

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
АДМИНИСТРАЦИЯ НОВОСИБИРСКОЙ ОБЛАСТИ
КОМИССИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДЕЛАМ ЮНЕСКО
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**МАТЕРИАЛЫ
XLVII МЕЖДУНАРОДНОЙ
НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

«Студент и научно-технический прогресс»

12–15 апреля 2009 г.

**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН И ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ**

**Новосибирск
2009**

УДК 10-301
ББК Ю я 431

Материалы XLVII Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс»: Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2009. 41 с.

Конференция проводится при поддержке Президиума Сибирского отделения Российской Академии Наук, Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 08-04-06050-г), Комиссии РФ по делам ЮНЕСКО.

Спонсор секции
Научно-образовательный центр
«Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии» НГУ
при совместной поддержке CRDF (RUX0-008-NO-06) и Рособразования

Редакционная коллегия:
председатель – академик РАН, д-р хим. наук В. В. Болдырев
Секретарь секции – Н.Е. Шикина

Члены бюро секции – академик РАН, д-р хим. наук В.В. Болдырев,
канд. хим. наук, проф. С.Д. Мызина

© Новосибирский государственный
университет, 2009

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ХИМИЯ И ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

МЕХАНОХИМИЧЕСКАЯ АКТИВАЦИЯ ГИПЕРИЦИНА В МАТРИЦЕ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

И.О. Ломовский

Новосибирский государственный университет

Гиперицин – биологически активное нафтодиантроновое соединение, содержащееся в траве зверобоя. Научные и клинические исследования показали, что гиперидин, проявляет антиоксидантную, антибиотическую, антивирусную и антиретровирусную активность, антистрессовый и антидепрессантный эффект. Гиперицин, как и большинство других биологически активных веществ, изолирован от внешних воздействий внутри клетки, что делает его биологически недоступным. Обычно эта проблема решается разрушением клеточной стенки органическими растворителями, однако данный подход является малоэффективным, так как гиперидин легко окисляется в процессе экстракции.

Известно, что в твердой фазе для большинства органических веществ окисление происходит значительно медленнее, чем в жидкости. Поэтому целью нашей работы являлось изучение возможности механохимического получения биодоступной формы гиперидина в матрице растительного сырья.

Нами показано, что механическая активация растительного сырья имеет пороговые значения по интенсивности и времени обработки. Определены оптимальные времена и интенсивности обработки для мельницы-активатора АГО-2.

Выход экстракции гиперидина из образцов механохимически активированных с щелочью в 6 раз выше, чем из исходного сырья, что не объясняется только изменением состава экстрагента. При механохимической активации со щелочью не образуется соли гиперидина, однако получающийся механокомпозит характеризуется высокой реакционной способностью по отношению к воде.

Показано, что при условиях, оптимальных для механохимической обработки, преимущественно происходит хрупкое разрушение растительного сырья. Изучено влияние пластической деформации и хрупкого разрушения растительного сырья на выход гиперидина при последующей экстракции.

Подобраны условия, позволяющие повышать выход гиперидина в 10 раз.

Научный руководитель – науч. сотр., канд. хим. наук К.Г. Королев

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛОВ АМИНОКИСЛОТ И ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ

Н.Е. Шикина

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирский государственный университет

В последние годы резко возрос интерес к получению и изучению смешанных кристаллов особенно в области фармацевтической промышленности. Это связано с такими практически важными свойствами, как растворимость, скорость растворения, гигроскопичность, устойчивость при хранении. Из существующих направлений исследований можно выделить два основных – это синтез (в основном совместное растирание сухих компонентов или компонентов в присутствии растворителя) и анализ структуры.

Ключевую роль в образовании смешанных кристаллов играют водородные связи.

В настоящее время, согласно Кембриджскому банку данных, известно достаточно много структур смешанных кристаллов. В нашей работе мы обратились к изучению смешанных кристаллов аминокислот (глицин, цистеин, аланин, серин) и органических кислот (щавелевая кислота). Данные системы являются хорошими модельными системами для изучения механизмов, реализующихся при использовании различных методик синтеза, а также для изучения поведения структур и установления корреляции «структура-свойство».

Для получения смешанных кристаллов использовались: сокристаллизация из водного раствора, высаливание различными осадителями, совместное растирание (co-grinding). Анализ полученных продуктов проводился методами ИК-спектроскопии и РФА и показал, что при использовании различных методик получаем различающиеся по стехиометрии продукты, даже если исходные реагенты были взяты в одинаковых соотношениях. Возможное объяснение данного факта основывается на рассмотрении кинетических и термодинамических факторов, отвечающих за формирование того или иного смешанного кристалла. Рассмотрена роль воды при механохимическом синтезе.

Изучено поведение структур смешанных кристаллов глицина и щавелевой кислоты при охлаждении методами ИК-, КР-спектроскопии и монокристалльной рентгеновской дифракции. Особое внимание уделено поведению N-H...O и O-H...O водородных связей.

Научный руководитель - д-р хим. наук, проф. Е.В. Болдырева

МЕХАНОХИМИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ И ХЕЛАТИРУЮЩИХ ПОЛИФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ РАСТВОРИМЫХ ФОРМ КРЕМНИЯ

Е.Г. Шаполова

Новосибирский государственный университет
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Для нормального развития и жизнедеятельности человека и животных требуется ежедневное поступление кремния. По данным литературы наибольшей биологической эффективности стоит ожидать от органических производных ортокремневой кислоты: ортокремниевых эфиров с белками и полисахаридами, эфиров оксикарбоновых и оксibenзойных кислот, эфиров полифенолов. Большинство других соединений кремния представляют собой неорганические малорастворимые вещества, в частности кремнезем – наиболее распространенное соединение кремния.

Целью работы является экспериментальное изучение механохимических реакций между диоксидом кремния и полифенольными соединениями, протекающих с образованием мономерных растворимых хелатированных форм диоксида кремния. В качестве модельных объектов выбраны силикагель и пирокатехин, в качестве перспективных для прикладных целей – галлокатехины чая и биогенный диоксид кремния. Механическую обработку проводили в вибрационной мельнице SPEX и планетарно-центробежной мельнице АГО-2 с водяным охлаждением барабанов. Для анализа содержания мономерных форм применяли фотометрический метод, который был оптимизирован с учетом специфики используемых реагентов и механически активированных образцов.

Показано, что механическая обработка силикагеля с пирокатехином приводит к значительному увеличению скорости растворения диоксида кремния при нейтральном pH. При совместной механической обработке катехинсодержащего сырья - зеленого чая и силикагеля наблюдаются аналогичные эффекты. Предложен механизм взаимодействия пирокатехина с силикагелем, включающий взаимодействие гидроксильных групп на поверхности силикагеля с пирокатехином и образование поверхностных комплексов. Исходя из предложенного механизма, разработана методика направленной модификации поверхности, применение которой приводит к увеличению эффективности процесса и увеличению скорости растворения.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. О. И. Ломовский

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В DL-ЦИСТЕИНЕ. ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ, КАК ИНСТРУМЕНТ СТАБИЛИЗАЦИИ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ

В.С. Миньков

Новосибирский государственный университет, НОЦ «Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»

Широко известно, что измельчение используется для увеличения реакционной способности твердых тел. В настоящем докладе мы сообщаем о необычном противоположном эффекте, когда растирание кристаллического образца приводит к значительному снижению его реакционной способности.

Недавно мы показали, что кристаллы DL-цистеина (пространственная группа P21/a, параметры ячейки при 295 К: $a=9.886(3)$, $b=4.7345(8)$, $c=12.876(3)$, $\beta=111.96(2)$, полиморф I) при охлаждении претерпевают фазовый переход первого рода в другой полиморф II (пространственная группа P21/a, параметры ячейки при 263 К: $a=9.695(3)$, $b=4.9788(10)$, $c=13.155(4)$, $\beta=121.88(2)$). Фазовый переход является обратимым и имеет большой гистерезис (более 100 К), причем температура, при которой происходит прямой и обратный переходы зависит от скорости охлаждения. В докладе сообщается о влиянии размера частиц на температуру полиморфного превращения.

Специально выращенные кристаллы DL-цистеина, крупный поликристаллический товарный реактив и растертый образец DL-цистеина, полученный измельчением товарного реактива были охарактеризованы методами ИК-спектроскопии, ДСК и рентгеновской дифракцией и представляют модификацию I. Размер и габитус частиц контролировались методом СЭМ. В работе показано, что в отличие от крупнокристаллических образцов, для которых фазовый переход наблюдался при около 250 К, растертый образец был стабилен вплоть до 83 К даже при многократных циклах охлаждения / нагревания. Методом КР-спектроскопии было показано, что после резкого охлаждения растертого образца до 3 К появляется фаза II. Интересно, что разница в размерах между крупнокристаллическим и растертым образцами составляет всего один порядок.

Исследования поддержаны грантами BRNE, CRDF, РФФИ (08-03-00143, 08-03-12130), программами по супрамолекулярной химии, применению фундаментальных исследований в медицине и интеграционными проектами 13, 109 и 27.44 РАН.

Научный руководитель: д-р хим. наук, проф. Е. В. Болдырева

ИССЛЕДОВАНИЕ L-АЛАНИНА И DL-АЛАНИНА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Н.А. Туманов

Новосибирский государственный университет

Научно-образовательный центр

«Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»

Аланин является простейшей оптически активной аминокислотой. В данной работе рассматривались энантиомер аланина - L-аланин и рацемат - DL-аланин. Для каждого из соединений при нормальных условиях известна единственная полиморфная модификация. Для L-аланина сообщалось о наличии фазового перехода из ромбической фазы в тетрагональную в области 2.3 ГПа по данным порошковой рентгеновской дифракции [1] и КР-спектроскопии. Кроме того, сообщалось о переходе в моноклинную фазу при 9 ГПа. Для DL-аланина фазовых переходов при повышении давления описано не было.

Целью данной работы было исследовать структуры L- и DL-аланина методами монокристалльной и порошковой рентгеновской дифракции, изучить структурные изменения при изменении давления.

Порошковые рентгенограммы получены на станции SNBL Европейского центра синхротронных исследований (Гренобль, Франция). Длина волны $\lambda = 0,7014 \text{ \AA}$. Данные по монокристалльной рентгеновской дифракции получены на дифрактометре Oxford Diffraction Xcalibur Gemini ($Mo_{K\alpha}$ излучение, графитовый монохроматор) непосредственно в НГУ. Измерения выполнялись в ячейках с алмазными наковальнями. Проведено уточнение порошковых рентгенограмм L- и DL-аланина в интервале давлений от 0 до 8.5 ГПа, а также расшифровка и уточнение структур L- и DL-аланина в интервале давлений от 0 до 5.0 ГПа по данным монокристалльной дифракции.

Показано, что в L-аланине отсутствует фазовый переход в области 2.3 ГПа и параметры решетки изменяются непрерывно вплоть до давления 8.5 ГПа. В области 2.3 ГПа происходит случайное совпадение параметров ячейки *a* и *b* без изменения пространственной группы симметрии. Также показано непрерывное изменение структуры в DL-аланине до давления 8.3 ГПа с аналогичным совпадением параметров ячейки *a* и *b* в области 2 ГПа.

Исследования поддержаны грантами BRNE, CRDF, РФФИ (08-03-00143, 08-03-12130), программами по супрамолекулярной химии, применению фундаментальных исследований в медицине и интеграционными проектами 13, 109 и 27.44 РАН.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. Е. В. Болдырева

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЛОКСИКАМА И ЕГО СМЕСЕЙ С ЭКСИПИЕНТАМИ

М.А. Дьяконова, С.А. Мызь

Новосибирский государственный университет

НОЦ «Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»

Современный противовоспалительный препарат мелоксикам существует в четырех различных таутомерных формах: енольной, цвиттер-ионной, катионной и анионной [1]. В настоящей работе синтезированы таутомерные формы мелоксикама и проведено сравнение их ИК-спектров со спектрами механически активированного лекарственного вещества. Предполагается, что при механической обработке возможен частичный переход мелоксикама из енольной в цвиттер-ионную форму.

Изучены возможности таутомерных переходов мелоксикама при механической активации в смесях с различными эксипиентами, которые используются для повышения биологической доступности лекарственных веществ в фармации. На основании данных ИК-спектроскопии предполагается, что в результате механической активации происходит взаимодействие лекарственного вещества с полимерами с образованием водородных связей, что приводит к повышению растворимости лекарственного вещества.

Проведено исследование возможности образования смешанных кристаллов мелоксикама с карбоновыми кислотами, используемыми в фармации: аскорбиновой, лимонной и янтарной при механической обработке смесей в различных соотношениях с добавлением небольших количеств растворителя.

С помощью методов рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии показано, что при механическом воздействии происходит взаимодействие мелоксикама с лимонной и янтарной кислотами. В случае янтарной кислоты добавление спирта при растирании способствует образованию смешанных кристаллов, в которых мелоксикам, предположительно, находится в катионной форме.

Проведен синтез солей мелоксикама с целью использования их для получения смешанных кристаллов. Получена бромистоводородная соль мелоксикама с выходом 58,9%.

1. P. Luger, K. Daneck, W. Engel, G. Trummlitz, K. Wagner. Eur. J. Pharm., 4 (1996) 175-187.

Научный руководитель – к.х.н. Т.П. Шахтшнейдер.

КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ПРОБЛЕМЕ УТИЛИЗАЦИИ ОРГАНОСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ

Е.С. Брюханова, А.Г. Ушаков
Кузбасский государственный технический университет

Нами предложена рациональная технология утилизации органосодержащих отходов животноводства. Основной процесс – биохимические превращения органических веществ навоза и навозных стоков – осуществляется за счет жизнедеятельности метанобразующих бактерий в анаэробных условиях. Процесс протекает в специальном герметичном аппарате – биореакторе. При разложении исходного материала образуется биогаз с содержанием метана до 60 % и биошлам – остаток после сбраживания.

В данной работе рассмотрены варианты последующей переработки продуктов ферментации (биогаза и биошлама) и представлены некоторые опытные данные. Предложено два основных направления переработки:

1. Получение энергетической продукции.

В данном направлении основным продуктом являются энергоносители.

Так получаемый биогаз может поступать прямо на сжигание в топки и газовые горелки для получения электричества (для крупномасштабных установок) и тепла. Также возможно предварительное обогащение газа по метану (до 95 %).

Из биошлама при правильном аппаратурном оформлении можно получить качественное твердое топливо с различной теплотворной способностью.

2. Получение сельскохозяйственной продукции.

В данном случае из биошлама получают биоудобрения – готовые экологически чистые жидкие и твердые удобрения, лишенные нитратов, семян сорняков, патогенной микрофлоры, яиц гельминтов, специфических запахов, при этом содержат азот, калий и фосфор – питательные вещества, необходимые для растений.

Биогаз по данному направлению может утилизироваться с получением кормовых белков благодаря жизнедеятельности метанооксиляющих бактерий.

Возможно сочетание данных направлений, например, сжигание биогаза и получение биоудобрений и т. д.

Реализация того или иного направления на конкретном объекте зависит от спроса на рынке соответствующей продукции. Для каждого направления и комбинации направлений разработаны соответствующие технологические схемы.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент Г. В. Ушаков

ПРЯМОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА ГИДРАТА АРГОНА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ II

Н.В. Кутаев, А.С. Стопоров, А.И. Анчаров
Новосибирский государственный университет
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Определение состава газовых гидратов представляет собой довольно сложную экспериментальную задачу, свидетельством чего могут служить существенные различия в составах газовых гидратов, определенных разными авторами [1]. Сугубо экспериментальные сложности связаны с приготовлением свободного ото льда образца гидрата и необходимостью применения специальных методик работы для предотвращения потери гидратом газа. Кроме того, имеются сложности, связанные с природой этих соединений. Как правило, газовые гидраты — соединения нестехиометрические, т.е. их состав в известных пределах зависит от условий синтеза и хранения. Для наиболее распространенных при невысоких давлениях гидратов кубической структуры I (КС-I) и кубической структуры II (КС-II) достаточно достоверно установлено, что большие полости структуры должны быть заполнены молекулами гостя, т.е. степень заполнения больших полостей значительно не отличается от единицы, тогда как малые полости могут иметь нецелочисленную степень заполнения, варьирующую между 0 и 1 [2].

В работе впервые аналитически исследована зависимость состава гидрата аргона кубической структуры II от давления. Кроме того показано, что стабильный при давлениях до 460МПа гидрат аргона КС-II способен закаливаться; при температуре жидкого азота этот гидрат может существовать не менее суток без заметного разложения.

Данная работа была выполнена при поддержке проектов CRDF Y5-C-08-01, CRDF Y5-C-08-09, проектов РНП.2.2.2.3.16033, РНП.2.2.2.3.16035 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

1. *Истомин В.А., Якушев В.С.* Газовые гидраты в природных условиях. – М.: Недра, 1992. – 236 с.

2. *Дядин Ю.А., Бондарюк И.В., Аладко Л.С.* // Журн. структур. химии. – 1995. – 36, № 6. – С. 1088 – 1141.

Научный руководитель – канд. хим. наук, А.Г. Огиенко

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ДВИЖУЩЕЙСЯ ВОЛНЫ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

А.А. Звеков, А.П. Боровикова
Кемеровский государственный университет

В работе [1] был предложен способ определения скорости движения фронта взрывного разложения по образцу твердого взрывчатого вещества. Методика [1] заключалась в измерении кинетической зависимости взрывного свечения при наблюдении движения фронта реакции через калиброванные отверстия в непрозрачной подложке, над которыми находился образец взрывчатого вещества. Цель настоящей работы: создать методику определения параметров движущегося очага химического взаимодействия в конденсированной фазе. Для определения параметров движущегося очага реакции в работе использованы три методики:

1. Оценку ширины волны реакции можно сделать непосредственно из осциллограммы: промежуток времени между отдельными пиками свечения соответствует расстоянию, проходимому реакцией с известной скоростью, равному разности расстояния между отверстиями и удвоенной ширины волны.

2. Для определения профиля очага необходимо восстановление пространственного распределения свечения в волне реакции. Очаг реакции аппроксимируется выражением, содержащим варьируемые параметры, значение которых определяется из сравнения экспериментальной и теоретической кинетической зависимости свечения.

3. Третий метод заключается в преобразовании экспериментальной кинетической зависимости свечения в пространственный профиль очага реакции. Наблюдение движущейся волны реакции через отверстие в подложке равносильно ее преобразованию интегральным оператором. Задача восстановления формы волны сводится к построению матрицы обратного оператора и преобразованию с ее помощью исходной кинетики взрывного свечения.

Авторы выражают глубокую благодарность профессору Ципилеву В.П. за помощь в проведении экспериментов и постоянный интерес к работе. Работа поддержана грантом РФФИ (№ 07-03-01099).

1. Боровикова А.П., Кригер В.Г., Каленский А.В., Ципилев В.П., Звеков А.А.// Ползуновский вестник, **3**, 66 - 70 (2008)

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. В. Г. Кригер, канд. физ.-мат. наук, доцент А. В. Каленский.

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРУ БЕЛКОВ

К.Е. Медведев

Институт цитологии и генетики СО РАН
Новосибирский государственный университет

Давление является важным параметром окружающей среды для живых организмов. Большинство из них живут в условиях атмосферного давления (100кПа), однако есть организмы, которые могут существовать в условиях повышенного давления (например, при 108,6МПа на дне Марианской впадины). Исследование механизмов адаптации живых систем к условиям повышенных давлений на молекулярном уровне позволит решить ряд важных задач в области биотехнологии, фармакологии и медицины. Одной из таких задач является разработка подходов, позволяющих проводить искусственный дизайн ферментов, сохраняющих свою стабильность и активность в условиях повышенных давлений.

Известно, что повышенное давление может приводить к разворачиванию белковой глобулы за счет проникновения молекул воды внутрь гидрофобного ядра. При изучении этих процессов одним из перспективных подходов является компьютерное моделирование [1].

Целью настоящей работы является разработка подхода к моделированию пространственной структуры белка в условиях высоких давлений с использованием программы GROMACS [2]. Исследованы особенности моделирования белков в условиях повышенных давлений при помощи этого программного пакета. Проведено компьютерное моделирование белка при высоком давлении на примере мутантного лизоцима фага Т4 [1]. Проведено сравнение полученных моделей пространственных структур белка с рентгеноструктурными данными.

Работа поддержана Интеграционным проектом СО РАН №109 и НОЦ НГУ (REC-008).

1. Collins M.D., Hummer G., Quillin M.L., Matthews B.W. and Gruner S.M. (2005) Cooperative water filling of a nonpolar protein cavity observed by high-pressure crystallography and simulation. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 102, 16668-16671.

2. van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., Groenhof G., Mark A. E. and Berendsen H. J. C. (2005) GROMACS: Fast, Flexible and Free. *J. Comp. Chem.* 26, 1701-1718.

Научный руководитель – канд. биол. наук, Д.А. Афонников.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГИДРАТА ТЕТРАГИДРОФУРАНА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ *IN SITU*.

А.В. Курносов, А.Г. Огиенко, Н.А. Туманов
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирский государственный университет

Несмотря на множество изученных систем с гидратообразованием в настоящее время известно менее десятка структурных типов газовых гидратов. В настоящей работе определена новая структура гидрата высокого давления, обнаруженная в системе тетрагидрофуран-вода.

Система тетрагидрофуран – вода представляет собой типичный пример систем с образованием нескольких гидратных фаз, существующих в разных диапазонах давлений [1]. Исследование этой системы имеет несомненный интерес для выявления характерных закономерностей образования клатратных гидратов при высоких давлениях в довольно обширной группе клатратообразующих систем. Благодаря простоте проведения эксперимента (отсутствует стадия зарядки аппаратов газом – гидраты тетрагидрофурана кристаллизуются из гомогенных водных растворов) эта система наиболее удобна для освоения и отработки методик исследований в камерах высокого давления.

Монокристалл гидрата тетрагидрофурана высокого давления (состав $\text{THF} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) был выращен в изобарических условиях (0.9 ГПа) при циклическом изменении температуры при фиксированном давлении в камере с алмазными наковальнями. По данным рентгеноструктурного анализа, гидрат кристаллизуется в орторомбической сингонии, пр. гр. Pnma , $a=12.5686 \text{ \AA}$, $b=11.5056 \text{ \AA}$, $c=6.6120 \text{ \AA}$. Структура гидрата ТГФ высокого давления является новым структурным типом клатратных гидратов на основе нового заполняющего пространство 14-гранника.

Данная работа была выполнена при поддержке проектов CRDF Y5-C-08-09, РНП.2.2.2.3.16035 программы «Развитие научного потенциала высшей школы», РФФИ 08-03-00143-а и 09-03-00451-а.

1. Yu.A. Dyadin, I.V. Bondaryuk, F.V. Zhurko. Clathrate hydrates at high pressures. // Inclusion compounds, V. 5, Eds. J.L. Atwood, J.E.D. Davies and D.D. MacNicol, Oxford University Press, Oxford, 1991, p. 214-275.

Научный руководитель: д-р. хим. наук, проф. Е.В. Болдырева
д-р. хим. наук, доцент А.Ю. Манакон

ГОЛОГРАФИЧЕСКИЙ ФОТОПОЛИМЕРНЫЙ МАТЕРИАЛ НА БАЗЕ МАТРИЦЫ ПОЛИВИНИЛАЦЕТАТА, СЕНСИБИЛИЗИРОВАННЫЙ КРАСИТЕЛЕМ ТИОЭОЗИНОМ

Е.В. Васильев, В.В. Шелковников, В.В. Русских
Новосибирский институт органической химии СО РАН
НОЦ «Молекулярный дизайн и экологически безопасные
технологии» НГУ

В представленной работе описана новая фотополимерная композиция (ФПК) для записи голограмм. Композиция разработана на базе мономеров акрилоилморфолина и тетраакрилат дигидроксидифенилсульфида в матрице поливинилацетата. Фотоиницирующая система данного фотополимера двойная и состоит из ксантенового красителя - сенсibilизатора Тиозина триэтиламмониевого и инициатора-акцептора йодониевой соли. Максимум длины волны спектра поглощения системы фотоиницирования расположен в области 558 нм.

В ходе исследований были сняты зависимости дифракционной эффективности фазовых пропускающих дифракционных решеток от энергии записывающего импульса. Данные зависимости были получены как для исследуемой ФПК, так и для ФПК содержащей в качестве красителя – сенсibilизатора Эритрозин триэтиламмониевый. После пост обработки (10 минут при температуре 110 °С), фотополимер с Тиозином показал 22.6 % дифракционной эффективности, что в 17 раз выше, чем показал фотополимер с Эритрозином ($DE = 1.3 \%$).

Было проведено сравнение ФПК с Эритрозином триэтиламмониевым в матрице ПВА и открытой ФПК на базе мономера акриламида, красителя Эритрозина динатриевого, инициатора триэтанолamina в матрице поливинилового спирта. Новый композиционный состав показал 1.3 % в сравнении с 0.03 % показанными композицией на базе ПВС. Показано, что при увеличении количества сшивающего мономера в композиции в 4 раза резко падает эффективность записи голограмм с 22.6 % до 0.1 %.

Сняты угловые селективности голограмм сформированных при различных энергиях записывающего импульса до и после обработки. Средняя ширина контура составляет 0.5° . Была осуществлена запись трех наложенных голограмм при различных углах наклона образца, снят контур общей угловой селективности.

зав.лаб., к.х.н. В. В. Шелковников

н.с., к.х.н. Е. В. Васильев

СТРУКТУРА АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ МЕДНО-ЦЕРИЕВЫХ ОКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

П.В. Снытников

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирский государственный университет

Введение оксида церия в качестве промотирующей добавки к катализаторам часто приводит к существенному улучшению их каталитических свойств, увеличению активности, стабильности, уменьшению зауглероживания. Поэтому такие системы находят все более широкое применение в различных каталитических процессах. В данной работе рассматриваются закономерности формирования оксидных медно-цериевых каталитических систем, в которых оксид церия выступает в качестве носителя. Ранее, было обнаружено, что медно-цериевая система проявляет высокую активность и селективность в реакции окисления СО в присутствии водорода.

В работе проведены синтезы с применением различных методов, позволяющих в первую очередь варьировать текстурные и морфологические свойства синтезируемого медно-цериевого катализатора. Было обнаружено, что в этом катализаторе активными центрами являются медные двумерные или трехмерные кластеры, распределенные на поверхности оксида церия. Как это известно, медь, в сравнении с другими переходными металлами, наиболее легко может встраиваться в решетку оксида церия благодаря близости ионных радиусов, создавая при этом кислородные вакансии и увеличивая подвижность кислорода в катализаторе. Наличие таких медных кластеров предоставляет возможность для адсорбции СО, но затрудняет диссоциативную адсорбцию Н₂, что позволяет проводить окисление СО в мягких условиях в атмосфере водорода. Введение дополнительных переходных металлов незначительно влияет на состав и распределение медных кластеров - активных центров, поэтому это слабо сказывается на активности катализаторов.

Работа выполнялась при частичной финансовой поддержке гранта BRNE Y4-C-08-12.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО СПЕКАНИЯ ПЛАТИНОВЫХ И ЗОЛОТЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

А.В. Нартова

Научно-образовательный центр

«Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН

Новосибирский государственный университет

Преодоление проблемы термического спекания активного компонента нанесенных катализаторов, ведущего к их дезактивации, является одной из основных задач современного катализа. В частности, замена платины в катализаторах дожигания выхлопов автомобилей на золото в перспективе позволит решить проблему «холодного старта». Однако известно, что каталитической активностью обладают только наночастицы золота, легко спекающиеся, а следовательно, и дезактивирующиеся в условиях прогрева.

В рамках представленной работы было проведено сравнительное исследование термической стабильности модельных катализаторов Pt/Al₂O₃/FeCrAl и Pt/SnO₂/Al₂O₃/FeCrAl, приготовленных методами, традиционными для прикладного катализа. Предполагается, что в предложенных условиях приготовления систем модифицирующая добавка (SnO₂) выступает в качестве промежуточного слоя между Pt и носителем (Al₂O₃). Методом сканирующей туннельной микроскопии показано, что Pt-Sn катализаторы обладают значительно более высокой стабильностью по отношению к спеканию в условиях термической обработки по сравнению с немодифицированными системами за счет изменения характера взаимодействия нанесенных частиц с поверхностью носителя.

Для изучения особенностей термического спекания на воздухе катализаторов Au/ δ -Al₂O₃, выполненного на основе данных электронной микроскопии, использовался «кинетический подход», а именно: анализ временных и температурных зависимостей среднего размера частиц золота. В ходе исследования было показано, что детальный механизм укрупнения наночастиц Au и значение наблюдаемой энергии активации зависят от температурного диапазона обработки.

Полученные сведения весьма полезны в плане разработки методов стабилизации активного компонента, а следовательно, совершенствования уже существующих и внедрения новых термостабильных каталитических систем.

Благодарности: Автор выражает благодарность за финансовую поддержку работы в рамках программы, проводимой совместно Министерством образования и науки РФ и фондом АФГИР (CRDF), грант РНП.2.2.2.3.10032 (У4-С-08-07), а также Программы фундаментальных исследований Президиума РАН на 2009 год № 27, проект № 51.

СМЕШАННЫЕ КРИСТАЛЛЫ МЕЛОКСИКАМА

С.А. Мызь

НОЦ «Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»
Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН

В работе исследована возможность получения смешанных кристаллов мелоксикама с 18 карбоновыми кислотами.

Мелоксикам – современный нестероидный противовоспалительный препарат [1], плохорастворимый в воде и органических растворителях.

Традиционным методом получения смешанных кристаллов является со-кристаллизация из раствора или расплава. Однако этот метод не может быть применен к веществам, имеющим плохую растворимость или термически неустойчивым. В таких случаях могут быть использованы механохимические методы. Эти методы являются экологически более чистыми благодаря отсутствию большого количества органических растворителей.

Механическую обработку смесей мелоксикама с карбоновыми кислотами проводили в вибрационной мельнице SPEX 8000 (CertiPrep Inc., USA) при комнатной температуре в течение 20-30 минут или растиранием вручную в агатовой ступке, как в сухом виде, так и с добавлением небольших количеств растворителя. Полученные образцы исследовали методами рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии.

Смеси мелоксикама с янтарной, малиновой и некоторыми другими кислотами, обработанные с добавлением определённого растворителя, теряли жёлтую окраску, присущую исходному мелоксикаму, и становились бесцветными, что позволяет предположить переход мелоксикама в катионную форму и образование смешанных кристаллов. Появление на рентгенограммах новых рефлексов подтверждает образование продуктов с кристаллической структурой, отличной от структуры мелоксикама и исходной карбоновой кислоты. На основании сравнения ИК-спектров предположено, что взаимодействие компонентов происходит за счёт образования водородных связей между молекулами мелоксикама и карбоновой кислоты. Подобные изменения в ИК-спектрах наблюдались для смешанных кристаллов, полученных со-кристаллизацией из раствора и из расплава.

1. P. Luger, K. Daneck, W. Engel, G. Trummlitz, K. Wagner. Eur. J. Pharm., 4 (1996) 175-187.

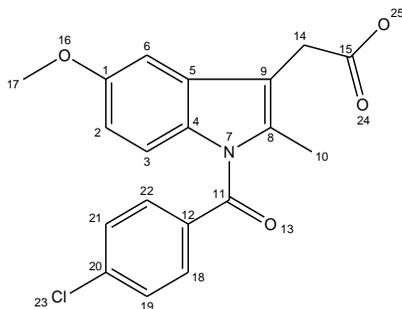
Работа выполнена при поддержке грантов CRDF (RUX0-008-NO-06) и РФФИ (07-03-00160, 08-03-12130).

Научный руководитель – канд. хим. наук Т.П. Шахтшнейдер

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИ АКТИВИРУЕМЫХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ ИНДОМЕТАЦИНА

М.А. Михайленко

Научно-образовательный центр «Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии», Новосибирский государственный университет
Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск



Индометацин является нестероидным противовоспалительным препаратом, имеющим широкое применение в фармации. Исследование его физико-химических свойств представляет интерес не только с практической точки зрения, поскольку может объяснять явления, наблюдаемые в процессе приготовления

лекарственных форм – измельчение, прессование, нагревание, но имеет и фундаментальное значение, поскольку индометацин служит в качестве модельного соединения при исследовании свойств молекулярных кристаллов.

В данной работе было проведено исследование процессов, протекающих в кристаллах индометацина при нагревании. С помощью метода импедансной спектроскопии показано наличие термически активируемых процессов. Определены их энергии активации. Показано что предварительная механохимическая активация способствует более раннему началу данных процессов. Показано наличие гистерезиса при циклах нагревания – охлаждения кристаллов.

Исследование двух кристаллических форм индометацина позволило выдвинуть предположение, что данные процессы обусловлены изменением геометрии групп, не участвующих в образовании водородных связей.

Автор выражает благодарность д.х.н. Уварову Н.Ф. за проведение диэлектрических измерений и к.х.н. Чесалову Ю.А. за ИКС-исследование образцов.

Работа выполнена при поддержке гранта CRDF RUX0-008-NO-06.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАПЫЛЕНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ

А.В. Уткин, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
СО РАН, Научно-образовательный центр «Молекулярный дизайн и
экологически безопасные технологии» при Новосибирском
государственном университете

В настоящее время особенно актуальной становится проблема улучшения качества материалов и изделий, а также повышение их эксплуатационных характеристик. Одним из возможных путей решения данной проблемы является нанесение защитных многофункциональных покрытий. Одним из наиболее перспективных методов получения и нанесения покрытий и подслоев металлов является метод детонационного напыления, основанный на использовании энергии взрыва для нагрева и разгона частиц нанопорошка.

Сочетание во взрыве высокой концентрации энергии, огромных скоростей и давлений позволяют продуктам химической реакции разогнать разогретые наночастицы материала до скоростей порядка 600-1000 м/с. Кроме того, поскольку детонация является чрезвычайно быстропротекающим процессом, ее воздействие на исходный материал (подложку) носит импульсный характер, т.е. воздействие определяется тепловым эффектом от осажденного порошка. Это позволяет избежать значительных структурных изменений и деформаций в исходном материале подложки.

В связи с пространственно временными масштабами явлений, экспериментальные исследования на микроуровне таких элементарных процессов, как динамика столкновения отдельных кластеров между собой и с поверхностью подложки вызывают серьезные затруднения. Поэтому основным способом их изучения является теоретическое моделирование. Метод молекулярной динамики, в силу своего пространственно-временного масштаба, дает возможность для детализированных исследований на субатомном уровне особенностей механизма формирования наноструктур и позволяет получать их термомеханические характеристики.

В представленном исследовании взаимодействие атомов как внутри подложки и нанокластера, так и между атомами подложки и нанокластера описывалось ЕАМ потенциалом (метод внедренного атома). Было проведено трехмерное исследование столкновения кластеров, как между собой, так и с подложкой с целью определения механизма образования связанных состояний в зависимости от размера кластера и скорости столкновения. В качестве физической системы рассматривались сферические кластеры меди диаметром 20 \AA , 50 \AA , 100 \AA и 200 \AA (нанокластер состоял из 369, 5473, 44115 и 354607 атомов соответственно). В начальный момент времени задавалась скорость кластеров, которая являлась контролируемым внешним параметром. В численных экспериментах медная подложка состояла из 111656

атомов. Длительные времена молекулярно-динамического моделирования в сочетании со значительным количеством рассматриваемых атомов и постоянно изменяющейся концентрацией атомов в пространстве, обусловили необходимость использования масштабируемого параллельного алгоритма, основанного на одномерной параллелизации с динамической балансировкой.

В результате моделирования взаимодействия нанокластеров, было установлено, что увеличение массы и размера нанокластеров способствует уменьшению порогового значения скорости, необходимой для образования связанной структуры. Численные эксперименты показали, что образование связанных структур нанокластер-нанокластер может происходить за счет возникновения металлической связи атомов кластеров при отсутствии плавления в области контакта. Исследование высокоскоростного осаждения нанокластеров на подложку показало, что увеличение размера напыляемого кластера не приводит к каким либо принципиальным изменениям физической картины явления. Осаждение нанокластеров происходило во всем исследуемом диапазоне скоростей, а физические основы образования связанного состояния системы нанокластер-подложка аналогичны случаю столкновений кластеров.

Работа была выполнена при поддержке гранта РНП.2.2.2.3.10036 Министерства образования и науки РФ и CRDF № Y4-P-08-14.

УВЕЛИЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЕННОГО ПОТОКА, ИСПОЛЬЗУЕМОГО ДЛЯ ИМПУЛЬСНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА МАТЕРИАЛЫ

С.В. Полосаткин

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

НОЦ “Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии”

В настоящее время в НОЦ “Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии” ведутся работы, ориентированные на получение новых материалов путем воздействия на образцы импульса давления большой амплитуды. Для получения такого импульсного давления предложено использовать мощный плазменный поток, вытекающий из многопробочной магнитной ловушки ГОЛ-3.

Одной из задач, связанных с реализацией описанного подхода, является увеличение параметров плазменного потока для расширения диапазона достижимых параметров – амплитуды и длительности импульса давления в образце. Проведенные эксперименты были направлены на увеличение энергии плазменного потока при увеличении длительности инжекции существующего нагревающего электронного пучка, а также разработку новой системы нагрева плазмы на основе инжектора мощного пучка нейтралов.

В результате изменения геометрии ускоряющего промежутка и оптимизации формы импульса напряжения на катоде ускорителя У-2 длительность инжекции релятивистского электронного пучка возросла с 8 до 13 мкс, что существенно повышает эффективность передачи энергии от пучка к плазме.

Кроме того, для повышения параметров плазменного потока разработан прототип системы нейтральной инжекции, включающий в себя инжектор быстрых атомов водорода и систему питания. Инжектор включен в систему управления установки ГОЛ-3. Работы по подготовке экспериментов по инжекции быстрых нейтралов потребовали модернизации конфигурации магнитного поля и системы газонапуска и поиску специальных режимов работы установки. Первые эксперименты по инжекции нейтрального пучка в плазму показали работоспособность этой системы и высокую степень захвата нейтральных частиц плазмой

Работа частично поддержана грантами Министерства образования и науки РФ, проект РПП.2.2.2.3.10033, CRDF, проект Y4-P-08-09

ВЫСОКОСКОРОСТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Е.И. Краус

Институт Теоретической и Прикладной Механики

им. С.А. Христиановича СО РАН

Научно-образовательный центр

”Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии”
при Новосибирском государственном университете

В аварийных ситуациях космические аппараты “отстреливают” ядерные энергетические установки. Существует вероятность того, что часть реактора, несмотря на значительные тепловые и механические нагрузки при прохождении плотных слоев атмосферы, может достичь поверхности земли. Скорость соударения оставшейся части реакторного блока может достигать 400 м/с. Причем, ввиду разнообразия земной поверхности, блок может встретить на своем пути водную поверхность, горные породы или мягкие грунты. Поэтому работа посвящена моделированию процессов соударения сложных двумерных тел о деформируемую преграду, построению численных моделей сложных технических объектов.

В работе развита численная технология, позволившая с помощью малопараметрического уравнения состояния [¹, ²] получать решения задач высокоскоростного соударения деформируемых космических объектов с поверхностью Земли в рамках разрушающейся упругопластической среды. Рассматриваются различные способы деформирования и разрушения сложных технических аппаратов. Представлены различные сценарии удара модельного реактора о среды различной прочности и сделаны выводы о последствиях таких столкновений, которые в некоторых случаях могут привести к экологической катастрофе.

Работа выполнена при поддержке гранта РНП.2.2.2.3.10030
Министерства образования и науки РФ, а так же гранта CRDF Y4-P-08-05.

¹ Краус Е.И. Малопараметрическое уравнение состояния твердого вещества при высоких плотностях энергии // Вестник НГУ. Серия: Физика.–2007.–Т.2, вып. 2.–С.65–73.

² Краус Е.И. Малопараметрическое уравнение ударной адиабаты с учетом эффекта плавления // Вестник НГУ. Серия: Физика.–2008.–Т.3, вып. 4.–С. 52–63.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЪЕМНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ НА ЛИНИИ ТРЕХФАЗНОГО РАВНОВЕСИЯ ГИДРАТ 1 - ГИДРАТ 2 - ГАЗ В СИСТЕМЕ АРГОН-ВОДА

А.Г. Огиенко*, А.Ю. Манаков, М. Ткач, Я. Липковски
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирский государственный университет
Институт физической химии ПАН

Исследования объемных изменений среди родственных гидратам соединений неоднократно выполнялись для льдов высокого давления [1], однако для гидратов подобных работ ранее не выполнялось.

В данной работе мы представляем результаты экспериментов по определению объемных изменений при трансформациях гидратов высокого давления в системе аргон - вода, проведенных с использованием *P-V-T* аппарата [2] высокого давления. Были измерены скачки объема при трансформациях гидратов аргона высокого давления КС-II/ГС-III, ГС-III/ТС-IV, TS-IV/RS-IV (где гидраты КС-II, ГС-III, TS-IV и RS-IV – гидраты аргона структур кубическая-II, гексагональная-III, тетрагональная-IV и ромбическая-II). Величины измеренных объемных изменений с хорошей точностью совпадают с вычисленными из зависимости мольного объема чистого аргона от давления и кристаллографических данных для гидратов аргона. Полученные экспериментальные данные позволили рассчитать величины ΔH данных фазовых превращений с использованием уравнения Клазиуса-Клайперона.

Таким образом, впервые с хорошей точностью и воспроизводимостью были измерены давления твердофазного превращения гидратов; впервые удалось связать ранее разрозненные данные в одну общую картину и проверить правильность уже известных данных независимыми методами.

Данная работа была выполнена при поддержке проектов CRDF Y5-C-08-09 и РНП.2.2.2.3.16035 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

1. Эйзенберг Д., Кауцман В. Структура и свойства воды. Л.: Гидрометеиздат, 1975.

2. Baranowski B., Tkacz M., Bujnowski W. Determination of absorption-desorption isotherms in metal-hydrogen systems in high-pressure region. // *Roczniki Chemii.* – 1975. – V.49. – p.437–439.

Научный руководитель: д-р. хим. наук А.Ю. Манаков

ПРОГНОЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С КОМПЛЕКСОМ БИОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

С.А. Кирлан, Л.Ш. Сементеева, Е.А. Кантор, Е.Д. Шорникова
Уфимский государственный нефтяной технический университет

В связи с требованиями экологической безопасности существует необходимость разработки препаратов, обладающих наряду с целевым действием, минимальной опасностью для человека и окружающей среды. Для сокращения временных и финансовых затрат при поиске соединений с определенными характеристиками нами разработана и апробирована компьютерная система (на основе программы SARD), содержащая дифференцированные сочетания функциональных групп по влиянию на различные виды биологической активности и токсичность (ЛД₅₀, мг/кг), комплексы математических моделей прогноза активности и интервалов токсичности, и алгоритмы реализации прогноза и молекулярного дизайна. Система содержит данные о следующих активностях: фунгицидной, гербицидной, инсектицидной, острой токсичности (ЛД₅₀), бронхолитической, иммунотропной, ингибиторах и индукторах микросомальной ферментной системы (цитохром Р-450), противоопухолевой, антигельминтной, эмбриотропной, антиоксидантной, противоязвенной. Система включает дифференцированные сочетания функциональных групп по влиянию на токсичность соединений различных химических классов (азолов, окси-, амидо- и иминосодержащих гетероциклических производных), 6 иерархических комплексов из 210 математических моделей прогноза интервалов токсичности (уровень правильного распознавания более 75 %) и специальные алгоритмы реализации прогноза. Система использована при конструировании и прогнозе новых антигельминтных препаратов. На основе базовой структуры малоактивного антигельминтного соединения (активность 45% при дозе 100 мг/кг; токсичность ЛД₅₀=500-1000 мг/кг) проведён молекулярный дизайн, в результате сконструированы с учётом токсичности и синтезированы производные метилового эфира 5-(2'-аминофенокси)-2-бензимидазолкарбаминовой кислоты, обладающие более высокой антигельминтной активностью и меньшей токсичностью (активность 69-80% при дозе 100 мг/кг; токсичность ЛД₅₀=более 1000 мг/кг). Полученные для них прогнозные и экспериментальные данные согласуются.

Научный руководитель- д-р хим. наук, проф., Е. А. Кантор

ПОЛУЧЕНИЕ БЕЛКОВЫХ ИЗОЛЯТОВ С ЗАДАНЫМИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КОСМЕТИЧЕСКИХ СРЕДСТВАХ ПО УХОДУ ЗА ВОЛОСАМИ

И.В. Бороданкова, Н.А. Ниценко

Кубанский государственный технологический университет

Аминокислоты и белки используются в косметологии очень давно. Многие аминокислоты, пептиды и белковые ингредиенты косметики относятся к биологически активным веществам, способным оказывать влияние на различные физиологические процессы, протекающие в коже.

В состав современных косметических средств аминокислоты входят в виде гидролизатов белков. Благодаря особенностям своего строения гидролизованные белки взаимодействуют с клеточными структурами рогового слоя кожи и удерживают в нем влагу. Белки также могут связываться со структурными белками кожи, укрепляя роговой слой эпидермиса.

Целью работы является получение новых белковых продуктов из растительного сырья и их модификация, с получением белковых изолятов для использования в косметических средствах.

Форма белка, природа, степень изменения в сторону уменьшения молекул до аминокислот является основой для получения новых продуктов.

Существующие технологии получения белковых продуктов заключается в извлечении водой с последующей кристаллизацией кислотами, а модификация осуществляется с помощью минеральных реагентов, либо ферментативная. В нашей работе для наиболее полного извлечения используется электроактивированная жидкость, полученная при электролизе 1-3% водного раствора соли. Электролиз ведется с таким учетом, что электролизу подвергается не вся концентрация соли, а только его 50-70%. На основе регулирования pH возможно глубокое извлечение, а осаждение и модификацию проводим электроактивированной жидкостью с противоположным pH.

Так как предлагается использовать электроактивированную жидкость, то в состав полученных растворов входят водо-, соле- и щелочерастворимые белки. Такие продукты рекомендуется использовать в косметических средствах по уходу за волосами. Полученный по данной технологии белок обладает хорошими физико-химическими показателями и органолептическими свойствами, экологически безопасен.

Научный руководитель – д-р техн. наук, проф. В. Е. Тарасов

ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ УГЛЕРОДНЫМ ВОЛОКНОМ И НАНОШПИНЕЛЬЮ МАГНИЯ³

М.Г. Колесова

Якутский государственный университет имени М.К. Аммосова
Биолого-географический факультет г. Якутск, Россия
Институт проблем нефти и газа СО РАН

В данном проекте разработаны новые антифрикционные материалы на основе высоконаполненного политетрафторэтилена, усиленного nanoшпинелью магния. Исследованы структурные изменения протекающие при введении углеродных волокон и nanoшпинели магния в полимерную матрицу. Выявлена взаимосвязь структуры со свойствами материалов. Исследованы процессы изнашивания.

Объекты исследования: политетрафторэтилен (ПТФЭ), углеродное волокно (УВ) и nanoшпинель магния (НШ).

С целью улучшения триботехнических показателей полимерных композиционных материалов (ПКМ) для модификации ПТФЭ использовали бинарный наполнитель, содержащий УВ и НШ. Концентрация наномодификатора в ПКМ соответствовала 1 мас.%, а концентрация УВ варьировалась от 5 до 20 мас.%.

Высокое наполнение (5-15 мас.%) приводит к улучшению износостойкости композитов в 2-30 раз по сравнению с промышленно выпускаемыми аналогами. Во всем концентрационном интервале приработка материалов заканчивается через 1-2 часа. Это связано с тем, что при трении исследуемых материалов образуется стабильная пленка переноса на поверхности контртела, и в дальнейшем образец из ПКМ трется по аналогичному материалу.

Структурные исследования ПКМ показали, что УВ в ПТФЭ распределены хаотично, а структурными элементами матрицы являются крупные несовершенные сферолиты. Причиной их формирования может быть присутствие в системе структурно-активных наночастиц шпинели магния, являющихся центрами кристаллизации структурных образований и изменивших процессы структурообразования.

Таким образом, показано перспективность введения в ПТФЭ бинарного наполнителя, содержащего УВ и НШ. Разработанные антифрикционные материалы, характеризуемые улучшенными служебными свойствами, для эксплуатации в экстремальных условиях.

³ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-03-98504-р_восток_a)

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ОЧИСТКИ ВОДЫ ОТ ПРИМЕСЕЙ ЦИНКА(II), КАДМИЯ(II), СВИНЦА(II), МЕДИ(II) И РТУТИ(II) В УСЛОВИЯХ КИПЯЩЕГО СЛОЯ ДОЛОМИТА

В.М. Милушкин, Е.С. Силицкая
ОСП НИИ «Высоких напряжений»
Томский политехнический университет

Проведены исследования сорбции примесей тяжелых металлов на доломите в условиях кипящего слоя.

Осаждение примесей меди (II) изучали с использованием модельного раствора, приготовленного из сульфата меди ($\text{CuSO}_4 \times 5\text{H}_2\text{O}$) ГОСТ 4165 на водопроводной воде. За первые 5с произошло снижение концентрации примеси меди(II) в 2,4 раза, а за следующие 10с – 2,0 раза. С увеличением времени наблюдались колебания в концентрации примеси Cu(II) , тем не менее, за 20-40с обработки достигается устойчивое снижение концентрации \approx в 4 раза.

Для изучения влияния ультразвука на осаждение ионов ртути(II) был приготовлен модельный раствор с концентрацией 0,001мг ртути(II) в 1л. Раствора. Обработка модельного раствора ртути(II) в кипящем слое доломита под действием ультразвука в течении 5с. Привела к снижению концентрации в \approx 1,83 раза, а после 20с. – в 2,72 раза.

Показано, что применение ультразвукового воздействия на доломит многократно повышается активность доломита к сорбции примесей тяжелых металлов из воды. За 5-10 с ультразвукового воздействия концентрация железа(II) и железа(III) снижается \sim в 10 раз, меди(II) – в 4,4 раза, ртути(II) - \sim в 2 раза.

Примеси тяжелых металлов удаляются из воды путем осаждения на механически активированной поверхности и на нанодисперсных продуктах измельчения доломита под действием ультразвука.

На основе проведенных исследований разработан метод обработки воды ультразвуком в кипящем слое доломита может быть рекомендован для доочистки питьевой водопроводной воды и доведения ее показателей до международных стандартов.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А.П. Ильин

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

СОЗДАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРОВ, ОБЛАДАЮЩИХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПАМЯТЬЮ

Е.В. Дмитриенко

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
Новосибирский государственный университет

Создание искусственных материалов, способных к распознаванию и связыванию разнообразных молекул-мишеней с высокой аффинностью и специфичностью является актуальной задачей современной науки [1].

Задачей, на решение которой направлена данная работа, является создание наноструктурированных полимеров, способных к специфичному взаимодействию с низко- и высокомолекулярными соединениями, такими как: нуклеотиды, олигодезоксирибонуклеотиды или белки. Предлагаемый нами подход базируется на идее использования растворимого капронового полимерного каркаса, который, находясь в растворе совместно с молекулой-шаблоном и порообразующим компонентом, формирует сайты распознавания молекулы и превращается в способный к молекулярному распознаванию полимер при удалении органического растворителя, т.е. при переходе капрона в твердотельное состояние. Фиксация молекулы-шаблона в полимерном каркасе обеспечивает возникновение специфической наноструктуры полимерной цепи твердотельного капрона, т.е. возникновение ее "молекулярной памяти". Показано, что импринтированный таким способом капрон способен к повторному связыванию биомолекулы-шаблона.

Такой способ позволяет создавать новые наноструктурированные материалы на основе капрона, пригодные для использования в различных областях молекулярной биологии, фундаментальной медицины и диагностики [2].

-
1. Alexander, C., Andersson, H.S., Andersson, L.I., Ansell, R.J., Kirsch, N., Nicholls, I.A., O'Mahony, J., Whitcombe, M.J. // Molecular imprinting science and technology: a survey of the literature for the years up to and including 2003 // *J. Mol. Recognit.* V. 19, P. 106-280 (2006).
 2. Дмитриенко Е.В., Пышная И.А., Рогоза А.В., Пышный Д.В. Способ получения молекулярно-импринтированного полимера. Заявка о выдаче патента РФ на изобретение от 25.08.2008 № 2008134752

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент. Д. В. Пышный

ВЛИЯНИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСА ОЛИГОНУКЛЕОТИДНЫЙ ЗОНД-ДНК НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ АЛЛЕЛЬ-СПЕЦИФИЧНОЙ ГИБРИДИЗАЦИИ

А.В. Анюшин

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирский государственный университет

Точечные мутации в геноме могут являться причиной генетических нарушений, а так же вызывать возникновение лекарственной устойчивости у возбудителей различных социально значимых заболеваний. Существуют различные подходы к детекции точечных мутаций, одним из которых является аллель-специфичная гибридизация (АСГ). Наиболее перспективным способом повышения селективности АСГ считается использование производных олигонуклеотидов и их аналогов. Однако до сих пор нет информации, позволяющей предсказывать, как повлияет та или иная модификация зонда на его селективность.

Целью данной работы являлся поиск и анализ закономерностей изменения селективности аллель-специфичной гибридизации при выявлении точечных мутаций путем возмущения структуры комплекса зонд-ДНК. Был проведен дизайн модельной олигонуклеотидной системы для оценки влияния на селективность типа выявляемого мисматча, типа возмущения структуры двойной спирали (мисматчи, апуриновый сайт, LNA, ионная сила и др.) и их взаимного расположения в ДНК-дуплексе. С использованием метода термической денатурации с оптической регистрацией сигнала были найдены термодинамические параметры образования (dH° и dS°) более 50 дуплексов.

Показана принципиальная возможность параллельного скрининга (96 проб) комплексообразующих свойств модифицированных зондов при различных условиях гибридизации и флуоресцентной детекцией сигнала, проводимой в режиме реального времени на ДНК-амплификаторе Bio-Rad IQ5. При этом использовались меченные по концам флуорофором и "тушителем" ДНК-матрицы, гибридизация которых с зондом приводит к возрастанию уровня флуоресценции в системе. Продемонстрирована адекватность определения термодинамических параметров гибридизации зондов с ДНК (dH° и dS°) в рамках данного подхода.

Полученные в работе систематические данные позволят проводить рациональный выбор модификаций в структуре зондов, повышающих селективность их гибридизации, и, тем самым, обеспечивающих надежное выявление точечных мутаций ДНК методом АСГ.

Научные руководители – канд. биол. наук, М. Р. Кабилов, канд. хим. наук, Д. В. Пышный

НОВЫЙ ПОДХОД К СОЗДАНИЮ ГИБРИДОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ

Е.К. Апарцин

Новосибирский государственный университет

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН

Углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие химической инертностью, механической прочностью, большой удельной площадью поверхности и совместимостью с биомакромолекулами и клетками, активно исследуются в последние годы в разных областях биотехнологии и биомедицины, включая конструирование биосовместимых транспортеров нуклеиновых кислот (НК) в клетки. Перспективным подходом к доставке функциональных НК в клетки является использование гибридов НК с углеродными нанотрубками.

Целью данной работы была разработка нового подхода к созданию гибридов олигонуклеотидов с УНТ, основанного на взаимодействии пиренильных конъюгатов олигонуклеотидов с поверхностью нанотрубки. Этот подход не требует применения жестких условий на стадии модификации поверхности УНТ и позволяет получать гибриды, в которых пиренильные конъюгаты олигонуклеотидов связываются с УНТ путем специфического стэкинг-взаимодействия остатка пирена с поверхностью нанотрубки.

Было проведено сравнительное изучение образования нековалентных конъюгатов одностенных и многостенных УНТ на примере модельных олигонуклеотидов и их конъюгатов с пиреном в присутствии и в отсутствие различных поверхностно-активных веществ (ПАВ). Методом просвечивающей электронной микроскопии продемонстрировано образование гибридов олигонуклеотидов с УНТ. Введение пиренильного остатка повышает способность олигонуклеотидов образовывать комплексы с УНТ. Исследованы спектральные характеристики и флуоресцентные свойства полученных гибридов.

Полученные результаты демонстрируют возможность использования предложенного подхода для получения перспективных транспортеров функциональных НК на основе УНТ.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 08-04-01634-а), ГК ФАНИ № 02.522.12.2005 и программой №27 фундаментальных исследований Президиума РАН "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов" (проект №62) .

Научные руководители – канд. хим. наук. А. Г. Веньямина
Д. С. Новопашина

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ТРАНСПОРТЕРЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ

А. А. Иглина

Новосибирский государственный университет

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН

Функциональные нуклеиновые кислоты (аптамеры, каталитические НК, малые интерферирующие РНК и др.) являются высокоселективными инструментами молекулярно-биологических исследований, а также перспективными терапевтическими средствами для лечения вирусных, онкологических и других заболеваний. Низкая эффективность проникновения в клетки-мишени является одним из основных препятствий при их использовании. Перспективным подходом к увеличению эффективности проникновения функциональных НК в клетки является конъюгирование последних с липофильными соединениями.

Целью данной работы являлась разработка общего подхода к синтезу 5'-липофильных производных функциональных НК на примере малых интерферирующих РНК (siРНК). В основе данного подхода лежит сочетание методов фосфитамидной и Н-фосфонатной химии. Липофильные соединения (холестерин, литохолевая кислота, олеиловый эфир литохолевой кислоты, олеиловый спирт, α -токоферол), модифицированные введением линкеров на основе аминокислот различной длины, были превращены с высоким выходом в Н-фосфонаты. Строение всех полученных соединений подтверждено методами ^1H -ЯМР, ^{31}P -ЯМР и ESI-MS. siРНК, содержащие в определенных положениях цепи 2'-О-метил-рибонуклеозиды, получали твердофазным фосфитамидным методом синтеза. Для ковалентного присоединения остатков липофильных соединений к 5'-концу смысловой цепи siРНК в конце синтетического цикла сборки олигонуклеотида вводили Н-фосфонатный синтон. Строение полученных конъюгатов после снятия с полимера, удаления защитных групп и выделения с помощью ВЭЖХ или гель-электрофореза доказано методом LC-ESI-MS. Исследованы термическая стабильность и нуклеазоустойчивость новых 5'-липофильных производных siРНК. Серия полученных конъюгатов siРНК передана в ЛБНК ИХБФМ СО РАН для исследования их биологической активности.

Работа поддержана ГК ФАНИ № 02.512.11.2200, Интеграционным проектом СО РАН № 41 и грантом № 21-18 Программы РАН “Фундаментальные науки – медицине”.

Научные руководители – канд. хим. наук А. Г. Веньямина
М. И. Мещанинова

ПИРЕНИЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ОЛИГО(2'-О-МЕТИЛРИБОНУКЛЕОТИДОВ) КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ЗОНДЫ ДЛЯ ДЕТЕКЦИИ МУТАЦИЙ В ДНК

С.А. Холодарь

Новосибирский государственный университет

В настоящее время разработка методов диагностики генетических нарушений является одной из актуальных проблем химической биологии и фундаментальной медицины. Вариабельность генома на 90% определяется точечными мутациями. Наиболее изученной мутацией гена метилентетрагидрофолатредуктазы (МТНFR), играющей ключевую роль в метаболизме фолиевой кислоты, является полиморфизм С→Т в положении 677. Этот полиморфизм связан, по крайней мере, с четырьмя группами многофакторных заболеваний: сердечно-сосудистыми и онкологическими заболеваниями, врождёнными дефектами развития нервной системы, а также дефектами развития плода.

Одним из подходов, позволяющих детектировать точечные мутации в ДНК, является использование флуоресцентных зондов на основе олигонуклеотидов. Данная работа посвящена дизайну и изучению свойств новых 5'- и 3'-моно- и биспиренильных производных олиго(2'-О-метилрибонуклеотидов), а также тандемных конструкций на их основе как перспективных флуоресцентных зондов для детекции точечных мутаций в ДНК. К участкам гена МТНFR, содержащим полиморфизм С677Т, синтезированы серии 5'- и 3'-моно- и биспиренильных конъюгатов олиго(2'-О-метилрибонуклеотидов), модифицированных по 3'-концу для предотвращения их элонгации ДНК-полимеразой, и доказано их строение. Продемонстрирована их химическая стабильность, а также устойчивость к действию нуклеаз сыворотки. Исследованы флуоресцентные свойства созданных однокомпонентных и тандемных зондов. Выявлено влияние структуры линкеров между пиренильным остатком и олигонуклеотидом, количества пиренильных остатков на стыке тандема, наличия 3'-"инвертированного" тимидина и положения мисматча на изменение спектров флуоресценции дуплексов зондов с ДНК мишенями. Продемонстрирована возможность использования исследованных зондов для детекции полиморфизма С677Т.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 08-04-01634-а) и ГК ФАНИ № 02.522.12.2005.

Научные руководители - канд.хим.наук Венямина А.Г.
Новопашина Д.С.

БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ В ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ПРОДУКТОВ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ.

Е.С. Добрыдина

Кафедра «Технология и организация пищевых производств»
Новосибирский государственный технический университет

В настоящее время всё большую актуальность приобретает разработка продуктов функционального назначения с использованием пектин содержащего растительного сырья, которое оказывает положительное влияние на иммунный статус человека. Их действующим началом являются пектины, витамины, полифенольные соединения и др.

Объектами данной работы являются пюре из яблок, клюквы, свёклы и корня хрена. Данные образцы исследовались по органолептическим и физико-химическим показателям стандартными методами. Для обоснования их функциональности было определено содержание пектина, степень его метоксилирования, антиоксидантная активность, минеральный состав и витамин С.

Количество пектина определяли кальций-пектатным методом. Исследования показали, что 100г пюре из клюквы и хрена удовлетворяет суточную потребность в пектине на 100%, свёкольное пюре – на 11%, яблочное – на 87%. В ходе работы была определена степень метоксилирования пектина. Установлено, что пюре из свёклы и хрена содержит низкометоксилированный пектин, который обладает радиопротекторными свойствами, а пюре из яблока и клюквы - высокометоксилированный пектин, обладающий высокой способностью связывать воду.

Кроме того, в исходных образцах пюре определяли антиоксидантную активность. Биологическое действие антиоксидантов обусловлено защитными свойствами, выраженными в способности нейтрализовать действие свободных радикалов. Установлено, что пюре из свёклы и клюквы обладают наибольшей антиоксидантной активностью.

В результате исследований, проведённых методом атомно-адсорбционной спектроскопии, было установлено, что пюре из яблока и хрена богато Са, пюре из клюквы – К, а пюре из свёклы – Na и К.

Результаты проведённой работы показали, что исследуемое растительное сырьё в виде пюре из свёклы, клюквы, яблока и корня хрена являются источниками биологически активных веществ и могут служить исходными ингредиентами для продуктов функционального назначения.

Научный руководитель – канд.техн.наук, доцент И.В. Мацейчик

*Автор выражает благодарность за помощь в проведении исследований
Бейзель Н.Ф., Королёву К.Г., Морозову С.В.*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОДУКТОВ ОКИСЛЕНИЯ 5'-МОНОФОСФАТ-2'-ДЕЗОКСИГУАНОЗИНА МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ В ПРИСУТСТВИИ ФТАЛОЦИАНИНА ЖЕЛЕЗА(II)

А.А. Кузнецова, О.С. Федорова

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН

Для разработки наиболее эффективных реагентов с целью воздействия на нуклеиновые кислоты необходимо знание структуры и свойств образующихся продуктов. К сожалению, в настоящее время, за небольшим исключением, такие сведения отсутствуют. Исследователи ограничиваются определением положения нуклеотида, в котором произошло изменение. В настоящее время в литературе нет данных по продуктам окисления ДНК, вызываемым фталоцианинами кобальта(II) и железа(II) (CoPc и FePc).

Ранее в наших экспериментах по специфичному к последовательности окислению ДНК H_2O_2 в присутствии конъюгатов олигонуклеотидов, несущих каталитически активные комплексы фталоцианинов Co(II) и Fe(II), наблюдали модификацию только остатков гуанина вблизи участков связывания конъюгатов с ДНК [1, 2]. При окислении ДНК-мишени O_2 в присутствии конъюгатов олигонуклеотидов, содержащих димерные комплексы фталоцианинов Co(II) и Fe(II), наибольшей модификации подвергались также остатки гуанина [3]. Для определения строения продуктов окисления гуанина в настоящей работе было исследовано окисление 5'-монофосфат-2'-дезоксигуанозина O_2 в присутствии FePc. Идентификацию продуктов окисления гуанина проводили на основе анализа масс-спектров и спектров электронного поглощения продуктов. Среди продуктов окисления были найдены следующие соединения: – свободное основание гуанин, свободное основание 8-оксо-7,8-дигидрогуанин, 1,2N-глиоксальный аддукт 5'-монофосфат-2'-дезоксигуанозина, 5'-монофосфат-2'-дезоксигуанозин, 5'-альдегидо-2'-дезоксигуанозин, 2'-дезоксигуанозин, 2'-дезоксигуанозин.

1. Kuznetsova A.A., Chernonosov A.A., Kuznetsov N.A., Koval V.V., Knorre D.G. and Fedorova O.S. *Bioinorg. Chem. Appl.*, **2006**, 1 (2006).

2. Кузнецова А.А., Соловьева Л.И., Федорова О.С. *Биоорган. Химия.*, **34**, 683 (2008).

3. Kuznetsova A.A., Lukyanets E.A., Solovyeva L.I., Knorre D.G., Fedorova O.S. *J. Biomol. Str. Dyn.*, **26**, 307 (2008).

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. О. С. Федорова

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДНК-ТОПОИЗОМЕРАЗЫ I С ДНК-ИНТЕРМЕДИАТАМИ И БЕЛКАМИ ЭКСЦИЗИОННОЙ РЕПАРАЦИИ ОСНОВАНИЙ

Н.А. Лебедева

Новосибирский государственный университет

Исследовано взаимодействие рекомбинантной ДНК-топоизомеразы I (Top1) человека с линейными и кольцевыми ДНК-структурами, содержащими одноцепочечные разрывы или короткие бреши, но лишенными специфических сайтов узнавания Top1. Для увеличения селективности модификации белков в экстрактах клеток и ядер на основе ДНК фага M13 mp19 синтезированы кольцевые двухцепочечные ДНК, содержащие остатки урацила, статистически распределенные в одной из цепей. ДНК-структуры с разрывами получали под действием очищенных урацил ДНК-гликозилазы и апуриновой/апиримидиновой эндонуклеазы I или эндогенных ферментов клеточных экстрактов. Полученные ДНК, содержащие одноцепочечные разрывы, использовали в качестве зондов для ковалентной пришивки белков ядерного экстракта семенников крупного рогатого скота, клеточных экстрактов меланом человека и фибробластов мыши, а также рекомбинантной топоизомеразы I человека. Модификация белков экстрактов с использованием кольцевых ДНК происходила с большей селективностью, чем при использовании коротких ДНК-дуплексов. Показано влияние ключевых белков эксцизионной репарации оснований на образование ковалентного аддукта Top1 с ДНК-интермедиатами репарации. Обнаружено частичное ингибирование образования Top1-ДНК аддуктов при добавлении PARP1 в отсутствие NAD⁺, тогда как в присутствии NAD⁺ наблюдалось образование высокомолекулярного продукта, скорее всего, соответствующего поли(АДФ)рибозилированному Top1-ДНК аддукту. Полученные данные свидетельствуют о том, что ключевые белки эксцизионной репарации оснований могут влиять на образование суицидного Top1-ДНК аддукта. С помощью иммунопреципитации Top1 идентифицирована как белок, образующий основной продукт модификации с ДНК, содержащей разрыв, в ядерном экстракте семенников крупного рогатого скота.

Работа поддержана грантом CRDF (BRHE Y4-B-08-06), РНП.2.2.2.3.10031, РФФИ 07-04-00389, РФФИ 09-04-91320.

ИСКУССТВЕННЫЕ РИБОНУКЛЕАЗЫ НА ОСНОВЕ КОРОТКИХ ПЕПТИДОВ

Л.С. Королева

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
Новосибирский государственный университет,
Научно-образовательный центр "Молекулярный дизайн и экологически
безопасные технологии"

Реагенты, способные эффективно и специфично расщеплять РНК, могут найти широкое применение в молекулярно-биологических исследованиях.

Нами предложены эффективные искусственные рибонуклеазы на основе пептидов и пептидоподобных соединений, моделирующих каталитические центры природных ферментов: рибонуклеазы А и Т1. Структурно-функциональные аналоги каталитического центра рибонуклеазы А представляли собой различные ди- и трипептиды, содержащие в своем составе гистидин или гистамин, а также положительно заряженные аминокислоты (Lys и Arg). Модели каталитического центра рибонуклеазы Т1 были построены на основе тетрапептидов, содержащих отрицательно заряженную (Glu) и положительно заряженные (Lys/Arg) аминокислоты, разделенные линкерами различной длины.

Искусственные рибонуклеазы на основе коротких пептидов проявили высокую противовирусную активность. Эксперименты проводились на модели репродукции вируса гриппа А/Гонг Конг/1/68 (H3N2). Из 15 изученных соединений 10 оказались эффективными против вируса гриппа. Некоторые из предложенных соединений по своей активности сопоставимы или превосходят известные противовирусные препараты, использовавшиеся в качестве контроля (ремантадин, дейтифорин).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 07-04-00990-а, 08-04-90038-Бел_а), PharmaMed RUXO-008-NO-06.

ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ ФОРМ ЛАКТОФЕРРИНА С ДРУГИМИ БЕЛКАМИ МОЛОКА ЧЕЛОВЕКА

С.Е. Соболева

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирский государственный университет

Лактоферрин (ЛФ) содержится в эпителиальных секретах, гранулах нейтрофилов, плазме крови и в высокой концентрации в молоке. Помимо транспорта железа белок характеризуется уникальным набором биологических функций. ЛФ обладает антираковой активностью, проявляет антибактериальные, противовирусные и антигрибковые свойства. Различные фракции ЛФ обладают ДНК-, РНК- и нуклеотид-гидролизующей, фосфатазной и амилолитической активностями. Белок регулирует функции иммунокомпетентных клеток, процессы клеточной пролиферации и дифференцировки, активирует транскрипцию. ЛФ является белком «острой фазы», его концентрация повышается в участках воспалительных процессов, где он регулирует воспаление. Принимая во внимание небольшой размер молекулы белка (80 кДа), можно предположить, что многие уникальные функции ЛФ могут объясняться многообразием состояний этого белка в клетке, в том числе в виде комплексов с другими клеточными компонентами.

В связи с этим был проведен поиск белков, которые могли бы взаимодействовать с ЛФ непосредственно в биологических жидкостях. При гель-фильтрации молочной плазмы был получен комплекс белков молока молекулярной массой порядка 1100 кДа. Основной белок комплекса имеет массу 80 кДа, с помощью иммуоблотинга было показано, что он является лактоферрином человека. Кроме ЛФ комплекс содержит антитела (IgG и sIgA), альбумин и лактальбумин, а также РНК размером порядка 10 000 нуклеотидов. Исследование цитотоксического эффекта на линиях раковых клеток человека и мыши показало, что полученный комплекс белков молока с РНК демонстрирует повышенную цитотоксичность по сравнению с отдельными белками, в частности с ЛФ. Кроме того, комплекс обладает протеинкиназной активностью, не характерной для отдельных его составляющих.

Полученные данные говорят о том, что в биологических жидкостях человека ЛФ может находиться в комплексе с другими белками и нуклеиновыми кислотами. Это создает дополнительные возможности изменения конформационных состояний белка и, как следствие, его биологических свойств.

Работа поддержана Программой «Фундаментальные исследования и высшее образование» РФ (РНП.2.2.2.3.16036) и BRNE-fellowship 2007 (Y5-B-08-11).

ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА-ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНАЯ - АКТИВНОСТЬ» И «СТРУКТУРА-ТОКСИЧНОСТЬ» В РЯДУ НЕСТЕРОИДНЫХ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Р.Р. Мухаметова, В.Р. Хайруллина, С.А. *Кирлан, А.Я. Герчиков,
*Е.А. Кантор, **Ф.С. Зарудий, **Л.А. Тюрина

Башкирский государственный университет, Россия, Уфа

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа

**Институт органической химии уфимского научного центра РАН, Уфа

Целью настоящей работы было теоретическое изучение взаимосвязи между структурой, противовоспалительной активностью (ПВА) и токсичностью широкого круга НПВЛС и ряда других соединений с выраженными противовоспалительными свойствами. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие практически важные задачи: во-первых, теоретическое изучение структурных закономерностей эффективности противовоспалительного и токсического действия широкого круга НПВЛС; во-вторых, применение установленных закономерностей при молекулярном дизайне, в частности, 4-гидрокси-2-метил-N-(5-метил-1,3-тиазол-ил)-2Н-1,2-бензотиазин-3-карбоксамид 1,1-диоксида; в третьих, поиск новых соединений с выраженным противовоспалительным действием и низким уровнем токсичности.

Исследования взаимосвязи «структура – противовоспалительная активность (ПВА)» проводили в рамках основных процедур компьютерной системы SARD-21 (System of analysis and active structures design). Формирование модели прогноза эффективности НПВЛС проводили на основе 52 высокоэффективных НПВЛС (значение IC_{50} составляло не более 0.1 мкМ) и 47 средне- и низкоэффективных НПВЛС (значение IC_{50} превышали 1.0 мкМ). Модель прогноза токсичности формировали на основе 206 структур: 112 высоко- и умереннотоксичных ($LD_{50} < 5000$ мг/кг массы тела самцов белых крыс) и 94 низкотоксичных оксипроизводных ароматических гетероциклических карбоновых кислот ($LD_{50} > 5000$ мг/кг). Выявлены структурные признаки, характерные для эффективных НПВЛС с низким уровнем токсического действия. В результате молекулярного дизайна 4-гидрокси-2-метил-N-(5-метил-1,3-тиазол-ил)-2Н-1,2-бензотиазин-3-карбоксамид 1,1-диоксида получено 11 умеренно токсичных производных бензамида с выраженным противовоспалительным действием. Полученные результаты позволяют считать перспективным синтез этих соединений и изучение их фармакологических свойств.

Научный руководитель: канд. хим. наук, доцент В.Р. Хайруллина

ВОДНО ДИСПЕРСИОННЫЕ КРАСИТЕЛИ ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНОГО КРАШЕНИЯ ДРЕВЕСИНЫ ХВОЙНЫХ ПОРОД

И.В. Петров

Лесосибирский филиал Сибирского государственного технологического университета

В данной статье представлены результаты исследований в области разработки воднодисперсионных красителей, предназначенных для отделки массива из хвойной древесины. Разработанные воднодисперсионные красители характеризуются получением равномерного покрытия на древесине, которая обладает ярко выраженными анизотропными свойствами, не вуалируют текстуру, не приводят к набуханию ранней зоны, равномерно окрашивают сучки, смоляные участки, торцовые срезы.

Нанесение воднодисперсионных красителей осуществляется распылением, с давлением 3,5 МПа, расстояние от сопла до детали 35 см, толщина получаемого покрытия 15 мкм.

Отличительной особенностью предлагаемых воднодисперсионных материалов является состав, и как результат, улучшенные физико-механические характеристики, а также экологичность отделочных материалов и получаемых в результате покрытий. Формирование покрытий происходит в результате коагуляции красителя на подложке (удаление основной части воды с образованием промежуточного геля, синерезиса промежуточного геля, аутогезионных процессов). На поверхности образуется микропенка, обеспечивающая равномерную окраску. Микропенка образуется за счет наличия в составе пленкообразователя, обладающего лиофильными свойствами, но в то же время не коагулирующего. Вязкость состава составляет 15с (по ВЗ — 4). Агрегативная устойчивость низковязкой системы обеспечивается наличием в составе поверхностно-активных веществ, а также высокодисперсных пигментных паст, характеризующихся повышенной нерастворимостью и инертностью в водной среде и целевых добавок.

Основными направлениями развития ЛКП является улучшение декоративных и эксплуатационных свойств, за счет разработки новых экологически чистых материалов, снижения использования вредных веществ.

Научный руководитель – канд. техн. наук М.А. Чижова

СОДЕРЖАНИЕ

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ХИМИЯ И

ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

И.О. Ломовский.....	3
Н.Е. Шикина.....	4
Е.Г. Шаполова.....	5
В.С. Миньков.....	6
Н.А. Туманов.....	7
М.А. Дьяконова, С.А. Мызь.....	8
Е.С. Брюханова, А.Г. Ушаков.....	9
Н.В. Кутаев, А.С. Стопоров, А.И. Анчаров.....	10
А.А. Звекоев, А.П. Боровикова.....	11
К.Е. Медведев.....	12
А.В. Курносоев, А.Г. Огиенко, Н.А. Туманов.....	13
Е.В. Васильев, В.В. Шелковников, В.В. Русских.....	14
П.В. Снытников.....	15
А.В. Нартова.....	16
С.А. Мызь.....	17
М.А. Михайленко.....	18
А.В. Уткин, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин.....	20
С.В. Полосаткин.....	22
А.Г. Огиенко*, А.Ю. Манаков, М. Ткач, Я. Липковски.....	23
С.А. Кирлан, Л.Ш. Сементеева, Е.А. Кантор, Е.Д. Шорникова.....	24
И.В. Бороданкова, Н.А. Ниценко.....	25
М.Г. Колесова.....	26
В.М. Милушкин, Е.С. Силицкая.....	27

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН

БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Е.В. Дмитриенко.....	28
А.В. Анюшин.....	29
Е.К. Апарцин.....	30
А.А. Иглина.....	31
С.А. Холодарь.....	32
Е.С. Добрыдина.....	33
А.А. Кузнецова, О.С. Федорова.....	34
Н.А. Лебедева.....	35
Л.С. Королева.....	36
С.Е. Соболева.....	37
Р.Р. Мухаметова, В.Р. Хайруллина, С.А. *Кирлан, А.Я. Герчиков.....	38
И.В. Петров.....	39

МАТЕРИАЛЫ
XLVII МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

«Студент и научно-технический прогресс»

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН
И ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Тезисы докладов печатаются в авторской редакции

Дизайн обложки – И. И. Коптюг

Подписано в печать 10.04.08
Офсетная печать
Заказ №

Формат 60x84/16
Уч.-изд. л. 1,7
Тираж 70 экз.

Редакционно-издательский центр НГУ
630090, Новосибирск-90, ул. Пирогова, 2