

## Краткие сообщения Brief reports

Краткое сообщение  
УДК 633.13:631.82-027.236  
DOI: 10.14529/food250410

### ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ БИОРЕСУРСОВ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПОСЕВНЫХ КАЧЕСТВ ЗЕРНА ПШЕНИЦЫ

**Фань Ян**, [taniuxi108@gmail.com](mailto:taniuxi108@gmail.com)

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

**Аннотация.** Разработка новых видов органических удобрений является актуальным направлением в настоящее время, поскольку позволяет повысить урожайность сельскохозяйственных культур и снизить затраты на ведение агротехнических процессов. В этой связи активно развиваются инновационные направления формирования линейки продукции на основе различных биоресурсов в рамках решения задач нацпроекта «Технологическое обеспечение биноэкономики». Успешность разрабатываемых технологических решений возможно обеспечить на основе применения методов моделирования на этапе прогнозирования эффективности для решения конкретной задачи. Целью данного исследования является осуществление квантово-химического моделирования органических биоресурсов для прогнозирования их эффективности и полезности для посевных качеств зерна пшеницы. Объектом исследований был определен гумат калия – это органические калийные соли гуминовых кислот, получаемые из природного сырья (торфа, бурого угля, сапропеля), для которого были проведены квантово-химические расчеты с использованием программного пакета Gaussian 16, что послужило основанием для изучения возможных молекулярных взаимодействий гумата калия, гуминовой кислоты с клейковинными белками на примере глиаина зерна пшеницы, а также некоторых их комбинаций. Оценивались такие показатели, как локализация молекулярных орбиталей НОМО и LUMO, размер энергетического зазора НОМО-LUMO. Результаты исследования демонстрируют оптимальный размер энергетического зазора НОМО-LUMO для гуминовых кислот/ глиаина, который составляет 6,372 eV, что характерно для высокой кинетической стабильности молекулы. Порученные данные будут полезны для дальнейшего создания новых форм органических удобрений на основе возобновляемых биоресурсов для корректировки посевных качеств зерновых культур.

**Ключевые слова:** органический биоресурс, гумат калия, гуминовые кислоты, зерно пшеницы, квантово-химическое моделирование, сельское хозяйство

**Благодарности.** Статья выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (РНФ) в рамках проекта 24-16-20028 при научном консультировании д.т.н., проф. Потороко И.Ю.

**Для цитирования:** Ян Фань. Использование органических биоресурсов для обеспечения посевных качеств зерна пшеницы // Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». 2025. Т. 13, № 4. С. 89–94. DOI: 10.14529/food250410

Brief report  
DOI: 10.14529/food250410

## USE OF ORGANIC BIORESOURCES TO ENSURE THE SOWING QUALITIES OF WHEAT GRAIN

**Fan Yang**, *tanuoxi108@gmail.com*

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russia*

**Abstract.** The development of new types of organic fertilizers is currently a pressing area, as it allows for increased crop yields and reduced agricultural costs. In this regard, innovative approaches to developing a product line based on various bioresources are actively being pursued as part of the national project «Technological Support for the Bioeconomy». The success of developed technological solutions can be ensured by applying modeling methods at the efficiency prediction stage for solving a specific problem. The aim of this study is to conduct quantum-chemical modeling of organic bioresources to predict their efficiency and effectiveness for sowing wheat grain. The object of this study was potassium humate – organic potassium salts of humic acids obtained from natural raw materials (peat, brown coal, sapropel). Quantum-chemical calculations were performed using the Gaussian 16 software package. This served as the basis for studying the possible molecular interactions of potassium humate, humic acid, and gluten proteins, using wheat grain gliadin as an example, as well as some of their combinations. Parameters such as the localization of the HOMO and LUMO molecular orbitals and the HOMO-LUMO energy gap were evaluated. The study results demonstrate that the optimal HOMO-LUMO energy gap for humic acids/gliadin is 6.372 eV, which is characteristic of the molecule's high kinetic stability. The obtained data will be useful for the further development of new forms of organic fertilizers based on renewable bioresources for adjusting the sowing properties of grain crops.

**Keywords:** organic bioresource, potassium humate, humic acids, wheat grain, quantum chemical modeling, agriculture

**Acknowledgments.** The article was financially supported by a grant from the Russian Science Foundation (RSF) within the framework of project 24-16-20028 with scientific advice from Doctor of Technical Sciences, Professor I.Yu. Potoroko.

**For citation:** Yang Fan. Use of organic bioresources to ensure the sowing qualities of wheat grain. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Food and Biotechnology*, 2025, vol. 13, no. 4, pp. 89–94. (In Russ.) DOI: 10.14529/food250410

### Введение

На сегодняшний день разработка и внедрение новых биоресурсов является не просто актуальным направлением, а стратегической необходимостью для восстановления почв, производства безопасных продуктов питания и обеспечения долгосрочной продовольственной безопасности. Органические биоресурсы выступают как эффективная взаимосвязь между устойчивым и интенсивным, экологически ответственным земледелием. В этой связи активно развиваются следующие инновационные направления, к которым относятся удобрения с контролируемым высвобождением питательных веществ, наноформулы и микроэлементы позволяют питательным веществам быстрее и эффек-

тивнее проникать в клетки растений, специализированные формулы для сельскохозяйственных культур и условий климата, биоминеральные комплексы.

Разработка гуматов является важным направлением развития современного агропромышленного комплекса, поскольку позволяет использовать природные соединения, не оказывающие негативного воздействия на экосистемы. Стоит отметить, что гуматы являются биологически активными регуляторами роста и улучшителями структуры почвы, обеспечивающими комплексное улучшение агроэкосистем. Действие гуматов, направленное на повышение качества сельскохозяйственной продукции, основано на комплексе процессов: интенсификации фотосинтеза, стимуляции

ферментной активности и метаболизма, а также увеличения проницаемости клеточных мембран [1, 5, 7].

Однако существует также необходимость в улучшении гуматов для повышения их эффективности и использования в сельском хозяйстве. Современные технологии позволяют производить органические биоресурсы с улучшенными свойствами.

Гумат калия используется для различных культур, дозировка внесения зависит от вида, стадии её развития, а также от состава и структуры почвы. Гуматы калия – это органические калийные соли гуминовых кислот, получаемые из природного сырья (торфа, бурого угля, сапропеля). Таким образом, для зерна пшеницы биоресурс гумат калия может использоваться для предпосевной обработки семян стимулирования корнеобразования и другие физиологические процессы [6].

Для улучшения свойств гуматов и повышения их эффективности, а также полезности на этапе прогнозирования могут применяться методы квантово-химического моделирования. Данные методы моделирования могут использоваться для создания энергоэффективных удобрений и минимизирования нагрузки углеродных выбросов, таким образом возможно создавать базы данных по энергиям образования металлоорганических веществ, а также нахождению наиболее выгодных и экономичных способов получения солей металлов. Также стоит отметить, что моделирование позволит оптимизировать и определить свойства комплекса и установить их энергетически выгодное взаимодействие и химическую стабильность [2].

*Цель данного исследования* – осуществление квантово-химического моделирования органических биоресурсов для прогнозирования их эффективности и полезности для урожая зерна пшеницы.

#### **Объекты и методы исследования**

Для изучения приближённого описания связывания в молекулах, численного моделирования конфигурации молекул гумата калия, а также одного из основных компонентов гуминовой кислоты, глиадины зерна пшеницы, а также их комплекса проводились квантово-химические расчеты с использованием программного пакета Gaussian 16. В исследованиях использовался метод Ground state Hartree-Fock с применением базисного набора 3-21G/ RB3LYP. Исходные данные о гумате

калия, гуминовой кислоте и глиадине зерна пшеницы для квантово-химических расчетов были получены при помощи баз данных PubChem и PDB.

В рамках исследования учитывались такие показатели, как локализация молекулярных орбиталей HOMO и LUMO, размер энергетического зазора HOMO-LUMO (далее HOMO-LUMO gap). Затем осуществлялась статистическая обработка полученных данных квантово-химических расчётов молекул и их комплексов [10].

#### **Результаты и их обсуждение**

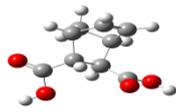
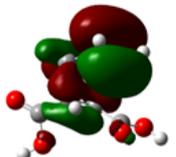
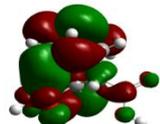
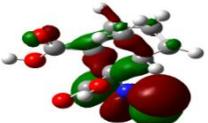
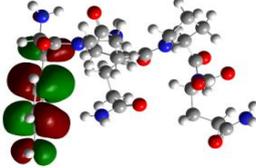
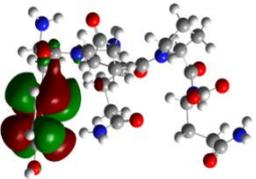
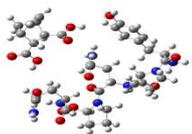
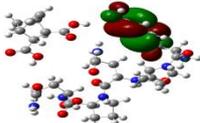
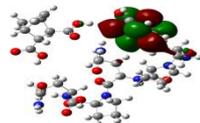
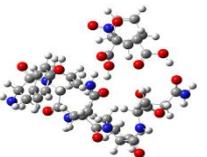
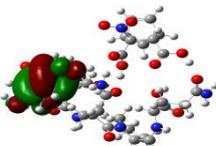
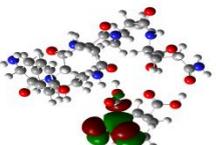
На первом этапе исследования была проведена оптимизация геометрии молекул гумата калия, гуминовой кислоты и глиадины зерна пшеницы как по отдельности, так и в комплексе для последующих квантово-химических расчетов. Локализация молекулярных орбиталей молекул и их комплексов представлена в таблице. Под молекулярной орбиталью понимается математическая функция, описывающая волновое поведение одного электрона в молекуле.

Молекулярная орбиталь определяет прочность связи через порядок связи. Таким образом, чем больше порядок связи, тем прочнее связь между двумя атомами. В связи с этим увеличение избытка связывающих электронов приводит к увеличению энергии связи (прочности связи). Показатель HOMO-LUMO gap связан с прочностью молекулярной связи, который определяет разницу в энергии между самой высокой занятой молекулярной орбиталью (HOMO) и самой низкой незанятой молекулярной орбиталью (LUMO) в молекуле.

Показатель HOMO-LUMO gap для всех составляющих компонентов (молекул) по отдельности составляет: гумат калия – 5,103 (eV/ ед. измерения электронвольты), гуминовые кислоты – 6,318 eV, глиадин – 5,778 eV. Таким образом, гуминовые кислоты обладают более высокой кинетической стабильностью молекулы и низкой химической реактивностью [2, 3].

При анализе молекулярных орбиталей HOMO и LUMO белково-лигандного комплекса, состоящего из гумата калия/ глиадины, а также гуминовой кислоты/ глиадины наблюдаются как связывающие, так и разрыхляющие орбитали. HOMO-LUMO gap для комплексов гумата калия/ глиадины составляет

Локализация молекулярных орбиталей НОМО и LUMO компонентов  
и белково-лигандного комплекса

Объект исследования	Химическая структура	Молекулярные орбитали	
		НОМО	LUMO
<b>Составляющие комплекса</b>			
Гумат калия			
Гуминовые кислоты			
Глиадин			
<b>Белково-лигандный комплекс</b>			
Гумат калия/ глиадин			
Гуминовые кислоты/ глиадин			

5,751 eV, а для гуминовых кислот/ глиадина – 6,372 eV. В связи с этим комплекс, состоящий из гуминовых кислот/ глиадина, является более устойчивым и может усилить биохимические процессы, укрепить фитоиммунную систему, увеличить энергию прорастания зерна. Гумат калия состоит из нескольких компонентов, их взаимосвязи оказывают значительный эффект на связывание с глиадином зерна пшеницы согласно рассчитанным показате-

лям. Поэтому необходим расчет для комплексной оценки всех параметров [4, 8, 9].

**Выводы по результатам работы**

Таким образом, квантово-химические расчеты могут быть полезны для прогнозирования эффективности, полезности комплекса гумата калия (лиганда)/ глиадина, а также гуминовой кислоты гумата калия (лиганда)/ глиадина. Рассчитанный показатель НОМО-LUMO gap может использоваться в исследо-

ваниях связывания белков и лигандов для анализа эффективности взаимодействия и возможности исключения возникающих рисков нарушения физиологии биологического объекта. Полученный массив данных будет

полезен для дальнейшего изучения и прогнозирования силы взаимодействия гумата калия, а также гуминовых кислот с белками зерна пшеницы для получения новых форм и комбинаций органических биоресурсов.

### Список литературы

1. Быкова, С.Л. [и др.] Агроэкологическая оценка применения гуматов при мелиорации техногенно нарушенных ландшафтов // Вестник КузГТУ. 2013. № 5. С. 58–61.
2. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование атомно-молекулярных процессов. Н. Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского. 2019. С. 79.
3. Муштакова, С.П. Основы квантовой механики и квантовой химии. Методы расчёта электронной структуры и свойств молекул: учеб. пособие для студентов хим. фак. / С.П. Муштакова, Н.А. Бурмистрова, И.Ю. Горячева и др. Саратов: Изд-во «Новый ветер», 2009. 107 с.
4. Потороко, И.Ю., Малинин А.В., Руськина А.А. Квантово-химическое изучение молекулярной структуры микотоксинов зерна пшеницы // Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». 2025. Т. 13, № 2. С. 95–102. DOI: 10.14529/food250210
5. Пашкова Г. И., Кузьминых А. Н. Роль гуматов в повышении урожайности зерна яровой пшеницы // Вестник Марийского государственного университета. 2016. Т. 2. № 1 (5). С. 48–50.
6. Сажина С.В., Сажин А.А., Власенкова А.И. Применение гумата калия в посевах гречихи сорта девятка // Современные научно-практические решения в АПК: сборник статей Всероссийской научной конференции (г. Тюмень, 8 декабря 2017 г.). Тюмень, 2017. С. 737–743.
7. Титов И.Н. Отечественные биопрепараты: регуляторы роста и развития растений и гуминовые препараты для современного земледелия: научный обзор. Владимир: ВГПУ, 2012. 30 с.
8. Цышевский, Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций: учебно-методическое пособие/ Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. Казань, КНИТУ, 2012. 88 с.
9. Lennart Gundelach, Thomas Fox, Christofer S. Tautermann, Chris-Kriton Skylaris. Protein-ligand free energies of binding from full-protein DFT calculations: convergence and choice of exchange-correlation functional. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, vol. 23(15), pp. 9381–9393. DOI: 10.1039/D1CP00206F
10. Markus Bursch, Jan-Michael Mewes, Andreas Hansen, Stefan Grimme. Best Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, vol. 61(42). DOI: 10.1002/anie.202205735

### References

1. Bykov S.L. [et al.] Agroecological assessment of the use of humates in technogenic reclamation of disturbed landscapes. *Bulletin of the Kuzbass State Polytechnic University*, 2013, no. 5, pp. 58–61. (In Russ.)
2. Ignatov S.K. *Kvantovokhimicheskoe modelirovanie atomno-molekulyarnykh protsessov* [Quantum-chemical modeling of atomic-molecular processes]. Nizhny Novgorod, 2019, p. 79.
3. Mushtakova S.P., Burmistrova N.A., Goryacheva I.Yu., Kapustina E.V., Monakhova Yu.B. *Osnovy kvantovoy mekhaniki i kvantovoy khimii. Metody rascheta elektronnoy struktury i svoystv molekul* [Fundamentals of quantum mechanics and quantum chemistry. Methods for calculating the electronic structure and properties of molecules]. Saratov, 2009. 107 p.
4. Potoroko I.Yu., Malinin A.V., Ruskina A.A. Quantum-chemical study of the molecular structure of wheat grain mycotoxins. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Food and Biotechnology*, 2025, vol. 13, no. 2, pp. 95–102. (In Russ.) DOI: 10.14529/food250210
5. Pashkova G.I., Kuzminykh A.N. The role of humates in increasing the grain yield of spring wheat. *Bulletin of the Mari State University*, 2016, vol. 2, no. 1 (5), pp. 48–50. (In Russ.)

6. Sazhina S.V., Sazhin A.A., Vlasenkova A.I. Application of potassium humate in the crops of buckwheat varieties nine. *Modern scientific and technical solutions in agriculture: collection of articles of the all-Russian scientific conference December 8, 2017 Part 1*, 2017, pp. 738–743. (In Russ.)

7. Titov I.N. *Otechestvennyye biopreparaty: regulatory rosta i razvitiya rasteniy i guminovyye preparaty dlya sovremennogo zemledeliya: nauchnyy obzor* [Domestic biological products: plant growth and development regulators and humic preparations for modern agriculture: scientific review]. Vladimir, 2012. 30 p.

8. Tsyshevsky, R.V. *Quantum-chemical calculations of mechanisms of chemical reactions: a teaching aid* [Kvantovo-himicheskie raschety mehanizmov himicheskikh reaktsij: uchebno-metodicheskoe posobie]/ R.V. Tsyshevsky, G.G. Garifzyanova, G.M. Khrapkovsky. Kazan, KNITU, 2012. 88 p.

9. Lennart Gundelach, Thomas Fox, Christofer S. Tautermann, Chris-Kriton Skylaris. Protein-ligand free energies of binding from full-protein DFT calculations: convergence and choice of exchange-correlation functional. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, vol. 23(15), pp. 9381–9393. DOI: 10.1039/D1CP00206F

10. Markus Bursch, Jan-Michael Mewes, Andreas Hansen, Stefan Grimme. Best Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, vol. 61(42). DOI: 10.1002/anie.202205735

***Информация об авторе***

**Ян Фань**, аспирант кафедры «Пищевые и биотехнологии», Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия; tanuoxi108@gmail.com

***Information about the author***

**Fan Yang**, Post-graduate student at the Department of Food and Biotechnologies, South Ural State University, Chelyabinsk, Russia; tanuoxi108@gmail.com

***Статья поступила в редакцию 10.10.2025***

***The article was submitted 10.10.2025***