеля. После удара клубни хранили в течение двух недель для проявления повреждений.

Исследования по определению скрытых дефектов проводились двумя способами: ядерным магнитным резонансом и компьютерной томографией.

Сущность исследований ядерным магнитным резонансом заключалась в следующем. Исследуемые клубни картофеля помещались в сильное магнитное поле напряженностью 1,5 Тл, при этом магнитные моменты атомов водорода, находящиеся в воде тканей картофеля, выстраиваются вдоль магнитного поля. Далее в область исследований подавался радиочастотный импульс, который менял направление магнитных моментов атомов водорода от первоначального направления «по полю» на некоторый угол. При выключении радиочастотного импульса происходило восстановление первоначального направления «по полю» – релаксация. Это самое время релаксации или другими словами – быстрота восстановления направления магнитных моментов атомов водорода к первоначальному направлению «по полю» изменяется в зависимости от однородности тканей картофеля. Это различие времен релаксации использовалось, чтобы отличить нормальные и дефектные области в тканях картофеля.

Так как время релаксации бывает поперечным  $T_2$  и продольным  $T_1$ , то при патологических процессах изменение содержания воды в тканях картофеля приводит к увеличению интенсивности сигнала на  $T_1$  изображениях и уменьшению интенсивности сигнала на  $T_2$  изображениях. Результатом исследований является отображенное на экране компьютера изображение клубня картофеля в виде темных (низкий сигнал) и светлых (высокий сигнал) участков. Усиленный сигнал (гиперинтенсивный) – это более светлые участки изображения, а ослабленный сигнал (гипоин-

тенсивный) – более темные. Эти характеристики сигнала мы использовали, чтобы установить патологическими или нормальными являются области в полученном изображении.

$T_2$  изображения оптимально показывают жидкости в тканях, при этом вода проявляется в  $T_2$  изображениях относительно яркими тонами, а ее недостаток – темными. В связи с чем в исследованиях для анализа скрытых дефектов в клубнях картофеля достаточным и необходимым является анализ  $T_2$  изображений.

Последовательность мультиспинового эха (MSE) использовалась для измерения параметров поперечной релаксации  $T_2$ . Под спиновым эхом понимается спонтанное возникновение сигнала ядерного магнитного резонанса через некоторое время после подачи на образец последовательности импульсов радиочастотного поля.

В исследовании применялись следующие характеристики MSE: матрица изображения  $256 \times 256$ , поле зрения (FOV)  $256 \times 256$  мм, толщина среза 3 мм, TR 2000 мс, TE 104 мс, количество эхосигналов 256, полоса пропускания (BW) 260 Гц пиксель<sup>-1</sup> и 2 усреднения. Минимальный объем повреждений, возможный к обнаружению – 1 мм<sup>3</sup>.

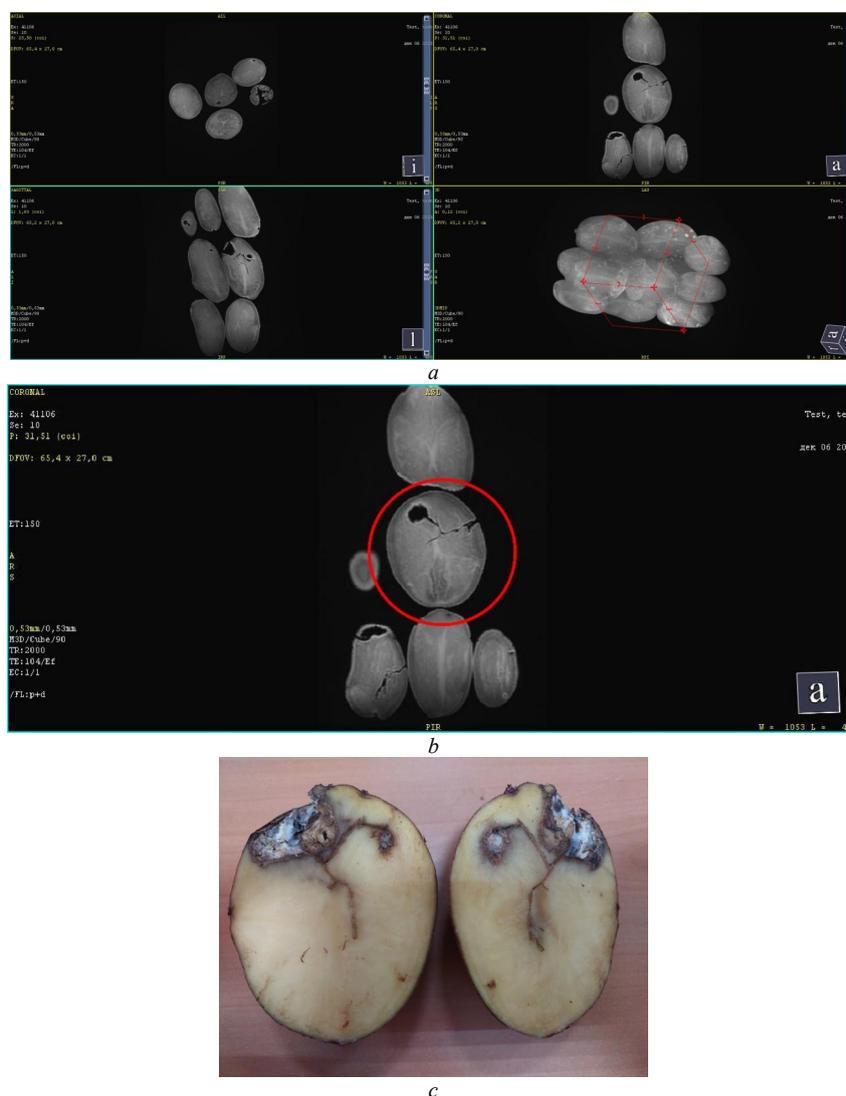


Рис. 3. Результаты применения ЯМР для клубней картофеля с искусственно созданными дефектами: *a* – общий вид программы и настроек; *b* – выделенный клубень картофеля с обнаруженными внутренними дефектами; *c* – дефектный клубень картофеля в разрезе

Fig. 3. Results of NMR application for potato tubers with artificially created defects: *a* – general view of the program and settings; *b* – selected potato tuber with detected internal defects; *c* – defective potato tuber in cross-section

На полученных с помощью ЯМР изображениях первой группы картофеля очень четко просматриваются структуры клубня в различных его сечениях: особенно видна сердцевина, кора и сосудистые пучки. При детальном изучении полученных снимков не было выявлено областей, отличающихся от общей массы мякоти клубней. Полученные результаты позволили сделать вывод об отсутствии внутренних дефектов в данной выборке клубней картофеля. При дальнейших исследованиях изображения кондиционных клубней картофеля использовались в качестве эталонных при определении наличия внутренних дефектов в других классах.

В следующем опыте были получены изображения и трехмерная модель второй группы клубней картофеля. Детальное изучение снимков проводилось покадрово для каждой полученной трехмерной модели изображения. На изображениях, полученных с помощью ЯМР, отчетливо видны внутренние дефекты клубней и характер изменения дефектной зоны в зависимости от глубины поражения клубня (рис. 3). Дефектные зоны на изображениях клубней имеют темный цвет, в то время как здоровая ткань – светлый. Отличие такого сигнала ЯМР от сигнала стандартного вещества позволяет определить так называемые биохимические сдвиги в тканях клубней.

На рис. 3, *b* просматриваются темные пятна, соответствующие областям гнили, образовавшейся в результате механического воздействия на клубни. Для сравнения из исследуемой выборки был отобран нужный клубень и сделано фото, представленное на рис. 3, *c*. Сравнивая полученные при помощи ЯМР снимки внутренних дефектов клубней картофеля, можно сделать вывод о высокой степени точности локализации скрытых дефектов неинвазивным методом.

Для определения скрытых внутренних дефектов способом компьютерной томографии был отобран 21 клубень картофеля. Клубни были подвержены механическому воздействию, аналогичному, как и при их подготовке к методу ЯМР. После чего они выдерживались при температуре 3–5° в темном помещении.

Исследования проводились на компьютерном томографе Discovery CT750 HD. Основные режимные параметры томографа в период проведения исследований: напряжение на рентгеновской трубке 120 кВ, анодный ток 10 мА, толщина одного среза 1,25 мм, время одного среза 0,6 с, количество срезов 70.

За время экспозиции томограф фиксирует 70 срезов клубней картофеля в поперечной и продольной проекции. Затем компьютер обрабатывает снимки и строит 3D-модель клубня картофеля. На рис. 4 представлены результаты обнаружения скрытых дефектов на примере клубня № 2. С целью раскрытия возможностей программы результаты выведены в оттенках оранжевого. Дефектные области на изображениях клубней отображены темным цветом, здоровая ткань –

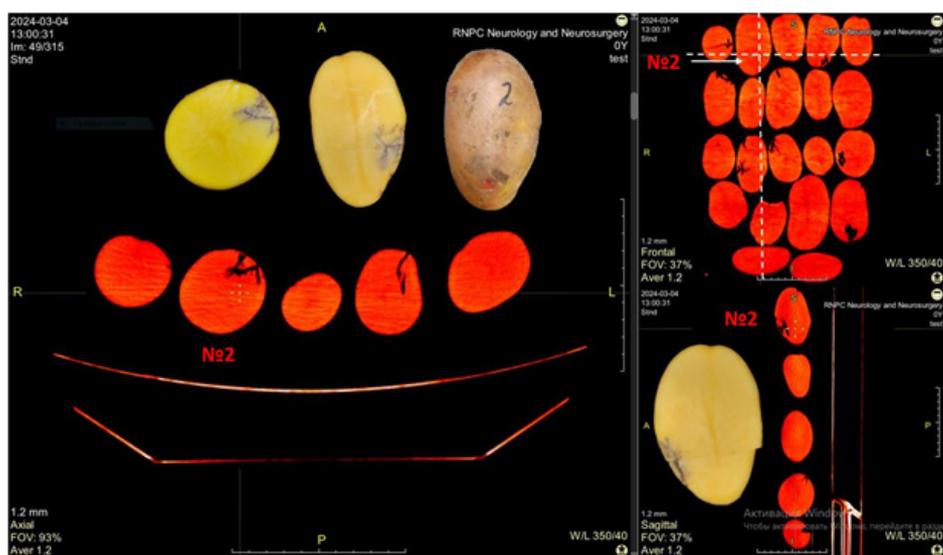


Рис. 4. Результаты компьютерной томографии по обнаружению внутренних дефектов клубней картофеля

Fig. 4. Results of computed tomography for detection of internal defects of potato tubers

оранжевым. Штрихпунктирная белая линия показывает горизонтальную и вертикальную проекцию среза. На рис. 4 показана горизонтальная проекция среза, в правом нижнем углу – вертикальная. В верхнем правом углу четко видно, что клубень под номером 2 внешне выглядит здоровым и его можно с определенной долей вероятности отнести к кондиционным. Однако вертикальные и горизонтальные срезы, полученные с помощью КТ, указывают на наличие скрытых дефектов, вызванных приложенными ранее механическими нагрузками.

Имея большой набор обучающих данных из томографических изображений кондиционных и некондиционных клубней картофеля, можно построить сверточную нейронную сеть, которая будет сегментировать данные компьютерной томографии клубней картофеля в автоматическом режиме, что имеет большое значение при проектировании автоматических сортировальных машин.

С целью сокращения времени идентификации внутренних дефектов в клубнях картофеля следует уменьшить количество срезов до 10, увеличив их шаг до 5 мм, что является достаточным для обнаружения скрытых дефектов.

**Заключение.** Разработан макетный образец автоматической сортировальной машины, в основу работы которого положена концепция интеллектуального анализа данных, согласно которой полученные с видеокамеры изображения клубней картофеля обрабатываются и формируются в образы с последующим распознаванием и выдачей сигнала исполнительному устройству системы автоматической инспекции в виде единичного импульсного сигнала при определении клубня как некондиционного.

Проведены исследования клубней картофеля на выявление внутренних дефектов при помощи ядерного магнитного резонанса и компьютерной томографии. Были проанализированы полученные изображения, которые позволяют сделать вывод, что методы ЯМР и КТ могут быть успешно применены для обнаружения и характеристики внутренних повреждений в клубнях картофеля. Так, в зависимости от расположения в клубне обнаруженные дефекты можно классифицировать по потенциальному происхождению и отслеживать их состояние без разрушения с использованием следующих характеристик ЯМР: матрица изображения  $256 \times 256$ , поле зрения (FOV)  $256 \times 256$  мм, толщина среза 3 мм, TR 2000 мс, TE 104 мс, количество эхосигналов 256, полоса пропускания (BW) 260 Гц пиксель<sup>-1</sup> и 2 усреднения. Минимальный объем повреждений, возможный к обнаружению, 1 мм<sup>3</sup>. Для КТ основные режимные параметры томографа в период проведения исследований должны быть следующими: напряжение на рентгеновской трубке 120 кВ, анодный ток 10 мА, толщина одного среза 1,25 мм, время одного среза 0,6 с, количество срезов 70. Также можно говорить о возможности применения метода ЯМР и КТ для повышения уровня товарности и переработки картофеля, а также расширения ассортимента готовой продукции. Сама методика проведения ЯМР и КТ анализа клубней картофеля подразумевает высокую автоматизацию процесса поиска внутренних дефектов в клубнях картофеля.

#### Список использованных источников

1. High speed potato grading and quality inspection based on a color vision system / J. C. Noordam, G. W. Otten, A. J. M. Timmermans, B. H. van Zwol // *Control Systems*. – 2017. – P. 15–24.
2. Golmohammadi, A. Design, development and evaluation of an online potato sorting system using machine vision / A. Golmohammadi, F. Bejaei, H. Behfar // *International Journal of Agriculture and Crop Sciences*. – 2013. – Vol. 6, N 7. – P. 396–402.
3. Caprara, C. Image analysis implementation for evaluation of external potato damage / C. Caprara, R. Martelli // *Applied Mathematical Sciences*. – 2015. – Vol. 9, N 81. – P. 4029–4041. <https://doi.org/10.12988/ams.2015.52170>
4. Tavakoli, M. Application of the image processing technique for separating sprouted potatoes in the sorting line / M. Tavakoli, N. Mohsen // *Journal of Applied Environmental and Biological Sciences*. – 2015. – Vol. 4, N 11S. – P. 223–227.
5. Comparison of X-ray CT and MRI of watercore disorder of different apple cultivars / E. Herremans, A. Melado-Herberos, T. Defraeye [et al.] // *Postharvest Biology and Technology*. – 2014. – Vol. 87. – P. 42–50. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2013.08.008>
6. Томография в почвоведении: от первых опытов к современным методам (обзор) / К. Н. Абросимов, К. М. Герке, Д. С. Фомин [и др.] // *Почвоведение*. – 2021. – Т. 55, № 9. – С. 1097–1112.

7. Petrovic, A. M. Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning / A. M. Petrovic, J. E. Siebert, P. E. Rieke // *Soil Science Society of America Journal*. – 1982. – Vol. 46, N 3. – P. 445–450. <https://doi.org/10.2136/sssaj1982.03615995004600030001x>
8. A non-destructive method for the morphological assessment of earthworm burrow systems in three dimensions by X-ray computed tomography / M. Joschko, O. Graff, P. C. Muller [et al.] // *Biology and Fertility of Soils*. – 1991. – Vol. 11. – P. 88–92. <https://doi.org/10.1007/bf00336369>
9. Crestana, S. Water physics study on soil using computerized tomography (in Portuguese): Ph. D. Thesis / S. Crestana. – São Paulo, 1985. – 151 p.
10. Hainsworth, J. M. The use of computed assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content / J. M. Hainsworth, L. A. G. Aylmore // *Australian Journal of Soil Research*. – 1983. – Vol. 21, N 4. – P. 435–443. <https://doi.org/10.1071/sr9830435>
11. Microstructure analysis and detection of mealiness in ‘Forelle’ pear (*Pyrus communis* L.) by means of X-ray computed tomography / T. Muziri, K. I. Theron, D. Cantre [et al.] // *Postharvest Biology and Technology*. – 2016. – Vol. 120. – P. 145–156. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2016.06.006>
12. MRI and X-ray CT study of spatial distribution of core breakdown in ‘Conference’ pears / J. Lammertyn, T. Dresselaers, P. Van Hecke [et al.] // *Magnetic Resonance Imaging*. – 2003. – Vol. 21, N 7. – P. 805–815. [https://doi.org/10.1016/s0730-725x\(03\)00105-x](https://doi.org/10.1016/s0730-725x(03)00105-x)
13. Characterization of the 3-D microstructure of mango (*Mangifera indica* L. cv. Carabao) during ripening using X-ray computed microtomography / D. Cantre, E. Herremans, P. Verboven [et al.] // *Innovative Food Science and Emerging Technologies*. – 2014. – Vol. 24. – P. 28–39. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2013.12.008>
14. Multifractal properties of pore-size distribution in apple tissue using X-ray imaging / F. Mendoza, P. Verboven, Q. Tri Ho [et al.] // *Journal of Food Engineering*. – 2010. – Vol. 99, N 2. – P. 206–215. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2010.02.021>

## References

1. Noordam J. C., Otten G. W., Timmermans A. J. M., van Zwol B. H. High speed potato grading and quality inspection based on a color vision system. *Control Systems*, 2017, pp. 15–24.
2. Golmohammadi A., Bejaei F., Behfar H. Design, development and evaluation of an online potato sorting system using machine vision. *International Journal of Agriculture and Crop Sciences*, 2013, vol. 6, no. 7, pp. 396–402.
3. Caprara C., Martelli R. Image analysis implementation for evaluation of external potato damage. *Applied Mathematical Sciences*, 2015, vol. 9, no. 81, pp. 4029–4041. <https://doi.org/10.12988/ams.2015.52170>
4. Tavakoli M., Mohsen N. Application of the image processing technique for separating sprouted potatoes in the sorting line. *Journal of Applied Environmental and Biological Sciences*, 2015, vol. 4, no. 11S, pp. 223–227.
5. Herremans E., Melado-Herreros A., Defraeye T., Verlinden B., Hertog M., Verboven P., Val J., Fernández-Valle M. E., Bongaers E., Estrade P., Wevers M., Barreiro P., Nicolai B. M. Comparison of X-ray CT and MRI of watercore disorder of different apple cultivars. *Postharvest Biology and Technology*, 2014, vol. 87, pp. 42–50. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2013.08.008>
6. Abrosimov K. N., Fomin D. S., Romanenko K. A., Korost D. V., Gerke K. M. Tomography in soil science: from the first experiments to modern methods (a review). *Eurasian Soil Science*, 2021, vol. 54, no. 9, pp. 1385–1399. <https://doi.org/10.1134/s1064229321090027>
7. Petrovic A. M., Siebert J. E., Rieke P. E. Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. *Soil Science Society of America Journal*, 1982, vol. 46, no. 3, pp. 445–450. <https://doi.org/10.2136/sssaj1982.03615995004600030001x>
8. Joschko M., Graff O., Muller P.C., Kotzke K., Lindner P., Pretschner D. P., Larink O. A non-destructive method for the morphological assessment of earthworm burrow systems in three dimensions by X-ray computed tomography. *Biology and Fertility of Soils*, 1991, vol. 11, pp. 88–92. <https://doi.org/10.1007/bf00336369>
9. Crestana S. *Water physics study on soil using computerized tomography (in Portuguese)* [Ph. D. Thesis]. São Paulo, 1985. 151 p.
10. Hainsworth J. M., Aylmore L. A. G. The use of computed assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content. *Australian Journal of Soil Research*, 1983, vol. 21, no. 4, pp. 435–443. <https://doi.org/10.1071/sr9830435>
11. Muziri T., Theron K. I., Cantre D., Wang Z., Verboven P., Nicolai B. M., Crouch E. M. Microstructure analysis and detection of mealiness in ‘Forelle’ pear (*Pyrus communis* L.) by means of X-ray computed tomography. *Postharvest Biology and Technology*, 2016, vol. 120, pp. 145–156. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2016.06.006>
12. Lammertyn J., Dresselaers T., Van Hecke P., Jancsó P., Wevers M., Nicolai B. M. MRI and X-ray CT study of spatial distribution of core breakdown in ‘Conference’ pears. *Magnetic Resonance Imaging*, 2003, vol. 21, no. 7, pp. 805–815. [https://doi.org/10.1016/s0730-725x\(03\)00105-x](https://doi.org/10.1016/s0730-725x(03)00105-x)
13. Cantre D., Herremans E., Verboven P., Ampofo-Asiama J., Nicolai B. Characterization of the 3-D microstructure of mango (*Mangifera indica* L. cv. Carabao) during ripening using X-ray computed microtomography. *Innovative Food Science and Emerging Technologies*, 2014, vol. 24, pp. 28–39. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2013.12.008>
14. Mendoza F., Verboven P., Tri Ho Q., Kerckhofs G., Wevers M., Nicolai B. Multifractal properties of pore-size distribution in apple tissue using X-ray imaging. *Journal of Food Engineering*, 2010, vol. 99, no. 2, pp. 206–215. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2010.02.021>

**Информация об авторах**

*Азаренко Владимир Витальевич* – член-корреспондент, д-р техн. наук, доцент, академик-секретарь. Отделение аграрных наук НАН Беларуси (пр. Независимости, 66, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: azarenko@presidium.basnet.by. ORCID: 0000-0003-2122-3281.

*Курилович Максим Игоревич* – науч. сотрудник. НПЦ НАН Беларуси по механизации сельского хозяйства (ул. Кнорина, 1, 220049, Минск, Республика Беларусь). E-mail: labpotato@mail.ru.

*Голдыбан Виктор Владимирович* – заведующий лабораторией. НПЦ НАН Беларуси по механизации сельского хозяйства (ул. Кнорина, 1, 220049, Минск, Республика Беларусь). E-mail: labpotato@mail.ru.

**Information about the authors**

*Azarenko Vladimir V.* – Corresponding Member, D. Sc. (Engineering), Associate Professor, Academic Secretary. Department of Agrarian Sciences of the National Academy of Sciences of Belarus (66, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: azarenko@presidium.bas-net.by. ORCID: 0000-0003-2122-3281.

*Kurylovich Maksim I.* – Researcher. Scientific and Practical Center of the National Academy of Sciences of Belarus for Agricultural Mechanization (1, Knorin Str., 220049, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: labpotato@mail.ru.

*Goldyban Viktor V.* – Head of the Laboratory. Scientific and Practical Center of the National Academy of Sciences of Belarus for Agricultural Mechanization (1, Knorin Str., 220049, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: labpotato@mail.ru.