

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
ПРАВИТЕЛЬСТВО НОВОСИБИРСКОЙ ОБЛАСТИ  
КОМИССИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДЕЛАМ ЮНЕСКО  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**МАТЕРИАЛЫ  
50-Й ЮБИЛЕЙНОЙ МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

**«Студент и научно-технический прогресс»**

**13–19 апреля 2012 г.**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ**

**Новосибирск  
2012**

УДК 53  
ББК 22.3

Материалы 50-й Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс»: Физические методы в естественных науках / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2012. 108 с.

ISBN 978-5-4437-0044-1

Конференция проводится при поддержке Президиума Сибирского отделения Российской Академии наук, Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-04-06805-моб\_г), Правительства Новосибирской области, Комиссии РФ по делам ЮНЕСКО, Технопарка Новосибирского Академгородка.

Конференция проведена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 - 2013 годы.

Научный руководитель секции – д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба  
Председатель секции – д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Цыбуля  
Ответственный секретарь секции – В. Н. Сырямина

**Экспертный совет подсекции «Физические методы исследования функциональных материалов и наносистем»:**

д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов, канд. хим. наук В. А. Дребушак, канд. хим. наук В. В. Каичев, д-р физ.-мат. наук, проф. Л. Н. Мазалов, канд. физ.-мат. наук С. Н. Трухан, канд. физ.-мат. наук Д. Ф. Хабибулин, д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Цыбуля, канд. физ.-мат. наук А. Н. Шмаков, Д. А. Яценко.

**Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:**

д-р хим. наук А. В. Бакланов, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер, д-р хим. наук Н. П. Грицан, канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев, канд. физ.-мат. наук Д. А. Князьков, канд. физ.-мат. наук Д. И. Колоколов, В. Н. Сырямина, А. П. Трушина, д-р физ.-мат. наук М. В. Федин,

**Экспертный совет подсекции «Биомедицинская физика»:**

канд. физ.-мат. наук Ю. И. Глазачев, д-р биол. наук, проф. А. Д. Груздев, канд. биол. наук, доцент В. А. Гусев, канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов, д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Мальцев, В. М. Некрасов, д-р биол. наук, проф. Л. В. Омелячук, канд. физ.-мат. наук А. В. Чернышев, канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин.

ISBN 978-5-4437-0044-1

© Новосибирский государственный университет, 2012

**RUSSIAN FEDERAL MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE  
SIBERIAN BRANCH OF RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES  
NOVOSIBIRSK REGION GOVERNMENT  
COMMISSION OF THE RUSSIAN FEDERATION FOR UNESCO  
NOVOSIBIRSK NATIONAL RESEARCH STATE UNIVERISTY**

**PROCEEDINGS  
OF THE 50th INTERNATIONAL STUDENTS  
SCIENTIFIC CONFERENCE**

**«STUDENTS AND PROGRESS IN SCIENCE AND TECHNOLOGY»**

**April, 13–19, 2012**

**PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES**

**Novosibirsk, Russian Federation  
2012**

Proceedings of the 50<sup>th</sup> International Students Scientific Conference «*Students and Progress in Science and Technology*». Physical methods in natural sciences / Novosibirsk State University. Novosibirsk, Russian Federation. 2012. 108 pp.

ISBN 978-5-4437-0044-1

The conference is held with the significant support of Presidium of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Russian Foundation for Basic Research (project № 12-04-06805-мо6\_r), Novosibirsk Region Government, Commission of the Russian Federation for UNESCO, Technopark of Novosibirsk Akademgorodok.

The conference is held with financial support of Russian Federal Ministry of Education and Science under the federal target program "Scientific and scientific-pedagogical personnel of innovative Russia" in 2009-2013.

Section scientific supervisor – Dr. Phys. Math., Prof. S. A. Dzuba  
Section head – Dr. Phys. Math., Prof. S. V. Tsybulya  
Responsible secretary – V. N. Syryamina

**Section scientific committee «Physical Methods of functional nanosystems and materials»:**

Dr. Phys. Math. S. A. Gromilov, Cand. Chem. V. A. Drebuschak,  
Cand. Chem. V. V. Kaichev, Cand. Phys. Math. D. F. Khabibulin, Dr. Phys.  
Math., Prof. L. N. Mazalov, Dr. Phys. Math., Prof. S. V. Tsybulya,  
Cand. Phys. Math. S. N. Trukhan, Cand. Phys. Math. A. N. Shmakovs,  
D. A. Yatsenko

**Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:**

Dr. Chem. A. V. Baklanov, Cand. Phys. Math. S. L. Weber, Dr. Chem.  
N. P. Gritsan, Cand. Phys. Math. V. G. Kiselev, Cand. Phys. Math.  
D. A. Knyazkov, Cand. Phys. Math. Science D. I. Kolokolov, V. N. Syryamina,  
Dr. Phys. Math. M. V. Fedin, A.P. Trushina

**Section scientific committee «Biomedical Physics»:**

Cand. Phys. Math. A. V. Chernyshev, Cand. Phys. Math. Yu. I. Glazachev,  
Dr. Biol., Prof. A. D. Gruzdev, Cand. Biol., Assoc. Prof. V. A. Gusev, Dr. Biol.,  
Prof. L. V. Omelyachuk, Cand. Phys. Math. A. A. Lomsev, Dr. Phys. Math.,  
Prof. V. P. Maltsev, V. M. Nekrasov, Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin,

ISBN 978-5-4437-0044-1

© Novosibirsk State University, 2012

# БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

## ПОЛЯРИЗАЦИОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ В СУХОЖИЛИИ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ

I. Gusachenko<sup>1,2</sup>, M.-C. Schanne-Klein<sup>1</sup>, Y. Houssen<sup>1</sup>, V. Tran<sup>3</sup>, J.-M. Allain<sup>3</sup>

<sup>1</sup>LOB Ecole Polytechnique, CNRS, INSERM U696, Palaiseau, France

<sup>2</sup>ЛМФКСИЦИГ СО РАН, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>LMS Ecole Polytechnique, CNRS, Palaiseau, France

Коллаген является основной составляющей внеклеточного матрикса млекопитающих и играет ключевую роль в архитектуре биологических тканей. Для этого структурного белка характерны протяженные участки в форме тройной спирали и высокоструктурированная макромолекулярная организация. Вследствие своей организации фибриллярный коллаген является эффективным источником генерации второй гармоники (ГВГ). Сухожилия, в основном, состоят из коллагена типа I, молекулы которого образуют фибриллы диаметром 200 нм, которые затем собираются в более толстые нити и пучки с характерной волнистой структурой. Данная иерархическая структура ответственна за биомеханические свойства ткани. Однако, связь между макроскопическими механическими свойствами и микроскопической структурой коллагена не до конца понятна.

В данной работе мы совместили ГВГ-микроскопию с контролируемым механическим растяжением для наблюдения за микроскопической структурой сухожилия при последовательных многократных натяжении и расслаблении [1]. Кроме того, мы оснастили микроскоп поляризационным разрешением и провели измерения отношения двух главных тензорных компонент нелинейной поляризуемости коллаген в зависимости от натяжения, так как этот параметр чувствителен к относительной молекулярной организации. Также нами предложена теоретическая модель, объясняющая зависимость оптических свойств сухожилия [2] (в том числе – тензора нелинейной поляризуемости), определяемых микроскопическим устройством ткани, от макроскопической деформации образца.

---

1. J. Biomech. 44:2047-2052 (2011)

2. Opt. Express **18**, 19339-19352 (2010)

Научные руководители – д-р биол. наук, проф. Н. Б. Рубцов,  
Ph.D, Dr. HabM.-C. Schanne-Klein

## **WETTING DYNAMICS OF LIVING DROPS**

Stéphane Douezan, Damien Cuvelier, Françoise Brochard-Wyart

Tissue spreading is a fundamental process in embryonic development, wound healing, and cancer invasion. We study the spreading dynamics of cell aggregates on solid substrates by means of an analogy with the wetting of a viscoelastic drop. At long times, a precursor film of cells spreads around the aggregate with two possible states: either a liquid state (cohesive migration) or a 2D gas state (where cells escape individually) depending on the cell-cell adhesion. These results provide insight into the progression of a non-invasive tumor into a metastatic malignant carcinoma.

Advisor signature - Françoise Brochard-Wyart

# ИССЛЕДОВАНИЕ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЛЮЦИФЕРАЗЫ С ПОМОЩЬЮ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ЗОНДА 1,8-АНС

Т. И. Авсиевич, Е. В. Немцева, М. А. Герасимова  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск  
Институт биофизики СО РАН

Для исследования сайтов связывания белков широко используют флуоресцентный зонд АНС (1-анилинонафталин-8-сульфонат), обладающий способностью при связывании с макромолекулой на порядок увеличивать квантовый выход своей флуоресценции.

В данной работе исследовали сайты связывания бактериальной люциферазы методом флуориметрического титрования зондом 1,8 — АНС. Были сняты стационарные и время-разрешенные спектры флуоресценции смеси белка с зондом при варьировании концентрации последнего.

Рост интенсивности флуоресценции зонда при стационарном возбуждении проанализировали методом Скэтчарда [1]. Было определено два типа центров связывания с константами диссоциации  $K_{d1}=1.0\pm 0.2 \mu\text{M}$  и  $K_{d2}=5.7\pm 0.3 \mu\text{M}$  соответственно. Кинетика флуоресценции при импульсном возбуждении была проанализирована с помощью глобального анализа [2]. Было установлено наличие 2-х типов флуорофоров с коротким ( $\tau_1=7.6 \text{ ns}$ ) и длинным ( $\tau_2=17.7 \text{ ns}$ ) временем жизни, которые могут соответствовать зонду, связанному с внешними и внутренними сайтами белка [3]. С учетом этого факта стационарная кривая титрования была разложена на две кривые, соответствующие двум типам сайтов связывания. Нелинейный анализ каждой из них позволил заключить, что на поверхности белка взаимодействие зонда с люциферазой характеризуется  $K_{d1}=24.9\pm 15.9 \text{ mM}$ , внутри белка –  $K_{d2}=4.3\pm 0.8 \text{ mM}$ .

Таким образом, сопоставление результатов показало, что стационарная флуоресценция указывает на неоднородный характер связывания зонда, однако этих данных не достаточно для того, чтобы охарактеризовать разные типы флуорофоров. Для уточнения характеристик сайтов связывания необходимы хроноскопические эксперименты.

- 
1. Bordbar, A. C., Saboury, A. A., Moosavi-Movahedi, A. A. (1996) *Biochem Education* 24(3), 172.
  2. Gasymov, O. K., Abduragimov, A. R., Glasgow, B. J. (2007), *Arch. Biochem. Biophys.* 468, 15.
  3. van Stokkum, I. H. M., Larsen, D. S. and van Grondelle, R. (2004) *Biochim. Biophys. Acta.* 1657(2-3), 82.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Е. В. Немцева

# ВЛИЯНИЕ ПИЩЕВЫХ КОНСЕРВАНТОВ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ СВЕЧЕНИЯ БИФЕРМЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СВЕТЯЩИХСЯ БАКТЕРИЙ

А. А. Асанова

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

В настоящее время технология стабилизации и хранения продуктов питания особенно важна, так как современный человек практически лишен возможности потребления неконсервированных продуктов. При выборе консервантов основным критерием наряду с эффективностью является их безопасность. Однако механизм воздействия консервантов на организм человека на молекулярном уровне остается неизученным. В настоящее время для анализа токсичности различных смесей в качестве биотеста используется биферментная система светящихся бактерий NADH:FMN-оксидоредуктаза-люцифераза. Цель работы состояла в исследовании влияния пищевых консервантов на интенсивность свечения биферментной системы светящихся бактерий.

В работе изучено действие на активность биферментной системы следующих консервантов: бензоата натрия (Е 211), сорбата калия (Е 202) и сорбиновой кислоты (Е 200). Диапазон концентраций исследуемых веществ составлял от 0,1 мг/л до 10 г/л. В работе использовали лиофилизированный препарат высокоочищенных ферментов, содержащий люциферазу из рекомбинантного штамма *Escherichia coli* и NADH:FMN-оксидоредуктазу из *Vibrio fischeri*. Реакцию биотеста определяли по величине остаточного свечения  $(I_o/I_k) \cdot 100\%$ , где  $I_k$  и  $I_o$  – интенсивность свечения биферментной системы в присутствии дистиллированной воды (контроль) и исследуемого вещества соответственно. Эффективность воздействия консервирующих добавок на биолюминесцентную систему оценивали по параметру  $EC_{50}$ , который равен концентрации действующего вещества при ингибировании биолюминесценции на 50 %.

Согласно принятым в Российской Федерации санитарно-эпидемиологическим правилам и нормативам, максимальный уровень содержания в продуктах бензойной и сорбиновой кислот, а также их солей, не должен превышать 1 г/л. В работе показано, что  $EC_{50}$  для бензоата натрия, сорбата калия и сорбиновой кислоты составляет 25, 12 и 2 мг/л соответственно. Таким образом, изученные консерванты оказывают негативный биологический эффект при концентрациях существенно меньших уровня их предельно допустимого содержания в продуктах.

Научные руководители – канд. биол. наук Е. Н. Есимбекова,  
канд. мед. наук А. М. Васильевский



# ГИБРИДЫ 5'-МОНОПИРЕНИЛЬНЫХ КОНЬЮГАТОВ ОЛИГОНУКЛЕОТИДОВ С ОДНОСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

А. А. Батурина

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Гибриды олигонуклеотидов с углеродными нанотрубками (УНТ) являются перспективными инструментами для решения таких задач бионанотехнологии как создание биосенсоров, систем доставки терапевтических агентов и других наноконструкций.

Целью данной работы является получение и исследование свойств гибридов 5'-монопиренильных производных олигонуклеотидов с одностенными УНТ. Одностенные УНТ предварительно окисляли азотной кислотой [1]. Полученные карбоксисодержащие УНТ хорошо растворимы в воде. Исходя из данных, полученных методом КР-спектроскопии для окисленных УНТ, вычислен их радиус, который составил 1.4 нм. Для иммобилизации олигонуклеотидов на поверхности УНТ в их состав вводили в качестве якорной группы остаток пирена, способный взаимодействовать с поверхностью за счет стэкинг-взаимодействий [2]. Нековалентные гибриды УНТ с 5'-пиренсодержащими олигорибо- и олигодезоксирибонуклеотидами различной длины (от 10 до 25 нуклеотидов) получали путем ультразвуковой обработки УНТ в растворе соответствующего 5'-пиренсодержащими олигонуклеотида.

Изучены спектральные, микроскопические и биофизические характеристики гибридов одностенных УНТ с 5'-пиренильными конъюгатами олигонуклеотидов.

Полученные результаты в дальнейшем планируется использовать при создании бионанотранспортеров функциональных нуклеиновых кислот в клетки.

Работа поддержана грантом ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” (ГК №П1334).

---

1. Gromov A., Dittmer S., Svensson J. et al. J. Mat. Chem. 2005. V.15. P.3334-3339.

2. Апарцин Е.К., Новопашина Д.С., Настаушев Ю.В., Веньямина А.Г. Российские нанотехнологии. 2012. Т.7. N.3-4. (в печати)

Научный руководитель – канд. хим. наук Д. С. Новопашина

## **ВЛИЯНИЕ ГЛИЦЕРИНА НА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ БИФЕРМЕНТНОЙ БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ СИСТЕМЫ**

Е. М. Букина, И. Е. Суковатая

Институт фундаментальной биологии и биотехнологий  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Бактериальная биолюминесценция привлекает внимание исследователей как уникальный феномен трансформации химической энергии в энергию световую, так и практическим значением, т.к. высокая чувствительность методов биолюминесцентного анализа на основе бактериальных люцифераз, высокий квантовый выход и простота регистрации ферментативной активности, обусловили возможность широкого ее использования в биохимии, медицине, биотехнологии и при мониторинге окружающей среды. Для понимания механизмов функционирования ферментативной люминесцентной системы светящихся бактерий в условиях близких к *in vivo* полезно изучение термостабильности системы посредством «дизайна среды» с использованием вязких водно-органических растворов. Для изучения влияния вязкости реакционной среды на термостабильность ферментов сопряженной биолюминесцентной системы NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза-люцифераза ферменты инкубировали от 5 до 60 минут в средах с различными значениями вязкости, которую моделировали добавлением глицерина. Полученные результаты показали, что увеличение вязкости инкубационной среды приводит не только к увеличению температурного оптимума на 5<sup>0</sup>С, но и к увеличению значения максимальной интенсивности свечения по отношению к контролю при инкубировании ферментов в 50%-ом глицерине в течение 10 минут при температуре 35<sup>0</sup>С. Получена линейная зависимость выхода люминесценции с увеличением времени инкубации ферментов при этих же условиях. Константа спада биолюминесценции, характеризующая время жизни долгоживущего интермедиата реакции, уменьшается при увеличении времени инкубации ферментов, что позволяет сделать вывод о возможном увеличении времени жизни долгоживущего интермедиата реакций сопряженной системы.

Работа подготовлена по мега-проекту «Биолюминесцентные биотехнологии» (договор № 11.G34.31.0058) в рамках Постановления Правительства РФ № 220 от 9 апреля 2010 г. «О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования».

Научный руководитель – канд. биол. наук И. Е. Суковатая

# СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА СУБСТРАТОВ БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ РЕАКЦИИ БАКТЕРИЙ В ВЯЗКИХ СРЕДАХ

Д. В. Гульнов

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск  
Институт биофизики СО РАН

Вязкие среды можно рассматривать как простейшие модели внутриклеточной среды для ферментов. Для выявления особенностей функционирования ферментов в цитоплазме ранее были исследованы характеристики биоломинесцентной реакции бактерий в вязких средах [1]. Было установлено, что в присутствии глицерина и сахарозы снижается интенсивность биоломинесценции *in vitro*. Одним из возможных механизмов данного явления может быть ослабление фермент-субстратного взаимодействия по причине изменения конформации субстратов и/или белков.

В работе исследовано влияние вязких сред с глицерином и сахарозой на основные субстраты биоломинесцентной реакции бактерий – флавиномононуклеотид (ФМН) и никотинамидадениндинуклеотид восстановленный (НАДН). Для оценки воздействия среды на конформацию ФМН и НАДН использовали методы флуоресцентной спектроскопии. Были исследованы спектры поглощения, испускания и возбуждения флуоресценции и анизотропия флуоресценции ФМН и НАДН. Так же были измерены времена жизни возбужденного состояния и рассчитаны гидродинамические объемы флуорофоров.

Для исследованных нуклеотидов было обнаружено увеличение времени жизни возбужденного состояния и интенсивности флуоресценции. Для НАДН был зарегистрирован сдвиг максимума флуоресценции на ~20 нм. Было установлено, что увеличение значения анизотропии не может быть объяснено только более высокой вязкостью и изменением времени жизни флуоресценции. Расчет вращательных объемов нуклеотидов в вязких растворах показал наличие их изменения, что может являться причиной стерического затруднения при связывании субстратов с ферментами.

---

1. Sukovataya I. E., Kaykova E. V., Buka N. S., Zadorozhnaya L. V. Kinetics of bacterial coupled enzymatic system NAD(P)H:FMN-oxidoreductase-luciferase catalysis in solvents of increased viscosity. *Luminescence* 2008; **V.23**, N 2; 93.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук, доцент Е. В. Немцева,  
д-р биол. наук, проф. В. А. Кратасюк

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОЗОНА В БИОТЕХНОЛОГИИ

Е. А. Денисенко

Кубанский государственный аграрный университет, г. Краснодар

В настоящее время одним из направлений использования вторичного сырья в пищевой и перерабатывающей промышленности является производство кормов для скота и птицы. При этом достигается значительная экономия первичного сырья за счет использования вторичного, в том числе пшеницы, фуражного зерна, кормовой свеклы и др. Помимо получения ценных кормов биологического происхождения переработка вторичного сырья имеет ещё и экологический аспект, поскольку снижается антропогенная нагрузка на окружающую среду за счет уменьшения массы сбросов предприятий.

Переработка непищевых отходов предполагает получение биологически ценного, безопасного и стойкого при хранении корма. Для достижения этой цели отходы подвергают в основном термообработке, в ходе которой происходит микробиологическое обезвреживание и обезвоживание сырья. Приоритет же должен отдаваться технологиям, позволяющим максимально сохранять биологическую ценность отходов.

Наиболее распространена многочасовая термообработка при повышенном давлении в аппаратах периодического действия, в частности, в вакуумных котлах (котлах-утилизаторах Лапса).

К недостаткам традиционных технологий следует отнести следующие:

1. В результате многочасовой термообработки протеины, а точнее их белковая часть, подвергается глубоким изменениям, что значительно снижает их кормовую ценность;
2. Длительность переработки (несколько часов);
3. Энергоемкость: для работы установок помимо электроэнергии необходимы пар и горячая вода;
4. Экологическая небезупречность: термообработка сопровождается, как правило, жутким и вредным запахом.

Для того, чтобы избавиться от всех этих недостатков традиционной технологии обработки кормов, нами было решено заменить процесс термообработки на озоноздушную обработку. В результате обработки происходит микробиологическое обеззараживание сырья, сохраняются все полезные свойства корма и после обработки сырье не имеет посторонних запахов. Были произведены лабораторные исследования по влиянию озона на различные субстраты. В настоящее время совместно с фирмой «Биокомплекс» проводятся промышленные испытания лабораторного образца озонатора и разрабатывается промышленный образец озонатора, с целью его серийного производства.

## ДЕЗИНФЕКЦИЯ БИОСУБСТРАТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОЗОНА

Е. А. Денисенко, А. А. Шевченко, К. А. Очкась  
Кубанский государственный аграрный университет, г. Краснодар

В настоящее время увеличивается процент использования биопрепаратов при выращивании сельскохозяйственного поголовья. Биологически активные вещества способствуют снижению заболеваний животных, укреплению иммунитета и активизации пищеварительных процессов, что приводит к ускорению наращивания живой массы.

Сырьем для производства биопрепаратов являются субстраты (лузга семян подсолнечника, шрот, комбикорм и др.), которые являются отходами перерабатывающей промышленности и поступают на биофабрики от сельхозтоваропроизводителей.

На перерабатывающих предприятиях не уделяется надлежащего внимания хранению субстратов, поэтому на них начинает развиваться патогенная микрофлора. Поэтому перед высевом полезной микрофлоры необходимо проводить дезинфекцию субстратов, что позволяет снизить влияние патогенов на полезные бактерии наносимые на субстраты.

В настоящее время традиционной обработкой субстратов является термическая обработка, но она имеет ряд недостатков (многочасовая обработка, высокая энергоемкость, загрязнение окружающей среды, образование жиродержащих сточных вод).

Для того, чтобы уменьшить количество различных плесневых грибов и микроорганизмов в субстратах нами предлагается использовать озоноздушную обработку. Для этого в лаборатории КубГАУ совместно с кафедрой «Биохимии, биофизики и биотехнологии» был поставлен ряд экспериментов по выявлению влияния озоноздушной смеси на зараженность субстрата лузги семян подсолнечника плесневыми грибами и микроорганизмами. Среднестатистические данные эксперимента приведены в таблице 1:

Таблица 1 — Результаты обработки озонем субстрата лузги семян подсолнечника

вариант	бактериальное загрязнение кл/г	плесневое загрязнение кл/г
контрольный образец	$5 \times 10^3$	$5 \times 10^3$
обработанный образец	$2 \times 10^2$	нет

Исходя из вышесказанного и данных эксперимента, можно сделать вывод, что дезинфекция субстратов с помощью озона является актуальным способом дезинфекции субстратов.

# **РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ СКАНИРУЮЩЕГО УСТРОЙСТВА ПРОТОННО-ИОННОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ТЕРАПИИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ**

М. А. Ефремов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Актуальность развития технологий протонно-ионной ядерной медицины в настоящее время в России обусловлена острой нехваткой современных протонно-ионных комплексов для терапии онкологических заболеваний. Существующие в России протонно-ионные комплексы имеют пропускную способность 200 – 400 пациентов в год при потребности около 20 тысяч пациентов в год.

Целью данной работы является расчет и оптимизация параметров сканирующего устройства протонно-ионного комплекса для облучения поверхности  $20 \times 20$  мм<sup>2</sup> пучками протонов (80 – 250 МэВ) и ионов углерода (140 – 400 МэВ/нуклон) с однородностью дозного поля внутри целевого объема 2%. В число этих параметров входят: частоты работы магнитов для различных сценариев облучения, характерные величины поля, материал и геометрия магнитов; потребляемая устройством мощность. Также одной из целей работы является подбор точности источников питания магнитов для достижения необходимой однородности дозного поля.

Для решения данной задачи были получены зависимости линейных потерь энергии пучка и его ширины от глубины проникновения в воду для различных энергий пучка. На их основе и на основе характеристик пучка на выходе из ускорителя рассчитаны поля сканирующих магнитов и частоты их работы, подобраны материалы магнитов и оптимальная геометрия сканирующей системы, сформулировано требование к точности источника питания устройства.

---

1) W. Schlegel, T. Bortfeld, A.-L. Grosu (Eds), *New Technologies in Radiation Oncology*, 2006

Научный руководитель – В. А. Востриков

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСЧЕТА ДОЗНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЭНЕРГИЕЙ 1,25 МэВ**

И. А. Капутская

Амурский государственный университет, г. Благовещенск

В ряду наиболее важных проблем медицинской физики задача описания дозного распределения в теле пациента представляется весьма актуальной. В настоящее время главную роль в теоретическом описании играет алгоритм Кларксона и алгоритм свертки.

Существующие алгоритмы расчета дозного распределения являются приближенными, т.к. учитывают не все факторы, влияющие на дозное распределение. Необходимо выяснить какую точность имеет каждый из алгоритмов, а также составить модель, более точно описывающую реальное распределение гамма-излучения в облучаемом объеме. Для решения поставленных задач необходимо провести теоретический расчет дозного распределения существующими алгоритмами и сравнить их с данными, полученными экспериментально. Помимо прочего, необходимо выявить, какие факторы оказывают влияние на дозное распределение. Объединив данные, полученные экспериментально, усовершенствовать существующие модели путем учета факторов, не учтенных в алгоритмах.

В работе рассматривается методика расчета дозного поля алгоритмом Кларксона. К настоящему моменту выявлены недостатки этой модели, определены факторы, необходимые для дополнения существующей модели. Выявлена зависимость глубины максимальной ионизации от от размеров облучающего поля, не характерная для данного вида излучения. Проведена проверка полученных данных, выявлены причины возникновения данной зависимости.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент И. Б. Копылова

# ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕМОДИНАМИКИ МОЗГА ЧЕЛОВЕКА МЕТОДАМИ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ МРТ

Э. С. Карамамед-Оглы

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Функциональная магнитно-резонансная томография становится все более востребованным методом картирования зон активации головного мозга. Контрастирование в фМРТ достигается за счет разницы в насыщенности крови кислородом, т. е. на различии магнитной восприимчивости оксигемоглобина (диамагнетик) и дезоксигемоглобина (парамагнетик). Целью проводимого исследования является определение нарушения гемодинамики мозга человека, что, в конечном счете, даст возможность оценивать риск инсульта.

Кратко методику можно представить следующим образом: находясь в томографе, пациент выполняет действия, вызывающие мозговую активность. В данной работе изучалась реакция зрительной коры на вспышки света и активация моторной коры при движении кистей рук. Выполнение задания сопровождалось регистрацией 3D-томограмм методом EPI со временем эха 50 мсек, временным разрешением 3.5 сек и пространственным разрешением 4x4x4 мм. Полученные динамические трехмерные кадры подвергались математической обработке, включающей следующие этапы:

- устранение последствий произвольных движений путем взаимного согласования кадров,
- сегментация тканей мозга с выделением серого, белого вещества и спинномозговой жидкости,
- приведение изображений к стандартной анатомической форме,
- сглаживание изображений для повышения отношения сигнал/шум.

Полученные данные подвергаются статистическому анализу с целью выявления корреляции сигнала со схемой возбуждения. Активированный участок головного мозга окрашивают в соответствии с достоверностью наличия возбуждения, и этот цветной участок наносится на томограмму, выполненную с высоким разрешением. На основе полученных трехмерных изображений возможна объемная реконструкция, позволяющая оценить топографию и размеры активированного участка головного мозга.

В результате обработки получена гемодинамическая функция и картирование зон активности головного мозга.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. А. Савелов



# КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ БАКТЕРИАЛЬНОЙ БИФЕРМЕНТНОЙ БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ СИСТЕМЫ В ВЯЗКИХ СРЕДАХ

М. А. Кириллова, И. Е. Суковатая  
Институт фундаментальной биологии и биотехнологий  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Одной из фундаментальных проблем современной биофизики и биохимии является структурно-динамическая организация белков. Одним из перспективных подходов для направленного изменения свойств и структуры ферментов является моделирование реакционной среды, которое предполагает многообразие методов в использовании неводных реакционных сред. Данный подход получил широкое практическое применение в биотехнологии и медицине. Для понимания процессов поведения биферментативной люминесцентной системы светящихся бактерий в условиях близких к *in vivo* было изучено функционирование биферментной системы *NADH:FMN*-оксидоредуктаза-люцифераза в условиях различной вязкости реакционной среды. В работе определены кинетические параметры сопряженной биферментной системы *NAD(P)H:FMN*-оксидоредуктаза-люцифераза в условиях вязкой реакционной среды: интенсивность свечения, характеризующая скорость реакции; константа спада люминесценции, которая характеризует скорость распада долгоживущего интермедиата; квантовый выход биолюминесценции; константа Михаэлиса и др.; изучена природа взаимодействия альдегидного субстрата. Методами формально-кинетического анализа определен тип ингибирования глицерином биферментной системы светящихся бактерий по отношению к алифатическому альдегиду как неполностью бесконкурентный, который позволяет предположить, что сайт связывания глицерина на люциферазе отличен от активного центра фермента, причем комплекс остается частично активным. Увеличение вязкости реакционной среды при использовании глицерина приводит к увеличению кажущейся константы Михаэлиса, что свидетельствует о том, что связывание участников реакции определяется преимущественно гидрофобными взаимодействиями. Моделирование вязкости реакционной среды глицерином позволило подобрать оптимальные условия функционирования биферментной системы. Показано, что интенсивность свечения, сродство альдегида к люциферазе, а также время жизни долгоживущего интермедиата реакции максимальны в 30%-ом глицерине.

Работа подготовлена по мега-проекту «Биолюминесцентные биотехнологии» (договор № 11.G34.31.0058)

Научный руководитель — канд. биол. наук И. Е. Суковатая

## **ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ИЗМЕНЕНИЙ ЯДЕР ЛИМФОЦИТОВ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА И КЛЕТОК HepG2 НА НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЯХ АПОПТОЗА**

Н. Ю. Малых, Д. И. Строкотов, Д. Ю. Орлова  
Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет  
Институт биофизики чешской академии наук

В работе предложен метод исследования кинетики морфологических изменений клеточного ядра на ранних стадиях апоптоза с помощью сканирующего проточного цитометра (СПЦ). Для создания кинетической модели апоптоза кинетика морфологических изменений ядра одиночной клетки HepG2 была измерена на лазерном сканирующем конфокальном микроскопе (ЛСКМ).

При анализе лимфоцитов с помощью СПЦ в качестве индуктора апоптоза использовался IgM–CD95. Из индикатрис светорассеяния клеток были получены распределения лимфоцитов по диаметру, соотношению между ядром и диаметром клетки, показателям преломления ядра и цитоплазмы. Измерения производились до индукции апоптоза и после через каждые 30 минут в течение трех часов.

Измерения культуры опухолевых клеток печени человека HepG2H4-Dendra2 производились с помощью ЛСКМ Leica TCS SP5X. В качестве индуктора апоптоза использовали Etoposide. Производилось 3D сканирование одних и тех же клеток каждые 10 минут в течение трех — пяти часов после индукции апоптоза.

После измерений на ЛСКМ было отмечено уменьшение объема ядер клеток во время апоптоза. Также, с помощью СПЦ была измерена кинетика уменьшения объема ядер лимфоцитов. Для клеток HepG2 была построена модель, учитывающая изменение объема ядра клеток вследствие изменения осмотической активности при агрегации хроматина. Для обработки экспериментальных данных было применено решение уравнения Смолуховского в замкнутом объеме. Из анализа кинетических данных были определены такие параметры, как характерное время лаг-фазы, характерное время изменения объема клеточного ядра, разность объема ядра клетки до и после апоптоза. Для экспериментальных данных с СПЦ также была определена доля ушедших в апоптоз клеток и изменение объема ядра во время апоптоза. С помощью данного подхода появляется возможность характеризовать процесс апоптоза на ранних стадиях без использования флуоресцентных меток с помощью СПЦ.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Д. Ю. Орлова

# **ИЗМЕРЕНИЕ ОБЪЕМА И ФОРМЫ ТРОМБОЦИТОВ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕГО ПРОТОЧНОГО ЦИТОМЕТРА**

А. Е. Москаленский

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Тромбоциты играют важнейшую роль в системе гемостаза. При повреждении сосудов они активируются и агрегируют друг с другом, образуя тромб. Нарушения функций тромбоцитов могут привести к кровотечениям или тромбозам. Таким образом, для диагностики важны методы оценки состояния тромбоцитов. Для этого используются различные физические подходы, такие как измерение электрического сопротивления (метод Култера) или светорассеяния и флуоресценции (проточные цитометры) отдельных клеток. Однако до сих пор не существует точного и статистически надежного метода измерения морфологических характеристик тромбоцитов, хотя именно форма является важным показателем их активности. В частности, при активации тромбоциты изменяют свою форму с дисковидной на более сферическую.

В данной работе представлен новый метод определения морфологии тромбоцитов, включая объем и форму, с использованием сканирующего проточного цитометра. Метод основан на измерении индикатрисы светорассеяния отдельными клетками и решении обратной задачи светорассеяния, а именно на подгонке экспериментальных сигналов теоретическими. При расчете теоретических сигналов тромбоциты моделируются сплюснутыми сфероидами. Для ускорения подгонки была насчитана база данных из 500.000 теоретических сигналов. Также был разработан метод контроля точности решения обратной задачи.

Представленный метод был протестирован на образцах крови здоровых доноров. Полученные результаты для объема и формы тромбоцитов находятся в хорошем согласии с литературными данными. Показано, что форма активированных и неактивированных тромбоцитов существенно различается. Это может быть использовано для обнаружения активированных тромбоцитов в крови без использования флуоресцентных меток которые усложняют проведение существующих тестов на наличие активированных тромбоцитов. Другим достоинством предложенного метода является возможность прямого отделения агрегатов тромбоцитов от одиночных клеток. Это дает возможность детального исследования ранней стадии агрегации тромбоцитов.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Мальцев

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АГРЕГАЦИЮ ЭРИТРОЦИТОВ

А. Ф. Мунзарова

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Особое значение для реологического состояния крови имеют агрегационные свойства эритроцитов, то есть их способность слипаться друг с другом. Прилипание друг к другу эритроцитов затрудняет перфузию крови через микрососуды. Появление в крови большого количества агрегатов различной формы и величины существенным образом отражается на состоянии микроциркуляции и, следовательно, на функционировании всех органов и систем.

Исследования внутрисосудистой агрегации эритроцитов как формы патологии начались с работ М. Knisely, который наблюдал в сосудах прерывистый кровоток с образованием эритроцитарных агрегатов. Такое явление было названо «заиливание крови» — *blood sludge*.

Значение агрегации эритроцитов особенно возрастает в условиях патологии, поскольку при этом изменяются степень агрегации, размеры и морфология образующихся агрегатов. Повышенная степень агрегации ведет к ухудшению оксигенации тканей, способствует развитию ишемии и тромбоза, приводит к нарушению микроциркуляции органов и тканей.

В работе рассматриваются результаты экспозиции образцов крови и модельной коллоидной системы терагерцовым излучением новосибирского лазера на свободных электронах (ЛСЭ).

Установлено, что экспозиция образцов снижает степень агрегации эритроцитов и модельных коллоидных частиц.

Возможной причиной дезагрегации является возникновение ультразвуковых колебаний в среде, созданных ЛСЭ.

Научный руководитель – канд. хим. наук А. С. Козлов

## ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ФОН ПРОМЫШЛЕННОЙ ЧАСТОТЫ В ГОРОДЕ ТОМСКЕ

Д. А. Недосеков

Томский государственный университет

Электромагнитная (ЭМ) экология [1] занимается вопросами формирования ЭМ-полей различных частотных диапазонов и их воздействием на окружающую среду и человека. На территории крупных городов и индустриальных центров в диапазоне частот до 1 кГц доминирующими по напряженности являются техногенные поля промышленной частоты (ПЧ) 50 Гц и ее гармоник. Напряженность таких полей во много раз превышает уровень естественных (природных) полей.

Построенные с помощью мобильного комплекса карты ЭМ-загрязнения [2] показали, что максимальный уровень ЭМ-фона ПЧ наблюдается рядом с линиями высоковольтных передач и в ряде случаев превышает допустимые нормы СанПиНа для территорий жилых зон. В тоже время, согласно данным из регистра ОИМ НИИ кардиологии ТНЦ СО РАМН было установлено, что люди, проживающие в Томске вблизи ЛЭП, в большей степени подвержены заболеваемости по мере роста напряженности ЭМ-поля ПЧ [3]. Полученные авторами результаты демонстрируют роль ЭМ-полей ПЧ как фактора риска развития социально значимых заболеваний населения.

В работе исследовалось изменение в Томске магнитных компонент поля ПЧ в зависимости от времени суток в стационарных условиях для различных сезонов года. Для измерений в режиме непрерывного круглосуточного мониторинга использовался трехкомпонентный магнитометр Lemі-30 с системой сбора и передачи данных. Проведен анализ суточных вариаций компонент ЭМ-поля ПЧ с учетом сезона года.

---

1. Колесник А.Г. Электромагнитная экология: учеб. пособие / А.Г. Колесник, С.А Колесник, С.В. Побаченко. – Томск: Изд-во ТМЛ-Пресс, 2009. – 336 с.

2. Электромагнитный фон городских территорий диапазона промышленных частот / А.Г. Колесник [и др.] // Вестник ТГУ. – 2007. – № 297. – С. 161-164.

3. Бородин А.С. Риск развития инфаркта миокарда на участках территорий с различными уровнями электромагнитных полей / А.С.Бородин, М.В. Гудина, Л.П. Волкотруб // Казанский медицинский журнал. – 2009. – том 90. – № 4. – С. 481-484.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. А. Колмаков

# ИССЛЕДОВАНИЕ СУСПЕНЗИИ ЗАМОРОЖЕННЫХ ДРОЖЖЕВЫХ КЛЕТОК В ФИЗИОЛОГИЧЕСКОМ РАСТВОРЕ МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

К. А. Окотруб

Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Одна из основных проблем криобиологии заключается в исследовании процессов, приводящих к гибели клеток при замораживании. Раствор, в котором замораживаются клетки, играет важную роль в этих процессах и часто содержит NaCl для выравнивания осмотического давления. Данная работа посвящена исследованию пространственного распределения гидрогалита ( $\text{NaCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) в суспензии дрожжевых клеток *Saccharomyces cerevisiae* в физиологическом растворе методом комбинационного рассеяния света (КРС) с использованием конфокальной микроскопной приставки.

Эксперименты проводились с двумя различными скоростями охлаждения:  $\sim 1$  С/мин и  $15 \div 20$  С/мин. Спектр КРС позволяет идентифицировать фазовое состояние вещества в рассматриваемой области и, в частности, появление гидрогалита из концентрированного раствора NaCl при  $-40$  С. При охлаждении на скоростях  $15 \div 20$  С/мин, гидрогалит образуется по всему образцу однородно. Для скорости охлаждения  $\sim 1$  С/мин было показано, что гидрогалит преимущественно образуется вокруг клеток. Согласно полученным спектрам КРС толщина эвтектически замороженного слоя может сильно варьироваться от клетки к клетке.

Таким образом, метод КРС является удобной техникой для исследования распределения гидрогалита вокруг клеток при эвтектическом замерзании растворов, содержащих NaCl.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. В. Суровцев

# **ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОВ ФОРМИРОВАНИЯ ДОЗНОГО ПОЛЯ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ БИО-КУЛЬТУР РАЗЛИЧНЫМИ ИСТОЧНИКАМИ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

Е. А. Осипов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Радиотерапия – наиболее широко применимый и эффективный метод лечения онкологических заболеваний. При составлении плана лечения, необходимо учитывать биологический эффект различных типов ионизирующего излучения. Поиск подходов для предсказания радиочувствительности опухолей к разным типам излучения является важной и актуальной задачей. Однако никаких четких алгоритмов до сих пор не разработано.

Основной мишенью радиотерапии является ДНК. Имеют место прямые повреждения – непосредственное разрушение ДНК под действием излучения и косвенные повреждения – результат действия на ДНК активных метаболитов, возникающих в клетках при их облучении. Эффективность терапии зависит от статуса систем репарации ДНК и механизмов их регуляции в раковых клетках. В ИХБФМ отработан уникальный способ поиска и идентификации белков, взаимодействующих с ДНК-интермедиатами репарации, который основан на сочетании метода аффинной модификации и масс-спектрометрии.

Для исследования биологического эффекта разных типов ионизирующего излучения, необходимо разработать соответствующие методы облучения био-культур. В данной работе рассчитаны дозы выделяемые в эквиваленте биологической ткани и в воздухе, при облучении различными источниками ионизирующего излучения. На этой основе разработаны методы облучения био-культур в атмосфере с помощью радиоактивных изотопов, позволяющие выделить в слое в несколько микрон определенную дозу в диапазоне 1-100 Гр.

---

1. Черняев – Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом, ФИЗМАТЛИТ, 2004

2. David K. Wood, David M. Weingeist, Sangeet N. Bhatia and Bevin P. Engelward — Single cell trapping and DNA damage analysis using microwell arrays, PNAS, 2010

Научный руководитель – В. А. Востриков

## АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ТЕРМОРАЗЯЖЕННОГО ФОТОПРОТЕИНА ОБЕЛИНА

А. С. Петрова, Р. Р. Алиева  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Исследование спектральных характеристик флуоресцентных белков является актуальной задачей, так как флуоресцентные белки перспективны для использования в качестве флуоресцентных меток в биологических и медицинских исследованиях.

Обелин является  $\text{Ca}^{2+}$ -регулируемым фотопротеином. При связывании ионов кальция с белком происходит биолюминесцентная реакция, продуктом которой является  $\text{Ca}^{2+}$ -разряженный фотопротеин – комплекс апопротеина с целентерамидом. Также существует  $\text{Ca}^{2+}$ -независимая биолюминесценция, результатом которой является образование разряженного фотопротеина в отсутствие ионов кальция под воздействием различных физико-химических факторов, например температуры. Разряженные фотопротеины, в отличие от исходных фотопротеинов, являются флуоресцентными белками.

Спектры биолюминесценции обелина, а также спектры фотолюминесценции разряженного обелина включают несколько компонентов (эмиттеров), соответствующих различным формам целентерамида. Соотношение вкладов компонентов в общий спектр испускания определяет цвет люминесценции. Вклады могут изменяться под действием различных физических и химических факторов

Данная работа посвящена исследованию зависимости спектрального состава фотолюминесценции терморазряженного фотопротеина обелина от времени инкубирования при температуре  $40^\circ\text{C}$  в отсутствие ионов  $\text{Ca}^{2+}$  и при варьировании длины волн возбуждения и регистрации.

Выявлено, что спектры испускания терморазряженного обелина зависят от длины волны возбуждения, а спектры возбуждения не зависят от длины волны регистрации. Увеличение времени инкубирования приводит к росту коротковолнового плеча в спектре испускания.

Проведено разложение спектров испускания и возбуждения на компоненты, рассчитаны их вклады в общий спектр. Проведено соотнесение компонентов спектра испускания флуоресцентным формам целентерамида, различающихся кислотностью в возбужденном состоянии.

Сравнительный анализ спектров  $\text{Ca}^{2+}$ - и терморазряженного обелина показал, что спектральные характеристики разряженного обелина зависят от условий проведения биолюминесцентной реакции (наличие и концентрация  $\text{Ca}^{2+}$ , температура и время инкубирования).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Н. В. Белогурова



# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИИ ГЕМОДИНАМИЧЕСКОГО ОТКЛИКА МОЗГА ЧЕЛОВЕКА

Е. Д. Петровский

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящее время большое внимание уделяется исследованиям работы головного мозга человека. Одним из наиболее эффективных методов является функциональная магнитно-резонансная томография .

Идея метода заключается в регистрации слабого изменения интенсивности изображения томограммы вследствие изменения параметров кровотока в зонах активности нервных клеток. Функция, описывающая такие изменения и наблюдаемый сигнал, называется функцией гемодинамического отклика (ФГО). В результате становится возможным наблюдение зон активации головного мозга в ходе выполнения различных задач (моторика, речь, обработка визуальной информации, и т.п.). Таким образом выполняется картирование зон мозга.

Современные методы позволяют измерять зависимость сигнала от времени в зоне активации с относительно высокой точностью, что дает возможность извлечения из экспериментальных данных информации не только о задействованных отделах мозга, но и о параметрах ФГО. Для последнего необходима модель, описывающая ФГО в терминах некоторых параметров.

Общепринятой в настоящее время считается так называемая Balloon-модель[1], основанная на ряде физических и физиологических рассуждений, подтвержденная также измерениями кровотока методами, отличными от магнитно-резонансной томографии.

Модель связывает вид ФГО с семью параметрами, которые, следовательно, можно получить из экспериментальных зависимостей методами оптимизации.

В ходе данной работы выполняется исследование модели на эффективность такой оптимизации, точности определения параметров, и влияния шума в эксперименте на получаемый результат.

Дополнительно ведётся исследование возможности упрощения модели без потери физического и биологического смысла.

---

1. R. B. Buxton, E. C. Wong, L. R. Frank, Dynamics of Blood Flow and Oxygenation Changes During Brain Activation: The Balloon Model, Magn. Res. In Med. 855, 39(1998)

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. А. Савелов

# ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИГЕН-АНТИТЕЛО ОПОСРЕДОВАННОЙ АГГЛЮТИНАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ МИКРОСФЕР ТУРБИДИМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

А. А. Польщичин, В. М. Некрасов  
ЗАО «Вектор-Бест»

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Турбидиметрический метод количественного определения специфических белков в биологических жидкостях человека пользуется широкой популярностью в клинических лабораториях вследствие его относительной дешевизны, простоты и доступности. Однако этот метод имеет ряд ограничений точности получаемых результатов из-за отсутствия детального понимания процессов, происходящих при иммуоагглютинации, что вызвано сложностью теоретического расчета сигнала оптической плотности и математической модели кинетики процесса биоспецифической агглютинации.

Данная работа посвящена построению модели, детально описывающей процесс агглютинации полимерных микросфер с учетом дискретного количества посадочных мест, а также характеристики светорассеивающих свойств формирующихся агрегатов.

На стандартном спектрофотометре проведена серия экспериментов по определению зависимостей оптической плотности от времени растворов агглютинирующих 65 нм микросфер, покрытых антителами IgG, при добавлении С-реактивного белка. Доказана несостоятельность гипотезы о подобии кинетических кривых для различных концентраций антигена.

Сечения экстинкции агрегатов, состоящих из различного количества мономеров, рассчитывали методом Т-матриц. На основании полученных данных и моделирования кинетики агглютинации методом Монте-Карло рассчитывали зависимости оптической плотности от времени для исследуемого набора. Используя глобальную оптимизацию при обработке теоретических и экспериментальных кривых, удалось определить величины физических параметров реагирующих агентов.

Предложенный метод позволяет определять не только концентрацию специфических белков в анализируемом растворе, но и константу аффинности антиген-антитело, а также количество антител на поверхности одной микросферы, что дает возможность контролировать качество используемых наборов в клинической диагностике и увеличивает точность и достоверность результатов анализа.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Мальцев

# **ИССЛЕДОВАНИЕ ЛИЗИСА ЭРИТРОЦИТОВ В ИЗОТОНИЧЕСКОМ ВОДНО-СОЛЕВОМ РАСТВОРЕ В ПРИСУТСТВИИ ХЛОРИДА АММОНИЯ**

И. В. Польщицина

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Эритроциты – это основные клетки крови, обеспечивающие доставку кислорода в организме; в норме эти клетки имеют осесимметричную дисковидную двояковогнутую форму. При различных заболеваниях крови возможно изменение размеров эритроцитов, их количества, формы, а также концентрации внутриклеточных компонентов и структуры мембраны. Одним из методов многопараметрического анализа данных клеток является гемолиз (разрушение) в подходящей среде. Способность эритроцитов сопротивляться гемолизу может меняться в зависимости от различных заболеваний, а также от физических или химических воздействий, что имеет большое диагностическое значение в медицине.

В данной работе эритроциты измерялись методом светорассеяния на одиночных частицах с использованием сканирующего проточного цитометра (СПЦ). В режиме реального времени была проведена серия экспериментов по лизису эритроцитов в изотоническом водно-солевом растворе хлорида аммония и хлорида натрия. Одиночные клетки распознавали и характеризовали на СПЦ по сигналу индикатрисы светорассеяния. Известно, что гемолиз в изотоническом водном растворе хлорида аммония состоит из двух этапов: 1) сферизация клетки; 2) разрыв мембраны клетки. Разработанная математическая модель данного процесса позволила методом решения обратной задачи светорассеяния определить статические (объем, концентрация гемоглобина, индекс сферичности) и динамические (число белков мембраны, отношение критического напряжения мембраны к ее упругости) характеристики эритроцитов. Полученные значения находятся в согласии с известными литературными данными.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. В. Чернышев

# РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ВОЗДУХА В НОСОВОЙ ПОЛОСТИ ЛАБОРАТОРНОЙ МЫШИ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А. С. Садовский

Институт теоретической и прикладной механики

им. С. А. Христиановича СО РАН

Новосибирский государственный технический университет

Исследование течения воздуха в полости носа представляет большой интерес для современной медицины, так как сейчас активно развиваются новые методы введения лекарственных препаратов через нос. Экспериментальная проверка новых лекарств и способов их доставки, как правило, начинается на лабораторных мышах. Для носовой полости мыши характерны сложность анатомического строения и малость линейных размеров. Вследствие этого невозможно применение традиционных методов визуализации и диагностики потока. В качестве альтернативы используется численное моделирование, которое позволяет получить полную картину течения.

В данной работе течение воздуха в носовой полости лабораторной мыши изучалось на основе математической модели. Геометрия носовой полости мыши реконструировалась по серии томографических снимков, выполненных на магниторезонансном томографе (МРТ) ИЦиГ СО РАН с высоким разрешением. Для построения расчетной области и её дискретизации использовался пакет "Gambit", подробнее с особенностями реконструкции трехмерных геометрических моделей по сериям томографических снимков можно ознакомиться в [1]. Расчет течения воздуха и обработка полученных результатов осуществлялись средствами газодинамического пакета "Fluent". Численное решение построено на основе уравнений Навье-Стокса, режим течения постулировался ламинарным. Проведена серия вычислительных экспериментов. Представлена визуализация течения и приведены зависимости расхода воздуха от создаваемого респираторного усилия (перепад давления изменялся в диапазоне 1-20 Па) для режимов вдоха и выдоха.

---

1. В. М. Фомин, В. Н. Ветлуцкий, В. Л. Ганимедов, М. И. Мучная, В. И. Шепеленко, М. Н. Мельников, А. А. Савина. Исследование течения воздуха в носовой полости человека // Журнал прикладной механики и технической физики. 2010. Т. 51, №2.

Научные руководители – акад. РАН. В. М. Фомин, канд. физ.-мат. наук В. Л. Ганимедов

# ОСОБЕННОСТИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ГОМО-FRET МЕЖДУ GFP-МАРКИРОВАННЫМИ БЕЛКАМИ

Е. С. Смирнов

Новосибирский государственный университет

Детектирование гомо-FRET для изучения взаимодействия и конформационных переходов белков в живых клетках требует разработки уникального оборудования для их осуществления.

Разработан экспериментальный метод съёмки и обработки изображений, пригодных для получения количественной информации об анизотропии поляризации флуоресценции, вызванной резонансным транспортом энергии между GFP-маркированными белками в живой клетке.

Создана цитофотометрическая система, которая состоит из микроскопа Leitz Dialux 20 EB с флуоресцентным каналом, лазерного источника света BWB-10-OEM 473 нм и регистрирующей фотокамеры Canon EOS 500D. Произведена калибровка цифровой камеры, обладающей повышенной дигитализацией ( $2^{14}$  бит), с помощью серого клина, калиброванного ступенчатого ослабителя и биологических тестовых препаратов.

Показано, что характеристики системы позволяют производить компактную цитофотометрию с коэффициентом до 2,6%.

Методами флуоресцентной и поляризационной микроскопии выявлено явление FRET на образцах, подготовленных в ИМКБ СО РАН. В качестве биологических образцов служили мономерный и тримерный белки GFP. От авторов работы [1], в которой впервые наблюдался гомо-FRET между двумя молекулами GFP, получены ДНК плазмид, содержащих мономерную и тримерную формы GFP, наработаны ДНК этих плазмид, осуществлена временная трансфекция культуры клеток человека.

Выявлена значительная зависимость анизотропии от расчетной области, выбранной в пределах клетки, что указывает на возможность идентификации клеточной организации, лежащей на пределе разрешения микроскопа. Разработан специальный алгоритм определения границ клетки с учетом дифракционных эффектов.

Разрабатываемые методики дают потенциальную возможность использования данных полногеномных проектов по насыщению геномов GFP маркированными белками для построения карты пар взаимодействующих белков.

- 
1. A. Squire et al./Journal of Structural Biology 147 (2004) 62–69

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. И. Г. Пальчикова

## ИССЛЕДОВАНИЕ БАКТЕРИЦИДНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Н. А. Смирнова, Н. М. Андреев, И. С. Беспалов, А. И. Сафонов  
Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящее время активно ведутся исследования бактерицидных свойств наносеребра. Столь большое внимание к нему легко объяснимо: именно серебро обладает наибольшей способностью уничтожения патогенных микроорганизмов, а также губительным воздействием на вирусы. Еще одно немаловажное свойство заключается в том, что на сегодняшний день не известен ни один микроорганизм, который развивал бы устойчивую форму по отношению к серебру, этим оно выгодно отличается от антибиотиков. Выяснение основных параметров, определяющих бактерицидные свойства наносеребра в полимерном композите является актуальной задачей.

В металлополимерных композитах полимерная матрица выступает в роли стабилизатора химически активных частиц металла, препятствуя их агрегации. При этом матрица должна обеспечить “доступ” к активным частицам металла для получения требуемого бактерицидного эффекта. На наш взгляд этим условиям соответствуют фторполимеры. Они обладают высокой биосовместимостью и химической стойкостью.

Идея предлагаемого метода газоструйного осаждения металлополимеров заключается в одновременном осаждении в вакууме на подложку полимера и металла из двух струй: газа-предшественника фторполимера и потока инертного газа, несущего наночастицы серебра. Метод позволяет изменением газодинамических параметров струй регулировать структуру и состав осаждаемых металлополимеров.

Для определения бактерицидных свойств образцов использовался метод посева патогенных микроорганизмов (п/о) в жидкую среду (физиологический раствор). Количественная оценка осуществлялась подсчетом КОЕ (колониеобразующих единиц) методом последовательного титрования и сравнивалась с исходным титром. Исследование проводилось на четырёх тест-штаммах п/о — *Salmonella typhimurium*, *Staphylococcus aureus*, *E. Coli*, *Pseudomonas aeruginosa*.

Выводы: разработан и реализован метод получения наночастиц серебра в полимерной матрице. Исследованы бактерицидные свойства полученных образцов.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Н. И. Тимошенко

## **ИЗУЧЕНИЕ АФФИННОСТИ СВЯЗЫВАНИЯ ЭПИТОПОВ И АНТИТЕЛ, ИНДУЦИРОВАННЫХ К ЭТИМ ЭПИТОПАМ**

А. С. Старостин, С. В. Мальцев.  
Новосибирский государственный университет  
ГНЦ ВБ «Вектор»

Для формирования протективного иммунного ответа необходимо, чтобы антитела вырабатывались к функционально значимым участкам вирусного антигена. В реальных условиях антитела вырабатываются к произвольным эпитомам антигена. В частности, по этой причине зачастую отсутствует протективный иммунный ответ у ВИЧ-инфицированных пациентов. Исследование и понимание фундаментальной природы формирования гуморального иммунитета на те или иные участки белков ВИЧ необходимо при проектировании, разработке и изучении иммунологических характеристик вакцин против ВИЧ, вызывающих протективный иммунный ответ.

В настоящем исследовании в качестве антигена используется полиэпитопный искусственный белок ТВ1, состоящий из функционально значимых участков, включающих четыре Т-хелперных и пять В-клеточных эпитопов поверхностного и капсидного белков ВИЧ-1. Ранее было показано наличие вируснейтрализующей активности в сыворотках крови мышей и обезьян, иммунизированных белком ТВ1.

Целью настоящей работы является экспериментальное и теоретическое изучение аффинности связывания эпитопов и антител, индуцированных к этим эпитомам, в зависимости от структурной организации антигена.

Для достижения поставленной цели проведено исследование антигенных и иммуногенных свойств отдельных эпитопов и белка ТВ1 в целом. Проведен иммуноферментный анализ В-клеточных эпитопов белка ТВ1 с использованием анти-ТВ1 сывороток мышей. Проведено исследование иммуногенных свойств отдельных пептидных фрагментов белка ТВ1. Проведено исследование антигенных свойств белка ТВ1 с использованием моноспецифических антипептидных сывороток.

В результате исследования выявлены иммунодоминантные эпитопы и на основе метода Диксона определены константы диссоциации антител для каждого эпитопа, построена таблица аффинности связывания эпитопа с паратопом.

Научный руководитель – канд. биол. наук А. Б. Рыжиков

## **ТЕРМОИНАКТИВАЦИЯ БИФЕРМЕНТНОЙ СИСТЕМЫ NAD(P)H:FMN-ОКСИДОРЕДУКТАЗА-ЛЮЦИФЕРАЗА В ПРИСУТСТВИИ ГЛИЦЕРИНА И САХАРОЗЫ**

О. С. Сутормин, И. Е. Суковатая  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

В настоящее время большое внимание уделяется развитию физико-химических основ биолюминесцентного анализа, расширению области использования биолюминесцентного анализа, повышению активности и чувствительности люцифераз. Например, было показано, что вязкая среда стабилизирует сопряженную бактериальную биферментативную систему NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза-люцифераза [1], так же значение константы Михаэлиса повышается с увеличением концентраций органических растворителей [2]. В данной работе определены кинетические и термодинамические параметры биолюминесцентной биферментной системы, а также изучен механизм термоинактивации NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза-люцифераза в присутствии глицерина и сахарозы. Показано, что термоинактивация биферментной системы в условиях различной вязкости, моделируемой как сахарозой, так и глицерином, является мономолекулярным процессом, что указывает на отсутствие процессов диссоциации ферментов на субъединицы и последующей денатурации. Сахароза является эффективным проектантом биферментной бактериальной биолюминесцентной системы. В сахарозе наблюдается стабилизация долгоживущего интермедиата реакции, и, как следствие, увеличение квантового выхода.

Работа подготовлена по мега-проекту «Биолюминесцентные биотехнологии» (договор № 11.G34.31.0058) в рамках Постановления Правительства РФ № 220 от 9 апреля 2010 г. «О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования».

---

1. Безруких А.Е, Исимбекова Е.В, Кратасюк В.А Термостабильность сопряженной системы люминесцентных бактерий NADH:FMN-оксидоредуктаза-люцифераза в желатине // Журнал Сибирского федерального университета. Биология 1, 2011. № 4. С. 64-74.

2. Sukovataya IЕ, Tyulkova NA. Kinetic analysis of bacterial bioluminescence in water-organic media. Luminescence 2001; 16: 271-273.

Научный руководитель – д-р биол. наук, проф. В. А. Кратасюк



## **АНАЛИЗ БЕЛКОВОГО СОСТАВА ХРУСТАЛИКА И ФОТОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАБОЛИТОВ ХРУСТАЛИКА**

И. В. Черепанов, Л. В. Копылова, О. А. Снытникова, Ю. П. Центалович  
Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Катаракта – помутнение хрусталика – на молекулярном уровне обусловлена многочисленными модификациями основных белков хрусталика – кристаллинов. Пост-трансляционные модификации могут приводить к денатурации белков и переходу белков в водонерастворимое состояние. В данной работе исследовались изменения в белковом составе хрусталиков крыс двух линий: контрольной линии Вистар и преждевременно стареющих крыс линии OXYS. Линия OXYS является моделью возрастной катаракты хрусталика человека. Исследование изменений в протеомном составе проводилось с помощью методов двумерного электрофореза и масс-спектрометрии. Установлено, что к основным возрастным изменениям относятся уменьшение количества  $\gamma$ -кристаллинов и увеличение количества  $\beta$ В2-кристаллина, а к основным межлинейным отличиям относится заметное уменьшение количества  $\gamma$ -кристаллинов в хрусталиках крыс линии OXYS.

Один из возможных путей модифицирования кристаллинов – ковалентное присоединение низкомолекулярных соединений, которые выполняют в хрусталике функцию УФ-фильтров. Эти соединения защищают сетчатку и сам хрусталик от фотоиндуцированных повреждений. Они делятся на первичные — кинуренин, 3-гидрокскинуренин, гликозид 3-гидрокскинуренина, которые являются производными триптофана, и вторичные — аддукт кинуренина с глутатионом и 4-(2-аминофенил)-оксобутановая кислота, которые образуются из первичных УФ-фильтров в результате неферментативных реакций. Изучение проводилось с помощью методов лазерного импульсного фотолиза и стационарного фотолиза. Обнаружено, что вторичные УФ-фильтры являются фотохимически более активными, чем первичные: они обладают большими квантовыми выходами триплетных состояний и фоторазложения. С возрастом в хрусталиках млекопитающих наблюдается тенденция к снижению концентрации первичных УФ-фильтров; таким образом, белки в стареющем хрусталике больше подвержены фотоповреждениям.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 11-04-00143, 11-04-12006-офи-м-2011, ОХМН РАН, ФЦП госконтракт 14.740.11.0758, грант правительства РФ №11.Г34.31.0045, работа выполнена на оборудовании ЦКП “масс-спектрометрические исследования” СО РАН.

Научный руководитель – д-р хим. наук Ю. П. Центалович

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОЗООНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В ТЕПЛИЧНОМ КОМПЛЕКСЕ

А. А. Шевченко, Е. А. Сапрунова, Е. А. Денисенко  
Кубанский государственный аграрный университет, г. Краснодар

В настоящее время в Краснодарском крае наблюдается значительный рост тепличных хозяйств. При выращивании овощных культур сельскохозяйственные потребители сталкиваются с такими проблемами, как насекомые вредители и болезни растений. Одним из способов решения данных проблем является применение озонородушной смеси, используемой в качестве дезинфектанта.

Использование озонородушной обработки теплиц и тепличных комплексов на прямую связано с распределением озонородушной смеси по площади теплицы. Эта связь определяется необходимостью добиться равномерного распределения концентрации озонородушной смеси на уровне произрастания сельскохозяйственных объектов выращиваемых в условиях закрытого грунта.

На данный момент, по нашим сведениям не существует методики определяющей распределение озонородушной смеси в воздушной среде. Нами предлагается методика расчета распределения озона в воздушной среде тепличного комплекса в зависимости от величины воздушного потока и направления распространения озона, с целью определения технологических требований к процессу озонородушной обработки растений закрытого грунта.

Взяв за основу известный распределительный закон, выведенный немецким ученым Адольфом Фиком в 1855 г., можно определить необходимую плотность потока вещества (озонородушной смеси) для поддержания определенной концентрации озона в тепличном комплексе. Для этого нами произведен расчет бинарного коэффициента диффузии озона в воздушную среду, в зависимости от температуры и давления.

Данные полученные в ходе расчета позволяют рассчитать необходимую плотность потока вещества на различном расстоянии от озонатора для поддержания определенной концентрации озонородушной смеси. Но необходимо отметить, что генераторы озона имеют различные показатели производительности, скорости озонородушной смеси на выходе из озонатора и скорости образования озона. Следовательно, для дальнейших теоретических исследований необходимо провести лабораторные эксперименты с целью определения взаимосвязи между изменением скорости распределения озонородушной смеси в помещении и выходных параметров генератора озона. Таким образом, проводимые нами теоретические и лабораторные исследования позволят получить достоверную картину распределения озона в тепличном комплексе.

# ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР ПРОДУКТОВ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ – ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ

А. С. Берёзин

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Фталоцианины (Pc) и их металлосодержащие комплексы, ещё с середины прошлого века, стали широко использоваться в различных областях науки и техники. Но процессы, протекающие в реакциях с их участием малоизучены.

Данная работа посвящена исследованию особенностей протекания термической реакции трансформации  $AlClPc$  в  $(AlPc)_2O$ . Из литературных данных известно, что такая реакция протекает в присутствии  $H_2O$  [1]. В работе [2] обнаружено, что такая реакция протекает и в плёночных структурах при наличии паров воды в атмосфере. Причем, температура термической трансформации  $AlClPc$  в  $(AlPc)_2O$  уменьшается с  $300^\circ C$  до  $200^\circ C$ , если отжиг производится во внешнем магнитном поле 1Т. Объяснением этого эффекта авторы [2] считают наличие магнитного момента  $\pi$ -системы Pc, который приводит к изменению ориентации плоскостей Pc в магнитном поле. Однако подобное влияние магнитного поля не наблюдалось на других комплексах Pc. Для выяснения механизма и продуктов реакции  $AlClPc \rightarrow (AlPc)_2O$  в данной работе использовался метод спиновых ловушек, как одна из разновидностей методик на основе метода ЭПР. В качестве спиновой ловушки использовался С-фенил-N-третбутил-нитрон (ФБН). Отжиг поликристаллического  $AlClPc$  проводился при температурах  $70-90^\circ C$  в смеси с ФБН в магнитном поле, без магнитного поля, в вакууме и при наличии паров воды. Показано, что реакция  $AlClPc \rightarrow (AlPc)_2O$  протекает при наличии паров воды и носит радикальный характер, т.е. протекает с образованием короткоживущих радикальных состояний, магнитный момент которых и взаимодействует с внешним магнитным полем. Показано, что основным аддуктом реакции с ФБН является ФВН·ОН. При наличии примеси безметалльного Pc происходит образование парамагнитного состояния димера  $AlPc \ O \ Pc$ .

---

1. F. Santerre et al. J. Phys. Chem.(1995), 99, 17198.

2. T. Basova et al. J. Chem. Phys. (2011), 134, 124703.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук. В. А. Надолинный

# РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЛЕЙ $[M(NH_3)_5Cl]WO_4$ ( $M=Cr, Rh$ ) И ПРОДУКТОВ ИХ ТЕРМОЛИЗА

П. Ю. Ванина

Институт неорганической химии им. Н. В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Оксиды переходных 3d-металлов широко используются в качестве катализаторов, например, при сжигании горючего газа [1]. Перспективными предшественниками таких оксидов являются биметаллические комплексные соли (КС)  $[M^A(NH_3)_5Cl]M^B O_4$  ( $M^A=Co, Cr, Rh, Ir$ ;  $M^B=Mo, W$ ) [2]. Изоструктурность этих солей позволяет получать их твердые растворы с участием трех и более металлов. В настоящей работе изучен ряд солей  $[M(NH_3)_5Cl]WO_4$ , где  $M=Cr, Rh$ .

Близость параметров элементарных ячеек (ПЭЯ) КС потребовала специальных усилий по их уточнению в области малых углов. Мы использовали методику, описанную в [3]. Далее нами была изучена анизотропия теплового расширения солей в области  $-183 - +127^\circ C$ .

Рентгенографическое исследование продуктов термолиза (атмосфера  $He$  и  $H_2$ ) КС  $[Cr(NH_3)_5Cl]WO_4$  проведено на дифрактометре ARLX'TRA ( $CuK_\alpha$ -излучение, полупроводниковый детектор,  $T = 23 \pm 3^\circ C$ ) в области углов  $2\theta$   $5-120^\circ$ . Установлено, что продукт, полученный в атмосфере гелия при  $530^\circ C$  является рентгеноаморфным. При дальнейшем нагревании до  $864^\circ C$  образуется неидентифицированная фаза (предположительно двойной оксид). Нагревание соли до  $850^\circ C$  в атмосфере водорода приводит к образованию смеси  $Cr_2O_3$  и  $W$ . Уточнение ПЭЯ этих фаз с использованием калибровочной кривой [3] показало, что последняя фаза является твердым раствором на основе структуры  $W$ . Проведено сравнение составов продуктов термолиза  $[Cr(NH_3)_5Cl]WO_4$  и  $[Rh(NH_3)_5Cl]WO_4$ .

---

1. Э. Хумс, Н. Фортмейер, Газовая турбина для сжигания горючего газа, Описание изобретения к патенту:RU 2142566, F02C3/20, F23R3/40.

2. Е.А.Shusharina, S.P.Khranenko, P.E.Plusnin, S.A.Gromilov, Crystal Structures of  $[M^A(NH_3)_5Cl]M^B O_4$  ( $M^A = Co, Rh, Ir$ ;  $M^B = Mo, W$ ), Acta Cryst. 2010, A66, 192.

3. П. Ю. Ванина, Калибровка гониометра в малых углах и уточнение параметров элементарной ячейки  $[Rh(NH_3)_5Cl]WO_4$ , Материалы XLIX международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс», Физика, 301(2011).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов

# ***IN SITU* РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ $\text{LaFe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{O}_{3-\delta}$ – $\text{BiSmY}$ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ПАРЦИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА В ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР 600-800°C**

З. С. Винокуров

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

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) являются одним из перспективных направлений развития распределенной энергетики. Согласно статистическим данным, международный рынок этих устройств достиг в 2011 году \$380 млн, и ожидается его увеличение до \$530 млн к 2016 году [1].

Одной из наиболее важных задач на сегодняшний день является понижение рабочей температуры ТОТЭ с 1000°C до 600-800°C без потери эффективности. Основным ограничением для среднетемпературных твердооксидных топливных элементов (СТ ТОТЭ) является каталитическая активность катода. Поэтому интенсивно ведется поиск новых материалов с лучшими термическими, электрическими, механическими и каталитическими характеристиками. Одними из наиболее перспективных материалов для использования в качестве катодов для СТ ТОТЭ являются перовскито-флюоритовые наноккомпозиты [2].

В настоящей работе представлены результаты исследования образца наноккомпозита состава  $\text{LaFe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{O}_{3-\delta}$  –  $\text{BiSmY}$  со структурой типа перовскита и флюорита и наиболее высокими показателями каталитической активности и кислородной проводимости. Целью работы является установление взаимосвязи между структурой и подвижностью кислорода в этой системе. Методами прецизионной рентгеновской дифрактометрии и дифрактометрии *in situ* проведены исследования зависимости фазового состава и структурных особенностей образца от парциального давления кислорода в окрестности рабочих температур СТ ТОТЭ. Эксперименты выполнены на станциях «Прецизионная дифрактометрия» и «Дифрактометрия с высоким разрешением и аномальное рассеяние» Сибирского центра синхротронного излучения.

---

1. Solid Oxide Fuel Cells: Technologies and Global Markets, Electronics.ca Research Network, september 2011.

2. V. A. Sadykov et al., Solid oxide fuel cell composite cathodes based on perovskite and fluorite structures, Journal of Power Sources, 196, 7104 (2011).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. Н. Шамаков

## ПОВЕРХНОСТНАЯ ТВЕРДОСТЬ И АДГЕЗИОННАЯ СТОЙКОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ ЭЛЕКТРОДУГОВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ В ВАКУУМЕ

А. С. Гавриленко, А. В. Забугин  
Институт физики высоких технологий  
Томский политехнический университет

В последнее время интенсивно ведутся работы, связанные с получением вакуумно-дуговым и магнетронным методами композиционных материалов нового поколения, имеющих нанокристаллическую (~10 нм) структуру, в виде сплошных однослойных и многослойных покрытий. Однако покрытия указанного типа не всегда отработывают спрогнозированный ресурс из-за преждевременного адгезионно-когезионного разрушения, вызываемого как эксплуатационными нагрузками, так и сложным напряженным состоянием в покрытии и на границе раздела покрытие – подложка.

В настоящей работе представлены экспериментальные результаты формирования наноструктурных покрытий системы Ti-Al-N толщиной ~2 мкм, обладающие твердостью 30-40 ГПа. Проведены сравнительные исследования влияния предварительного легирования обрабатываемой поверхности подложек рядом различных элементов на изменения адгезии функциональных покрытий, напыляемых при идентичных параметрах технологического процесса. Полированную поверхность подложек, выполненных из инструментального твердого сплава BK8, модифицировали в результате обработки ионами азота, титана и хрома методом высокоэнергетической ионной имплантации. Формирование экспериментальных покрытий проводили методом вакуумно-дугового распыления композиционных катодов состава  $Ti_{0.6}Al_{0.4}$ , полученных вакуумным спеканием спрессованной порошковой массы.

Из результатов скретч-тестов установлено, что предварительное легирование поверхности твердого сплава атомами азота, титана и хрома оказывает заметное влияние на адгезионные характеристики покрытия, нанесенного при одинаковых параметрах режима конденсации. Так, например, для покрытий, сформированных при потенциале смещения равным нулю, величина критической нагрузки алмазного индентора, характеризующей начало разрушения покрытия для композиции «азотирование-покрытие» составляет 10 Н, в то время как для композиции «хромирование-покрытие» – 8,9 Н. Для исходного сплава с покрытием это значение – 6,2 Н.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент И. М. Гончаренко

## АНАЛИЗ ИЗОТЕРМ АДСОРБЦИИ $\text{H}_2$ (77 К) НА АЛЮМОФOSФАТНЫХ ЦЕОЛИТАХ AIPO

И. В. Грнев

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

Цеолитсодержащие катализаторы AIPO широко применяются в различных каталитических процессах. Основным методом исследования микропористой структуры таких катализаторов являются сорбционные методы, причем использование адсорбции газов, т.е. сорбатов при  $T > T_{кр}$ , открывает новые экспериментальные возможности. В этих температурных условиях не происходит спонтанное объемное заполнение микропор жидкоподобным сорбатом, а характер изменения плотности сорбата по мере роста давления определяется размерами микропор.

Целью работы является описание локальных изотерм сорбции  $\text{H}_2$  на серии цеолитов AIPO с разным размером микропористых каналов.

В работе исследованы алюмофосфатные цеолиты с эффективными размерами цилиндрических каналов  $d$  от 0,49 до 0,83 нм. Сорбционные измерения были проведены на автоматизированной установке объемного типа DigiSorb-2600 Micromeritics.

Полученные локальные изотермы изменения плотности сорбата  $\beta(P, d)$  описывались методом вириального разложения и по модели нелокализованной адсорбции Хилла — Де Бура. В области малых заполнений оба подхода сводятся к линейной изотерме Генри, что позволяет установить корреляционную зависимость между константой уравнения Генри ( $K_r$ ) и значением  $d$ . В результате проведенных исследований установлено, что для цилиндрического канала уравнение Генри может быть представлено как:

$$\beta(P, d) = K_r P = \left( \frac{\iiint_V e^{-\frac{\Phi(R, d)}{kT}} R d R d \varphi dz}{V} - 1 \right) \frac{P}{kT} = \left( \frac{8 \int_0^{d/2} e^{-\frac{\Phi(R, d)}{kT}} R d R}{d^2} - 1 \right) \frac{P}{kT}$$

где  $\Phi(R, d)$  — потенциал адсорбционного взаимодействия  $sf$ , значения которого можно определить в результате сопоставления с экспериментальными данными по сорбции  $\text{H}_2$  на цеолитах AIPO. Использование значений  $\Phi(R, d)$  позволяет нам рассчитать набор  $K_r$  и локальных изотерм  $\beta(P, d)$  для широкого набора значений  $d$  и тем самым разработать метод расчета распределения объемов цилиндрических микропор по размерам пор для оксидных материалов.

Научный руководитель – д-р хим. наук В. Ю. Гаврилов

# РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ГРАДИЕНТА ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

Е. Ю. Гудимова<sup>1</sup>, М. Г. Остапенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Томский государственный университет

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Исследование материалов с градиентом структурно-фазовых состояний предполагает применение, адаптацию и развитие существующих рентгеновских методов исследования остаточных напряжений, связанную со спецификой исследуемых объектов, которыми являются приповерхностные слои модифицированного материала, и спецификой используемого оборудования. Целью данной работы является количественная оценка величины остаточных напряжений в поверхностных слоях образцов никелида титана после электронно-пучкового воздействия. В работе исследовались плоские образцы из сплава  $Ti_{49,5}Ni_{50,5}$ , которые подвергались импульсным электронно-пучковым воздействиям с использованием источника сильноточных электронных пучков низкой энергии при плотности энергии пучка электронов  $20 \text{ Дж/см}^2$ . Рентгеновские исследования структурно-фазовых состояний фаз, оценку внутренних напряжений 1-го рода проводили на дифрактометре ДРОН-7 (ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН, г. Томск) в  $CoK_{\alpha}$ -излучении по симметричной и ассиметричной схемам съемки. Установлено, что на рентгенограммах исследуемых образцов кроме рефлексов основной фазы В2 наблюдаются дополнительные рефлексы, соответствующие мартенситной фазе В19' (~10 об. %). На дифрактограммах, полученных при использовании ассиметричных съемок, видно, что с уменьшением угла скольжения интенсивность рефлексов фазы В19' понижается и при минимальном угле скольжения близка к нулю. Выявлено уменьшение интегрального значения параметра решетки фазы В2 в приповерхностной области до значения  $a_{B2}^{поверх.} = 3.0114 \pm 0.0005 \text{ \AA}$  ( $a_{B2}^0 = 3.0132 \pm 0.0005 \text{ \AA}$ ). Установлено, что максимальная величина остаточных напряжений  $\sigma \approx 550 \text{ МПа}$  наблюдается в «быстрозакаленном» поверхностном слое, тогда как в нижележащем слое величина  $\sigma$  не превышает ~100 МПа. Это предположительно объясняет причину наличия мартенситной фазы В19' в более глубоких слоях материала и её отсутствие в наружном слое, в котором мартенситное превращение подавлено внутренними напряжениями.

Авторы благодарят д. ф.-м. н. Мейснер Л.Л. за постановку задачи и научное руководство. Исследования проведены в рамках ГК № 16.740.11.0140.



## ИССЛЕДОВАНИЕ IN SITU РОСТА АНОДНЫХ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК НА АЛЮМИНИИ

Я. А. Джулай

Новосибирский государственный университет  
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Мезопористые анодные оксидные пленки алюминия могут найти применение в качестве неорганических мембран, фильтров, носителей для гетерогенных катализаторов, материалов для создания функциональных нанокомпозитов и нанореакторов. Однако механизм роста и строение полученных пленок остаются до сих пор неясными. В связи с этим исследование кинетики роста анодных оксидных пленок методами *in situ* и морфологии пленки является актуальной задачей.

Для проведения *in situ* эксперимента нами была сконструирована электрохимическая ячейка, снабженная быстродействующим одноволновым ( $\lambda=632.8$  нм) эллисометром ЛЭФ-72 (ИФП СО РАН), угол падения луча света на образец составлял  $64.55^\circ$ , интервал измерений 0.1 с. Спектральные исследования исходных подложек и полученных пленок проводились на приборе ЭЛЛИПС-1771СА (ИФП СО РАН). Для изучения морфологии пленок использовались сканирующий электронный микроскоп Hitachi TM1000 и электронный микроскоп высокого разрешения JEOL JEM-2000 FX.

Исследования показали, что рост пленки анодного оксида алюминия включает стадии быстрого ( $\sim 1-3$  с) и медленного роста. Скорость роста и морфология пленок зависит от типа электролита, температуры раствора, разности потенциалов  $U$  и варьировалась в диапазоне 0.5-20 нм/с. По данным электронной микроскопии при увеличении  $U$  пленки становятся мезопористыми, причем размер, форма и степень упорядочения пор зависит от величины  $U$  и типа электролита.

Анализ зависимостей  $\Psi$ - $\Delta$  (номограмм роста) и спектральных зависимостей  $\Psi(\lambda)$ ,  $\Delta(\lambda)$  показали, что микроструктура пленки анодного оксида не может быть описана в рамках простой однослойной оптической модели. Для интерпретации данных в работе использовалась модель мультислойной отражающей системы, включающая переходные слои и учитывающая мезопористую морфологию пленки.

Таким образом, с помощью метода эллисометрии можно детально проследить за изменением морфологии пленок в процессе роста, что дает возможность отработки рабочих режимов получения анодных пленок с заданным характером микроструктуры.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. Н. Ф. Уваров

# РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ ПАРАЦЕТАМОЛА ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Д. А. Дружбин

Научный образовательный центр

"Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии"

Новосибирский государственный университет

Ацетаминофен (парацетамол) обладает жаропонижающим и болеутоляющим свойствами, что объясняет его широкое использование как лекарственного препарата. Большое внимание к парацетамолу обусловлено в первую очередь наличием ацетамидной группы. Ацетамидная группа входит в состав важных функциональных частей молекул различных биополимеров. Знание о поведении межмолекулярных водородных связей имеет большое значение для понимания свойств таких полимеров. Парацетамол является удобной моделью для изучения водородных связей при различных внешних условиях (температура, давление). На данный момент описаны три полиморфные модификации парацетамола, для двух из них — моноклинной и ромбической структуры хорошо изучены. Прецизионный дифракционный эксперимент позволяет получать распределение электронной плотности в кристалле, из данных о которой можно не только получить координаты атомов в структуре, но и установить некоторые особенности межмолекулярных взаимодействий. Недавние исследования, и, в частности, Раман-спектроскопия, показали существенную разницу между двумя модификациями парацетамола в упорядочении и силе различных типов водородных связей [1].

Задачей данной работы являлось получение рентгеноструктурных данных при низких температурах для моноклинного и ромбического парацетамола, проверка выводов, сделанных по спектроскопическим данным. В работе использовались кристаллы ромбического парацетамола, полученные ранее в лаборатории, и кристаллы моноклинного парацетамола, полученные в данной работе путем медленного испарения насыщенного спиртового раствора. Получено распределение электронной плотности для монокристаллов ромбического парацетамола при 100 К и проведено сравнение с данными для моноклинного парацетамола [2]. Получены рентгеноструктурные данные для моноклинного парацетамола.

---

1. В. А. Kolesov, М. А. Mikhailenko и Е. V. Boldyreva, Phys. Chem. Chem. Phys., 2011, 13, 14243-14253.

2. N. Bouhaida, F. Bonhomme, B. Guillot, C. Jelsch и N. E. Ghermani, Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci., 2009, 65, 363.

Научный руководитель – канд. хим. наук, Т. Н. Дребушак

# ВЛИЯНИЕ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА СТРУКТУРУ ПЛЕНОК ФТАЛОЦИАНИНА ВАНАДИЛА

И. С. Дубков

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный технический университет

Пленки фталоцианинов металлов активно изучаются в последние два десятилетия, в частности, из-за их высокой оптической нелинейности и быстрого времени отклика, что делает возможным их использование в оптоэлектронных устройствах для обработки информации и оптической связи.

В работе исследовалась зависимость структуры пленки фталоцианина ванадила (VOPc) от материала подложки. Подложки по своей структуре были поделены на три типа: кристаллические (кремний, сапфир), аморфные (стекло, PEDOT:PSS) и ионные (бромид калия, хлорид натрия).

Фталоцианин ванадила был получен путем сплавления порошков фталонитрила и оксида ванадия при температуре 210 °С в течении 4 часов. Для очистки порошка от примесей проводилась двукратная сублимация в вакууме ( $10^{-5}$  торр) при температуре 450 °С. Вещество осаждалось на подложки методом термического испарения в вакууме ( $10^{-5}$  торр).

Структурные особенности пленок VOPc были исследованы методом рентгенофазового анализа (Shimadzu, CuK $\alpha$ -излучение) и колебательной спектроскопии. Отнесение полос в спектрах комбинационного рассеяния (КР) проводилось на основе расчета методом функционала плотности.

Рентгеновские дифрактограммы пленок VOPc на кристаллических и аморфных подложках характеризуется двумя порядками отражений (010) и (020) с  $2\theta = 7,59^\circ$  и  $15,2^\circ$ , что позволяет рассматривать данные пленки как фазу II согласно [1]. Положения указанных пиков различаются не более чем на 1-2%.

На дифрактограммах пленок, нанесенных на ионные подложки, отсутствуют указанные ранее пики, и наиболее интенсивный пик имеет положение  $2\theta = 25,69^\circ$ , что, предположительно, соответствует фазе I [1].

Угол наклона молекул I и II относительно поверхности подложек установлен по данным поляризационной КР-спектроскопии.

---

1. Y. L. Pan, Y. J. Wu, L. B. Chen. Structure and spectroscopic characterization of polycrystalline vanadyl phthalocyanine (VOPc) films fabricated by vacuum deposition//Appl. Phys. A 66, 569-573 (1998)

Научный руководитель – д-р хим. наук Т. В. Басова

## ИЗУЧЕНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ РАЗМЕРНОСТЕЙ ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗРУШЕНИЯ МАГНИЕВЫХ СПЛАВОВ

А. М. Жармухамбетова, А. А. Козулин, Н. В. Скрипняк  
Томский государственный университет

В работе проведено исследование фрактальных размерностей поверхностей разрушения образцов из магниевых сплавов Ма-2 в состоянии поставки и после интенсивной пластической обработки. Исследовались структура поверхностей разрушения образцов после квазистатического и динамического растяжения в диапазоне скоростей деформации от  $10^{-3}$  до  $10^3$  с<sup>-1</sup>.

Полученные результаты свидетельствуют, что обработка сплава методом интенсивной пластической деформации вызывает изменения закономерностей разрушения образцов. Интенсивная пластическая деформация приводит к увеличению фрактальной размерности поверхности разрушения при аналогичных условиях деформации. Полученные результаты свидетельствуют о том, что интенсивная пластическая деформация приводит к уменьшению влияния структурных неоднородностей в объеме материала на их прочностные свойства, как в условиях квазистатического, так и динамического нагружения.

С повышением скорости деформации увеличивается фрактальная размерность поверхности разрушения, что свидетельствует о проявлении процессов самоорганизации микроскопических и мезоскопических механизмов разрушения и снижения влияния исходной структуры материала на прочностные характеристики.

Обнаружено, что при динамическом нагружении образцов исследованных сплавов с измененной структурой на мезоскопическом и микроскопическом уровнях происходит самоорганизация процессов локализации пластической деформации и, связанных с ними, процессов зарождения и роста пор и трещин. Выявленные переходные участки на  $S(l)$  —  $\log(1/l)$  диаграммах без устойчивой корреляции свидетельствуют о существовании режимов деформации и разрушения с развитием самоорганизации на более низких структурных уровнях. Эти процессы приводят к снижению предельных деформаций до разрушения. Эффект повышения сопротивления пластической деформации, в рассмотренных магниевых сплавах, сопровождается снижением пластичности как в условиях квазистатического, так и высокоскоростного растяжения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 г. № П666 от 19 мая 2010 г., № П1247 от 07 июня 2010 г. и гранта Президента Российской Федерации МК-3066.2012.8.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Скрипняк

# КОНСТРУИРОВАНИЕ ДИСКРЕТНО-МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОДУГОВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ В ВАКУУМЕ

А. В. Забугин, А. С. Гавриленко  
Институт физики высоких технологий  
Томский политехнический университет

При решении задачи эффективного использования износостойких покрытий на инструментальных материалах разработка научно обоснованных методов управления свойствами поверхности весьма актуальна.

Анализ литературных данных показывает, что в настоящее время большинство вакуумно-плазменных методов поверхностного упрочнения формируют сплошные слои, которые имеют не очень высокую эксплуатационную надежность из-за большей склонности к хрупкому разрушению. Заменяв традиционный сплошной слой покрытия на прерывистый с мозаично-дискретной структурой, можно преодолеть хрупкость – основной недостаток сверхтвердых поверхностных пленочных структур.

Такой подход, представленный в настоящей работе, позволяет обеспечить необходимые физико-механические свойства защитного слоя, реализовать оптимальные условия трения, а также минимизировать износ режущего инструмента.

Формирование несплошных покрытий из единичных участков в виде правильных усеченных четырехгранных пирамид осуществляли с помощью сеточного сепаратора в плазме дугового разряда в вакууме. Результаты триботехнических исследований показали, что преимущество пары трения с дискретным покрытием перед парой трения со сплошными пленочными возрастает по мере увеличения удельных нагрузок и линейной скорости.

На основании результатов проведенных исследований показано, что нанокристаллическое покрытие TiN с дискретно-мозаичной структурой и твердостью ~35 ГПа обладает рядом преимуществ по сравнению с пленочным сплошным покрытием одного и того же состава, при нанесении их на одинаковый по свойствам материал, и позволяет исключить растрескивание функциональной поверхности.

Данный метод может быть рекомендовано для применения на режущем инструменте. Параметры дискретных участков устанавливают исходя из условий разрушения при силовом и температурном воздействии.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент И. М. Гончаренко

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАОМАЛМАЗОВ

В. П. Исаков, Д. Н. Никитин, А. В. Солнцев  
Институт инженерной физики и радиоэлектроники  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Процессы электрохимического нанесения металлических, комбинированных и неметаллических покрытий используются практически во всех отраслях науки и техники. Существуют различные виды покрытий классифицируемых по типу их функций, а именно функциональные, коррозионно-защитные и защитно-декоративные. Реальные покрытия часто совмещают несколько функций. Одно и то же покрытие может, например, одновременно и служить для защиты основы от химической коррозии, и повышать износостойкость поверхности. В любом случае, основной целью нанесения традиционных покрытий является изменение каких-либо свойств поверхности. Ведутся постоянные поиски способов улучшения свойств покрытий и одним из способов улучшения известных покрытий, а по сути создания нового вида покрытий, является способ получения гальванических покрытий с включенными в него инородными частицами другой фазы. Данный тип покрытий называют композиционными электрохимическими покрытиями (КЭП). При создании КЭП в качестве дисперсной фазы применяют самые разнообразные дисперсные материалы, имеющие высокие прочностные характеристики и высокую химическую стойкость в различных средах. Одним из перспективных материалов подходящих для использования в КЭП являются наноалмазы детонационного синтеза сочетающие алмазную структуру ядра, твердость, химическую инертность, округлую форму развитую и химически активную поверхность.

В данной работе проводились исследования процесса электрохимического осаждения хромовых покрытий с добавлением наноалмазов. Полученные образцы исследовались методами микроскопии (растровый и атомно-силовой микроскопы), были проведены исследования микротвердости, пористости и износостойкости, а так же предложена модель процесса электрохимического соосаждения хрома с наноалмазами и построена компьютерная модель наноалмазной частицы с помощью программы NupurChem. В силу малого размера частиц наноалмазов и их невысокого содержания в покрытии существенное улучшение металл-алмазных материалов происходит за счет изменений структуры осаждаемого покрытия, а не за счет собственных свойств наноалмазов.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент В. П. Исаков

## ФОТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК

Г. Е. Каражанова, А. С. Ибрагимова, Д. Н. Уразалиева  
Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, г. Астана

Одно из интереснейших и перспективных направлений в науке о полимерах последних лет является разработка принципов получения и исследований различных физических свойств тонких полимерных нанокomпозитных пленок [1]. Нанокomпозиты могут использоваться как в составе смесей с полимерами (полиэтилен, полипропилен и пр.), так и в виде покрытий на пленки. Их улучшенные барьерные свойства объясняются тем, что при формировании структуры композита в пленке образуются сложные лабиринты за счет присутствия наночастиц. Такой интерес объясняется тем, что по сравнению с обычными композитами эти материалы более перспективны с коммерческой точки зрения. Полимерные нанокomпозиты обладают улучшенными механическими, физическими, оптическими, термическими характеристиками, имеют хорошие барьерные свойства и высокую химическую стойкость. Авторами [2], было исследовано некоторых теплофизических (теплопроводности) и механических свойств данных объектов. Доказано, что их прочность и упругих свойств, при разных процентах добавления наночастицы фуллерена, меняются 2,5 и 5 раза, соответственно.

В настоящем работе анализируются результаты полученные при фотометрических исследованных нанокomпозитных полимерных тонких пленок: полиэтилен низкой плотности (ПЭНП) и полиметилметакрилат (ПММА) с добавлением различных концентрации наночастицы фуллерена  $C_{60}$ . Исследование проводилось на откалиброванной установке для данных образцов. Были измерены световой поток от гелий –неонового лазера на фиксированной длине волны излучения, на вход  $\Phi_0$  и выход  $\Phi_\lambda$  от исследуемых образцов. Для измерения величины световых использованы два типа люксметры: 1) LUX-METER (фирма RHYWE-Германия) и 2) LUX-METER DT-1300. Определены значения коэффициентов светопропускание образцов и их оптических плотностей.

---

1. Озерин А.Н. Полимерные нанокomпозиты: перспективы, возможности, результаты. Институт синтетических полимерных материалов им.Н.С. Ениколопова РАН, 2010, 15стр.

2. Салихов Т., Табаров С.Х., Туйчиев Ш. и др. Влияние добавок фуллерена  $C_{60}$  на теплопроводность пленок ПЭНП. ЖТФ. Т. 81, в.4.2011, с. 141-143.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Д. М. Шарифов

# ДИЛАТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА МОЛИБДАТ И ВОЛЬФРАМАТОВ

Г. М. Кемельбекова

Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, г. Астана

В последние годы с целью поиска новых функциональных монокристаллов широко применяются двойные соединения оксидов молибдена и вольфрама, так как материалы различного состава на их основе находят все большее применение в современной технике благодаря возможности варьирования их физико-химических, электрофизических и оптических характеристик в широком диапазоне [1-2].

Экспериментально, наиболее простым и быстрым методом определения линейного теплового расширения материала является метод дилатометра, изучающий зависимость изменения размеров тела от воздействия внешних условий: температуры, давления, электрических и магнитных полей, ионизирующих излучений и т.д. Экспериментальные исследования по определению линейного теплового расширения исследуемых кристаллических образцов:  $\text{CsLiBO}_4$ , где  $B=\text{Mo}, \text{W}$ , а также  $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$  и  $\text{LiBi}(\text{WO}_4)_2$  проводились на дилатометра DIL 402CD фирмы "NETZSCH".

Значение термических коэффициентов (физическая альфа — значение термических коэффициентов) для исследуемых образцов приведены ниже в таблице 1. Анализ коэффициентов теплового расширения показал, что все исследуемы материала относятся к среднерасширяющимся материалам.

Исследуемый образец	$\alpha_T = 1/l_0 \left( \frac{dl}{dT} \right)$ , [1/K]
$\text{CsLiMoO}_4$	$3.186 \cdot 10^{-6}$
$\text{LiBi}(\text{WO}_4)_2$	$9.953 \cdot 10^{-6}$
$\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$	$5.41 \cdot 10^{-6}$

1. Черней Н.В. Исследование методом ЭПР ионов переходных металлов в оксидных оптически активных кристаллах. Дисс. к.ф.-м.н., Новосибирск, 2007, 149 стр.
2. Кирсанова С.В. Синтез и физико-химические свойства кристаллических материалов для сенсорных устройств в системе  $\text{Li}_2\text{MoO}_4 - \text{Li}_2\text{WO}_4$ . Москва. Дисс. к.ф.-м.н., 2010, 150стр.



# IN SITU РФЭС ИССЛЕДОВАНИЕ АДсорбЦИИ NO НА ПОВЕРХНОСТИ НАНЕСЕННЫХ НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ

Е. Г. Коэмец

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

Платина находит широкое применение в качестве активного компонента катализаторов. Одним из экологически значимых процессов, катализируемых платиной, является нейтрализация оксидов азота, в частности, в выхлопах двигателей внутреннего сгорания. В связи с этим, исследование поверхности платины в реакционных условиях имеет существенное значение для создания более эффективных катализаторов.

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), основанный на измерении энергий фотоэлектронов, испускаемых образцом под действием рентгеновского излучения, дает информацию о составе поверхности. В стандартном варианте РФЭС исследование проводится в условиях глубокого вакуума ( $10^{-7}$  Па). Однако использование специальной ячейки позволяет проводить измерения в режиме *in situ* при повышенных давлениях газовой фазы над образцом.

В представленной работе в качестве объекта исследований был выбран образец — наночастицы Pt, нанесенные на пленку  $Al_2O_3$ , сформированную на поверхности фольги сплава FeCrAl. Данная система является моделью промышленного катализатора Pt/ $Al_2O_3$ . Проводящая подложка решает проблему подзарядки поверхности, возникающую в ходе записи РФЭС спектров реальных оксидных систем. Методом РФЭС в режиме *in situ* была исследована адсорбция NO ( $P(NO)=1$  Па) на поверхности нанесенных частиц Pt. В ходе анализа полученных данных были обнаружены две азотосодержащие адсорбционные формы с энергиями связи в районе ~398 эВ и ~403 эВ, содержание которых зависит от температуры. Эти состояния были идентифицированы на основании данных, приведенных в работе [1], как  $N_{адс}$  и  $N_2O_{адс}$ , соответственно.

Полученные данные о составе адсорбционного слоя представляют интерес с точки зрения оптимизации работы катализаторов нейтрализации NO.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук МК-5112.2012.3.

---

1. A.V. Bukhtiyarov, R.I. Kvon, A.V. Nartova, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov // Surface Science, Vol. 606, February 2012, P. 559-563.

Научный руководитель – канд. хим. наук А. В. Нартова

## УДЕЛЬНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ПО ДАННЫМ МУРР

Т. М. Кузин, С. А. Полюянов  
Институт катализа СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Величина удельной поверхности является важной характеристикой для любого дисперсного объекта. Несмотря на широкое распространение метода БЭТ для определения удельной поверхности порошков, вопрос о надежном определении данного параметра весьма далек от окончательного решения. Данная ситуация сложилась в связи с отсутствием простого и надежного альтернативного метода для определения удельной поверхности дисперсных систем типа гетерогенных катализаторов, поскольку метод БЭТ имеет свои принципиальные ограничения. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) потенциально способен дополнить, а в некоторых случаях и заменить метод БЭТ. Для надежного и точного определения методом МУРР удельной поверхности в порошковых материалах самой различной природы необходимо было учесть возможное наличие в порошковых образцах не только однородных сферообразных наночастиц, но и частиц самых различных форм (палочки, диски и более сложные структуры типа губчатых), а также неоднородных по электронной плотности. Нами разработана новая методика анализа, алгоритмы и вычислительная программа для моделирования основных типов частиц с последующим расчетом их дифракционных картин. Используя эту программу, были проведены численные расчёты и анализ рентгенограмм МУРР от модельных частиц, имеющих формы сфер, эллипсоидов и цилиндров с учетом наличия в них неоднородностей электронной плотности, для различных распределений по размерам. Также нами было предложено использовать массы навесок образцов в специальной кювете, как это делается в адсорбционных методах. Это позволяет учитывать наличие в образце частиц большого размера, которые не «видны» методом МУРР, но существенно влияют на величину удельной поверхности порошковых катализаторов. Использование разработанного подхода для целого ряда реальных катализаторов позволило получить результаты, хорошо соответствующие адсорбционным данным БЭТ.

Научный руководитель — д-р биол. наук Ф. В. Тузиков

## ПОЛУЧЕНИЕ И СПЕКАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ МЕТАЛЛОВ

Н. С. Куделин

Томский политехнический университет

Одним из перспективных методов получения нанопорошков является электрический взрыв проводников (ЭВП). Электровзрыв проводников металлов в инертных газах глубоко изучен и рассматривается как метод получения нанопорошков, обладающих особыми свойствами, что делает их привлекательными для создания новых материалов.

*Целью* работы является исследование структурных свойств нанопорошков Al, Cu, Ag, Zn и Sn, полученных методом ЭВП, изучение спекания полученных порошков методом дилатометрии и получение на диэлектрических подложках пленок с использованием этих порошков.

Порошки получались в атмосфере аргона и были пассивированы на воздухе. В работе показано, что относительные температуры спекания для ЭВ-порошков сильно зависят от свойств оксидных слоев и от природы металла. При электронно-микроскопическом исследовании спеченных при различных температурах образцов меди было установлено, что консолидация ЭВ-порошка Cu протекает в три стадии. Лимитирующей стадией является флуктуационное и реакционное спекание с образованием пористой пенообразной структуры. Для ЭВ-порошка Ag процесс спекания определяется размером частиц и дисперсным составом порошка. Влияние поверхностных соединений в процессе спекания не проявляется.

Для наночастиц меди и серебра определены температуры спекания, которые оказались значительно ниже, чем температуры плавления массивных металлов. Для наночастиц алюминия спекание не наблюдается вплоть до температур плавления. Для порошков Zn и Sn относительное понижение температуры спекания очень незначительное. Кроме того, электропроводность получаемых слоев намного меньше, чем для компактного металла, что свидетельствует о низком качестве межчастичных контактов. В процессе исследований были получены пленки проводящих слоев Cu и Ag на диэлектрических подложках, измерена их электропроводность. Установлено, что электропроводности этих слоев в 2-3 раза меньше электропроводности массивных металлов, однако, эти показатели позволяют эффективно использовать данные нанопорошки для получения токопроводящих слоев.

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент А. И. Галанов

# КОМПЛЕКС ДЛЯ ЭКСПРЕСНОГО МНОГОЭЛЕМЕНТНОГО АТОМНО-АБСОРБЦИОННОГО СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

С. С. Курилко

Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
Новосибирский государственный технический университет

Атомно-абсорбционный спектральный анализ (ААС) имеет широкое распространение в аналитической практике. Традиционно в ААС используется метод Уолша, заключающийся в непосредственном измерении коэффициента поглощения в центре линии. Достоинствами метода Уолша являются: низкие пределы обнаружения (до 0,001 мкг/л в графитовой кювете), небольшое необходимое разрешение спектрального прибора (порядка 0,1 нм). Существенным недостатком – низкая производительность (за одно измерение определяется концентрация одного химического элемента и для каждого элемента необходим свой источник спектра).

Одновременный анализ нескольких десятков элементов возможен при использовании источника непрерывного спектра. Однако до недавнего времени считалось, что его использование в ААС не перспективно из-за увеличения пределов обнаружения элементов (ПО) в 100 раз [1] по сравнению с лампами полого катода. Применение многоканальных спектрометров высокого разрешения позволяет получать ПО с непрерывным источником спектра сопоставимые с методом Уолша.

Создан атомно-абсорбционный комплекс с непрерывным источником спектра (дейтериевая лампа) и многоканальным спектрометром высокого разрешения «Экспресс» (разрешение 0,012нм), электротермический атомизатор Perkin Elmer HGA 2100. Первые результаты получены с модельной пробой (Co, Cu, Ni, Pb, Mg Cr в концентрации 0,03 мг/л), атомизированной по общей температурно-временной программе. Интенсивность линии поглощения для этой концентрации в 30 раз превышает уровень шумов, что позволяет регистрировать примеси в водных растворах ниже ПДК для этих элементов. Подбор оптимальных параметров атомизации пробы и применение матричных модификаторов позволят улучшить метрологические параметры создаваемого комплекса. Данная разработка позволяет существенно уменьшить время определения нескольких элементов, потребление пробы и расходных материалов.

---

1. Б.В.Львов, «Атомно-абсорбционный спектральный анализ», «Наука», 1966

Научные руководители — А. Н. Путьмаков,  
д-р техн. наук В. А. Лабусов

## МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРЕЩИНОСТОЙКОСТИ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СХЕМЫ ВИККЕРСА

Ю. В. Ли, Е. Г. Скрипняк, А. А. Козулин, В. В. Скрипняк  
Томский государственный университет

Трещиностойкость является одной из важнейших характеристик механических свойств керамических материалов и характеризует способность керамики воспринимать действующие на них нагрузки без образования трещин. На практике для экспериментального определения критической величины интенсивности напряжения для керамических материалов  $K_{Ic}$  применяется ряд методов: метод индентации, метод изгиба образца с одиночной трещиной, метод изгиба образца с шевронным надрезом, метод изгиба образца с V-образным надрезом, и др.

В работе для определения трещиностойкости двух видов образцов конструкционных керамических материалов с составами:  $0,8 \text{ Al}_2\text{O}_3 + 0,17 \text{ ZrO}_2 + 0,03 \text{ Y}_2\text{O}_3$ ;  $0,6 \text{ Al}_2\text{O}_3 + 0,4 (\text{ZrO}_2 + 0,015 \text{ MgO})$ , использовали метод контролируемого внедрения индентора с использованием схемы Виккерса в соответствии со стандартом ASTM Standard C1421-09.

Выбранный метод в отличие от большинства выше перечисленных, является наиболее эффективным для определения  $K_{Ic}$  в условиях квазистатического нагружения, позволяющим сохранить керамическое изделие целым после исследований, и менее трудоемким при подготовке материала к экспериментам, и обработке данных. Данный метод основан на анализе геометрических конфигураций трещин, образующихся в приповерхностном слое керамического образца при внедрении алмазной пирамиды на приборах для измерения микротвердости или твердости по Виккерсу.

Величина параметра трещиностойкости  $K_{Ic}$  для образца керамики  $0,8 \text{ Al}_2\text{O}_3 + 0,17 \text{ ZrO}_2 + 0,03 \text{ Y}_2\text{O}_3$  составила  $4,87 \pm 0,02 \text{ МПа м}^{1/2}$  при величине твердости  $H_v = 17,34 \pm 0,2 \text{ ГПа}$ .

Величина параметра трещиностойкости  $K_{Ic}$  для образца керамики  $0,6 \text{ Al}_2\text{O}_3 + 0,4 (\text{ZrO}_2 + 0,015 \text{ MgO})$  составила  $4,06 \pm 0,02 \text{ МПа м}^{1/2}$  при величине твердости  $H_v = 16,5 \pm 0,2 \text{ ГПа}$ .

Полученные результаты хорошо согласуются с данными о твердости и трещиностойкости композитов  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -t- $\text{ZrO}_2$ . Поэтому можно с уверенностью сказать, что исследуемые композиты удовлетворяют требуемым показателям прочности.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 г. № П1247 от 07 июня 2010г.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Скрипняк

## МЕТОД МАГНИТОЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА НАНОСТРУКТУР Fe/Si

О. А. Максимова, Н. Н. Косырев, С. А. Лященко  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск  
Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Слоистые структуры ферромагнитный металл/полупроводник (в частности, Fe/Si) привлекают внимание исследователей как перспективный материал для спиновой электроники (спинтроники), где носители электрического тока поляризованы по спину, и возможен спиновый перенос наряду с зарядовым. Метод магнитоэллипсометрии позволяет исследовать как оптические, так и магнитные свойства таких структур. В данной работе проведены магнитоэллипсометрические измерения пленок Fe, напыленных на подложки монокристаллического кремния. Определены спектральные зависимости коэффициентов преломления и поглощения исследуемых пленок. Выявлено, что качественно спектральные зависимости коэффициентов преломления пленок Fe (ввиду малости их толщины) ведут себя аналогично спектральным зависимостям коэффициентов преломления подложки (рис. 1а):

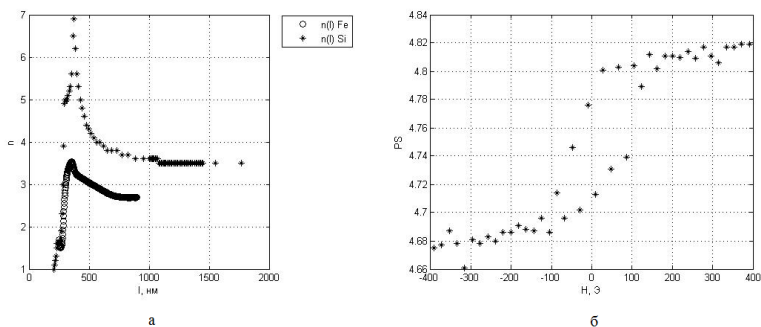


Рис.1 Магнитоэллипсометрические измерения пленок Fe на подложке Si

Исследуемые структуры обладают ферромагнитными свойствами (наблюдаются петли гистерезиса для эллипсометрических углов – см. рис. 1б), определены значения поля насыщения ( $\sim 300$ Э) и коэрцитивной силы ( $\sim 75$ Э).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. С. Г. Овчинников

# ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИХ НАНООБЪЕКТОВ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ НА НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ SI

Э. Ю. Матхонова

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящее время стремительно развиваются нанотехнологии на стыке наук, таких как биология, химия и физика. Особое внимание уделяют задаче о контролируемом расположении молекул ДНК на поверхности твердого тела. Существует несколько способов контролировать расположение биологических объектов, например, организация биообъектов посредством химического воздействия, с помощью предварительной обработки поверхности – электрическое или топографическое структурирование поверхности.

В данной работе рассматривается способ управления расположением молекул на основе селективного локального изменения электрофизических (зарядовых) свойств поверхности, на которой предполагается самоорганизация молекул ДНК. Этот способ является развитием предложенной работы Клинова Д. В. [1], где наблюдается самоорганизация молекул ДНК на графитовой подложке, покрытой слоем  $\text{NH}_3^+$ , в зависимости от дозы электрического заряда.

С помощью сканирующего электронного микроскопа, на кремниевой подложке с анодным окислом, прямым пучком высокоэнергетических электронов с энергией в диапазоне 1 — 30кэВ были созданы локальные заряженные области. После зарядки, спектроскопическим методом и методом атомно-силовой микроскопии [2] проводилось изучение распределения поверхностного потенциала. После нанесения молекул ДНК на образец, под действием электрического поля произошло перераспределение молекул ДНК на незаряженные области.

В результате работы на атомарно-гладкой поверхности кремния методом электронной микроскопии были созданы локально-заряженные области нанометровых размеров. Обнаружено упорядочение молекул ДНК на поверхности кремния с анодным окислом под действием внешнего поля.

---

1. Nano Letters 2007 Vol.7.No.12, p.3583-3587, Dmitry Klinov, Kirill Atlasov DNA Nanopositioning and Alignment by Electron-Beam-Induced Surface Chemical Patterning.

2. Описание работы Ntegra Aura часть 5. Многопроходные методы, [www.ntmdt.ru](http://www.ntmdt.ru)

Научные руководители – Д. А. Насимов, канд. физ.-мат. наук Д. В. Щеглов

## ИЗМЕРЕНИЕ СИЛ СВЯЗЫВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ПРИ ПОМОЩИ МЕХАНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ КВАРЦЕВОГО РЕЗОНАТОРА

И. А. Мик

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Вопрос о силах связывания между атомами или молекулами является ключевым как при рассмотрении динамики межчастичных взаимодействий, так и в системе рецептор – агент (адсорбент – адсорбат), в том числе и в биологических системах. Для определения силы отрыва было предложено использовать кварцевые микровесы.

Известный принцип действия микровесов на основе кварцевых резонаторов заключается в том, что добавление какой-либо массы ( $m$ ) на поверхность резонатора (тонкая,  $\sim 100$  мкм пластинка кварца АТ-среза) вызывает некий сдвиг частоты  $\Delta f$ , который может быть зафиксирован измерительной аппаратурой. При характерной резонансной частоте 10-15 МГц чувствительность весов может достигать величины  $\sim 1$  нг/см<sup>2</sup>, что соответствует монослою адсорбированного вещества. В данной работе предлагается использовать совсем иной принцип, а именно, динамически нарастающие колебания поверхности кварцевого АТ-резонатора. При плавном нарастании амплитуды колебаний (сканирование явлений отрыва) частица, прикрепленная к поверхности кварца, будет отрываться за счет инерционных сил, из значения которых легко получить силу разрыва связи. Данная методика позволяет с уверенностью измерять силы разрыва величиной порядка 10 пН. Так же как и метод атомно-силовой микроскопии, сканирование явлений отрыва не использует электромагнитного излучения, но имеет более простое аппаратное исполнение. Процесс сканирования требует минимальной пробоподготовки, может осуществляться в разных средах (в вакууме, на воздухе, в жидкости), занимает лишь несколько минут.

Научный руководитель – д-р хим. наук Ф. Н. Дульцев



# РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ В ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДАХ ХРОМА-МЕДИ

Н. И. Морозов, Е. В. Кортаев  
Новосибирский государственный университет  
Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

Соединения на основе дисульфида хрома-меди  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0-0.4$ ) представляют интерес для создания новых многофункциональных материалов, свойствами которых можно управлять, варьируя количество вводимых атомов ванадия. При этом свойства данных соединений значительно изменяются: проявляется колоссальное магнетосопротивление, изменяются параметры ионного транспорта, происходит переход металл-диэлектрик.

Несмотря на значительный интерес к данному классу соединений, электронная структура этих соединений еще слабо изучена. Существующие литературные источники оперируют с модельными представлениями об электронной структуре дисульфидов. В этой связи использование рентгеновской эмиссионной спектроскопии позволяет восполнить пробел в информации о структуре зон данных соединений. Применяя комбинационный принцип, можно, опираясь на рентгеновские эмиссионные линии, получить картину строения валентной зоны соединений в парциальных вкладах.

Для данных целей были получены мягкие рентгеновские  $L_{\alpha,1,2}$ -линии 3d-элементов (переход 3d-2p), рентгеновские спектры  $K_{\beta 1,x}$  (3p-1s) серы,  $K_{\beta 2,5}$ -спектры (3d-1s) металлов. Построение вышеперечисленных линий в единой энергетической шкале позволило выявить особенности строения потолка валентной зоны  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0-0.4$ ) в зависимости от изменения степени катионного замещения.

Представления о данных соединениях были сформированы на основе исследований порошковых и компактированных образцов, однако, исследования монокристаллических образцов показывают, что свойства монокристаллов дисульфидов хрома-меди отличаются от свойств соответствующих образцов. В этой связи в данной работе были исследованы как порошковые, так и монокристаллические образцы, проведено сопоставление их структур валентной зоны.

Для проведения исследований на рентгеновский спектрометр «УРС-2И» был установлен позиционно-чувствительный полупроводниковый детектор БЛПП-369, специально для которого были изготовлены система крепления, а также термостабилизированная флуоресцентная приставка.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Л. Н. Мазалов

## СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НАНОПЛЕНОК ДИОКСИДА ТИТАНА. АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ

Н. В. Нагирный<sup>1</sup>, М. В. Хомяков<sup>1,2</sup>, А. А. Брылякова<sup>3</sup>, А. С. Золкин<sup>1,2</sup>  
Новосибирский государственный университет<sup>1</sup>,  
Институт лазерной физики СО РАН<sup>2</sup>  
Институт катализа СО РАН<sup>3</sup>

Плёнки диоксида титана применяются в энергосберегающих покрытиях на архитектурных стёклах. Фотокатализаторы на основе диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ ) широко применяются для очистки воды и воздуха от токсичных органических веществ, хотя есть много вопросов в поисках их эффективности. Пленки  $\text{TiO}_2$ , нанесенные на различные поверхности, обеспечивают защитный и самоочищающий эффект, включая эффект «лотоса». Являясь полупроводником, пленки  $\text{TiO}_2$  проявляют фотокалитические свойства, которые сильно зависят от кристаллической структуры образца (для  $\text{TiO}_2$  наиболее эффективен — анатаз), метода синтеза, последующей процедуры обработки и т.д. По всем этим направлениям в настоящее время активно продолжаются исследования.

Данная работа направлена на исследование тонких наноплёнок  $\text{TiO}_2$ . Такие плёнки являются стартовыми в процессах создания покрытий большей толщины. Предполагается, что их структура может во многом определять дальнейший рост покрытий. С другой стороны, знания о структуре первых слоёв может дать возможность вырастить управляемую структуру: пористую или сплошную. Внимание уделено исследованию свойств первых слоёв (толщина, морфология, нанотвёрдость) с помощью атомно-силовой микроскопии («Нанотвёрдомер НаноСкан 3Д», Троицк, Россия) в зависимости от параметров синтеза. Исследованы оптические свойства пленок с помощью спектрофотометра «SHIMADZU UV3600» в диапазоне 180 нм – 3,3 мкм при различных толщинах пленки: от единиц нанометров и более. Использовались растровый электронный микроскоп «JSM-6700F» с разрешением не хуже 8-10 Å и просвечивающий электронный микроскоп «JEM-2010» с разрешением не хуже 1,4-2 Å. Описан синтез диоксида титана с помощью вакуумной плазменной ионно-лучевой технологии. Основные элементы системы: 1 — ионный ускоритель для очистки поверхности и её активации перед напылением слоёв титана; 2 — магнетронно-распылительная система для создания потока ионизованного потока паров титана; 3- источник активного кислорода. Обсуждаются особенности полученных результатов и перспективы дальнейших исследований по получению нанопокровов  $\text{TiO}_2$ .

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент А. С. Золкин

# ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ ПАЛЛАДИЯ В АТМОСФЕРЕ O<sub>2</sub> МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ (РЭМ) ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 500 – 1400 К

В. В. Никулин

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН

Палладий, как и другие металлы платиновой группы, широко используется в качестве катализатора в различных промышленно важных процессах [1]. В основном, палладий применяется в реакции каталитического сжигания CH<sub>4</sub> [2], поскольку высокой активностью обладает не только сам металл, но и его оксид PdO. Поэтому целью данной работы являлось исследование процессов взаимодействия кислорода с палладием. В качестве образцов использовались фрагменты поликристаллической фольги палладия (Pd(poly)), которые обрабатывались в смеси, содержащей 10 % O<sub>2</sub> и 90 % He, в течение 3 ч при температурах 500 – 1400 К и давлении 1 атм. Для анализа микроструктуры поверхности образцов применялся метод растровой электронной микроскопии (РЭМ), а для определения химического состава использовался метод рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС). В результате исследований на поверхности образцов при T = 800 – 1400 К удалось выделить 3 области, различающиеся уровнем сигнала во вторичных электронах – тёмные, серые (более яркие) и светлые (самые яркие). При T = 800 – 1000 К светлая область состоит из крупных кристаллов, размеры которых достигают ~ 100 – 200 нм при 800 К и ~ 200 – 400 нм при 900 К. На участках поверхности, покрытых серой областью, располагаются более мелкие кристаллы (до 100 нм), в то время как на тёмной области кристаллы не наблюдаются. Данный интервал температур характеризуется ростом концентрации кислорода в образцах Pd(poly), достигающей при T = 1000 К своего максимального значения (49 ат. % в светлой области, 47 ат. % в серой, 43 ат. % в тёмной). При T = 1100 – 1400 К содержание кислорода постепенно уменьшается и при T = 1400 К составляет, соответственно, 25 ат. %, 19 ат. % и 12 ат. %. На поверхности наблюдается образование и рост кристаллических фасеток. Таким образом, в ходе протекания реакции окисления Pd(poly) при T = 500 – 1400 К, было установлено, что с ростом концентрации растворённого кислорода в палладии увеличиваются размеры кристаллов PdO на его поверхности.

---

1. <http://www.platinum.matthey.com/applications/>.

2. D. Ciuparu, M. Lyubovsky, E. Altman. Catalytic combustion of methane over palladium-based catalysts/Catalytic Reviews 2002. Vol. 44, Pp 593-649.

Научный руководитель – канд. хим. наук А. Н. Саланов

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИЛАТОМЕТРИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКАНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ

А. В. Ондар, А.А. Хомушку  
Тувинский государственный университет

Использование современных методов технической физики для разработки и совершенствования различных технологических процессов является актуальной проблемой, решение которой требует изучения особенностей процессов и возможностей применения приборов для их исследований.

В данной работе рассматривается применение dilatометрического метода исследований для изучения спекания керамических изделий. Метод основан в измерении линейных размеров изделий при изменении температуры.

Установлено, что в начальном этапе термической обработки с 200 до 600 °С наблюдается увеличение размеров изделий, что связано с разрыхлением структуры обжигаемого материала в связи с выходом газообразных веществ и переходом /5 формы кварца в *a*. Для отдельных керамических масс на основе легкоплавких глинистых пород, удлинение образцов достигает 2 % в зависимости от содержания органики и песчаных частиц.

Выявлено, что во втором этапе dilatометрического исследования в пределах 600-800 °С наступает уменьшение объема изделий или укорочение образцов до первоначальных размеров, что связано с уменьшением размеров обезвоженных глинистых частиц и протеканием твердофазовых реакций, а также с началом образования расплава.

Третий последний этап изменения линейных размеров обжигаемых образцов связано со значительным уменьшением изделий или усадкой образцов, что обусловлено с накоплением жидкой фазы внутри черепка. Повышение доли жидкой фазы является благоприятным фактором для повышения прочности и других эксплуатационных характеристик материала.

Изучение характера dilatометрических кривых в геометрической интерпретации позволяет оптимизировать технологические параметры обжига (скорость подъема температуры, время и продолжительность изотермических выдержек, максимальная температура термической обработки) и разработать состав масс с лучшим спеканием при более низких температурах, а также направленно регулировать функциональные свойства керамических изделий.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. А. Чылбак

# УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗЛУЧАЕМОЙ МОЩНОСТИ МАГНИТНОГО ДИПОЛЯ В МАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

У. М. Оразбаева, А. С. Темирбаева

Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, г. Астана

Настоящая работа, обобщающая результаты научных работ авторов, посвящена исследованию углового распределения излучаемой мощности магнитного диполя в одноосных магнитных кристаллах.

В данной работе получены асимптотические решения напряжённости электромагнитного поля (ЭМП) из точного решения уравнений Максвелла для магнитного диполя в одноосном магнитном кристалле [1], направленного вдоль оси кристалла  $z$  :

$$\mathbf{E} = -\frac{k_n^2 m_0}{i\epsilon\epsilon_0\omega} [\nabla, (\mathbf{e}_z \Psi_1)], \quad \mathbf{H} = m_0 (\Psi_1 + (\mu_1/\mu - 1) \partial^2 / \partial z^2 \cdot \Psi_1 - (\mu_1/\mu) \partial / \partial z \nabla \Psi),$$

где  $\nabla$  - гамильтониан,

$$\mathbf{m}_0 = (0, 0, m_z), k_n = \omega \sqrt{\epsilon\epsilon_0 \mu_1 \mu_0}, \Psi_1 = -\sqrt{\frac{\mu}{\mu_1}} \frac{\exp(ik_n r')}{4\pi r'}, r' = r \sqrt{(\mu/\mu_1) \cos^2 \theta + \sin^2 \theta}.$$

Полученные асимптотические решения напряжённости ЭМП для магнитного диполя в дальней зоне совпадают с результатами работы [2]:

$$E_r = E_\theta = H_r = H_\varphi = 0, E_\varphi = \frac{k_0^2 m_z \exp(ik_n r') \cdot \sin \theta}{\epsilon\epsilon_0 \omega 4\pi r a}, H_\theta = -\frac{ik_0 m_z \exp(ik_n r') \cdot \sin \theta}{4\pi r \cdot \sqrt{a^3}} \cdot \sqrt{\frac{\mu}{\mu_1}}$$

где  $a = \sin^2 \theta + (\mu/\mu_1) \cos^2 \theta$ .

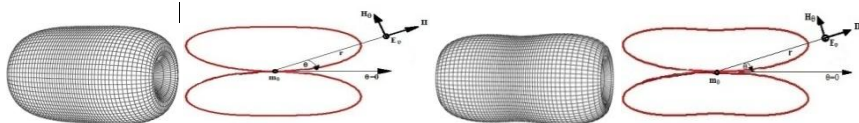


Рис.1 Диаграммы направленности магнитного диполя ( $\mu_1/\mu = 5$ ), ( $\mu_1/\mu = 9$ )

Особенностью научной работы является ее прикладная направленность, позволяющая использовать полученные результаты для решения конкретных задач и изучения физических процессов.

1. S. S. Sautbekov, Radiation of Electric and Magnetic Dipole Antennas in Magnetically Anisotropic Media / S. S. Sautbekov, I. A. Kanymgazyeva, P. Frangos // Electronics and electrical engineering. – No. 1 (97).-2010.-P.23-27.
2. А. И. Потехин, Излучение и распространение электромагнитных волн в анизотропной среде / А. И. Потехин – М.: Наука, 1971. – 176 с

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук И. А. Канымгазиева

## РАЗВИТИЕ МЕТОДИКИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО РЕНТГЕНОФАЗОВОГО АНАЛИЗА МИКРООБРАЗЦОВ

А. В. Панченко

Институт неорганической химии им. Н. В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Актуальной проблемой рентгенофазового анализа (РФА) является повышение точности проведения количественных измерений. В работе [1] предложена методика, основанная на использовании схемы Дебая-Шеррера. Показано, что применение двухкоординатного CCD-детектора позволяет экспрессно проводить РФА. Представляется интересным выяснить точность проведения количественных исследований на реальных многофазных образцах, когда состав каждой фазы точно неизвестен.

Исследованы три образца сплавов рений-иридий, которые по составу попадают в двухфазную область. Такие сплавы с соотношениями Ir/Re: 0,65/0,35, 0,70/0,30 и 0,75/0,25 были получены путем термобарической обработки (2000°C, 4 ГПа) смесей нанокристаллических порошков иридия и рения. Измерения проводили на приборе Bruker APEX DUO ( $\text{CuK}\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор, двухкоординатный CCD-детектор, внешние эталоны  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  и Au, температура 25°C, область углов  $2\theta$  5—90°, время накопления 5 мин.) по методике [2], согласно которой получали парные дифракционные снимки, при симметричных положениях детектора  $\pm 60^\circ 2\theta$ . Установлено, что все сплавы являются двухфазными. После уточнения параметров элементарных ячеек и оценки составов фаз (использована зависимость Ретгерса) были проведены полнопрофильное уточнение и количественный РФА. Установлено, что найденные соотношения металлов в сплавах совпадают с указанными исходными составами в пределах 5%. Особо следует отметить экспрессность методики позволяющей не только уточнять параметры элементарной ячейки, но и проводить количественный РФА частиц с размерами 0,2-0,4 мкм.

---

1. А. В. Алексеев, С. А. Громилов, Рентгенодифрактометрическое исследование поликристаллических образцов, представленных в микроколичествах, Журнал структурной химии, Т. 51, №4, 772 (2010).

2. А. В. Панченко, Развитие метода Дебая-Шеррера для уточнения параметров элементарной ячейки массивных поликристаллических образцов, Материалы XLIX международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс», Физика, 332 (2011).

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов,  
канд. хим. наук А. В. Алексеев

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЯМР-ПАРАМЕТРОВ ЯДРА $^{93}\text{Nb}$ В СЛОЖНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ НИОБИЯ

Е. С. Папуловский  
Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН

Ниобий и его соединения нашли своё применение в электронике и катализе. В катализе ниобий используется с 1970-80 годов в качестве носителя, активного компонента, ключевого промотора в целом ряде процессов (дегидрирование, конденсация, алкилирование, крекинг, окислительное дегидрирование, аммонолиз и т.д.). В последние годы большое развитие получила химия полиоксо ниобатов.

Все более возрастающий интерес к ниобию, предполагает развитие новых методов исследования. Весьма перспективным видится метод  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР (природное содержание изотопа ~100%, высокая чувствительность), но ввиду того, что спин ядра  $I = 9/2$ , спектры  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР характеризуются большой квадрупольной константой и анизотропией химического сдвига, поэтому до недавнего времени метод  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР практически не использовался для исследования соединений ниобия. В данной работе показано, что квантово-химические расчеты  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР параметров являются важным компонентом анализа спектров  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР.

В работе были исследованы такие сложные и важные для катализа соединения как полиоксо ниобат- $\text{K}_8\text{Nb}_6\text{O}_{19}$ ,  $\text{NbPO}_5$ ,  $\text{VNb}_9\text{O}_{25}$ ,  $\text{PNb}_9\text{O}_{25}$  и  $\text{AlNbO}_4$  методами твёрдотельной  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР-спектроскопии, а также теоретическими расчётами ЯМР-параметров в периодическом варианте методом GIPAW, выполненными в программном пакете CASTEP.

Таблица 1. Экспериментальные и теоретические  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР параметры  $\text{VNb}_9\text{O}_{25}$ .

	Nb центры	$-\delta_{\text{iso}}$ , ppm	$\Omega$ , ppm	K	$C_Q$ , MHz	$\eta_Q$	$\alpha, \beta, \gamma$
Эксп.	Nb1	1361	300	1	94.90	0	32,0,0
	Nb2	1177	201	0.863	32.42	0.64	9,69,3
	Nb3	1167	396	0.459	32.39	0.32	20,82,17
Теор.	Nb1	1386	308	1	94.90	0	90,0,90
	Nb2	1197	207	0.859	32.42	0.64	52,80,15
	Nb3	1187	407	0.448	32.39	0.32	131,70,24

В таблице 1 представлены  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР-параметры ниобиевых центров  $\text{VNb}_9\text{O}_{25}$ . Из экспериментальных  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР спектров, полученных в разных полях (9, 21Т) с разными скоростями вращения (от 0 до 60 кГц), не представляется возможным определить ЯМР параметры для всех центров, но эту задачу удается решить, привлекая теоретические расчеты.

Научные руководители — д-р хим. наук О. Б. Лапина,  
канд. физ.-мат. наук А. А. Шубин

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЧНОСТИ МАТЕРИАЛОВ КОНСТРУКЦИЙ

И. Ф. Подкомарная, В. Ю. Артамонов  
Саратовский государственный технический университет  
им. Ю. А. Гагарина

При оценке прочностной надежности элементов конструкций необходимо решать проблему длительной прочности — падение прочности материалов с течением времени под действием нагрузки [1]. Как известно, физический процесс разрушения можно условно разбить на три стадии: рассеянных разрушений, развитых трещин, интенсивный рост магистральной трещины. При инженерных расчетах на прочность конструкционных материалов принято предположение, что появление магистральной трещины равносильно полному разрушению.

В работе приводятся результаты исследований в области расчета длительной прочности элементов из нелинейных вязкоупругих полимеров, строятся математические выражения обобщенных критериев напряженно-деформированного состояния образцов с условиями разрушения. Согласно кинетическому подходу разрушение представляется как постепенно развивающийся во времени процесс изменения параметров микроструктуры частиц элемента при действии нагрузки. Такой подход целесообразен в связи с все большим применением конструкций из композитных материалов на основе полимеров, у которых задача прогнозирования работоспособности осложняется из-за необратимых и обратимых процессов изменений молекулярной и надмолекулярной структур в период эксплуатации [2].

Рассмотренные в данной работе критерии обладают значительной общностью, обусловленной интегральной зависимостью от истории деформации, и позволяют оценивать проявления вязкоупругости, длительную прочность материалов с учетом воздействия нагрузки и окружающей среды, исходя из взаимосвязанных, физически обоснованных гипотез вязкоупругости и длительной прочности.

---

1.Н. Ф. Морозов, Ю. В. Петров, Проблемы динамики разрушения твердых тел, СПб.: Изд-во СПбГУ (1997).

2.Е. В. Ломакин, Т. А. Белякова, Ю. П. Зезин, Нелинейное вязкоупругое поведение наполненных эластомерных материалов, Изв. Сарат. ун-та. Сер. Математика. Механика. Информатика. Т.8, с.56-65 (2008).

Научный руководитель – д-р техн. наук, проф. Е. Н. Артамонова



# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИНАМИКА ГЕТЕРОСПИНОВОГО КОМПЛЕКСА С НИТРОКСИЛЬНЫМ РАДИКАЛОМ: ЗАВИСИМОСТЬ ХАРАКТЕРА МАГНИТНОЙ АНОМАЛИИ ОТ СТРУКТУРЫ СОЛЬВАТНОЙ МОЛЕКУЛЫ

А. В. Полушкин

Международный томографический центр СО РАН

Исследования магнетизма гетероспиновых комплексов переходных металлов со стабильными органическими радикалами дают возможность выявлять новые типы магнитноупорядоченных систем, наряду с системами, проявляющие магнитные аномалии в парамагнитной области.

Недавно была синтезирована новая группа соединений, представляющих собой ароматические сольваты гетероспинового комплекса гексафторацетилацетоната меди(II) со спин-меченым бутилпиразолом состава  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}\cdot 0,5\text{Solv}$ , где  $\text{Solv} = 1,4\text{-(CH}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4$ ,  $1\text{-CH}_3\text{-4-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ ,  $1,4\text{-(CF}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4$ . Уникальная особенность кристаллов этих соединений заключается в их способности к *обратимой* структурной перестройке при изменении температуры, приводящей к существенному изменению – до 13% — объема элементарной ячейки, за что они были названы «дышащими кристаллами». Кроме того, структурные перестройки сопровождаются изменениями магнитных свойств, схожими по своему характеру со спин-кроссовером.

В этих кристаллах молекулы Solv содержат жесткий фрагмент — бензольное кольцо, геометрия которого не меняется с температурой, но отличаются заместителями. Поскольку локализация полостей, в которых располагаются Solv, одинакова, то характер изменения величины эффективного магнитного момента ( $\mu_{\text{eff}}$ ) от температуры определяется особенностями строения молекулы растворителя. Методом рентгеноструктурного анализа изучена температурная динамика структуры  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}\cdot 0,5(1\text{-CH}_3\text{-4-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4)$ , где Solv фактически является промежуточным по своему строению между *para*-ксилолом и 1,4-трифторметилбензолом. Сравнительный анализ структурной динамики, а так же зависимостей  $\mu_{\text{eff}}(T)$  для данного образца и сольватов с  $1,4\text{-(CH}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4$ ,  $1,4\text{-(CF}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4$  [1] показал, что температурный размах и резкость проявления магнитной аномалии схожи для всех трех соединений.

---

1. G. V. Romanenko and other, Relationship between the Thermally Induced Reorientations of Aromatic Solvate Molecules in  $\text{Cu}(\text{hfac})_2$  Nitroxide Breathing Crystals and the Character of the Magnetic Anomaly, Inorg. Chem., 2011, 50, 6597-6609.

Научный руководитель – д-р хим. наук Г. В. Романенко

## ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ЗЕРЕННО-СУБЗЕРЕННУЮ СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СМК НИКЕЛЯ

О. Г. Санарова<sup>1</sup>, П. В. Кузнецов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Томский политехнический университет

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Механические свойства субмикроструктурных (СМК) материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД), обусловлены их особой зеренно-субзеренной структурой. В процессе низкотемпературного отжига происходят изменения структуры, исследование которых представляет научный и практический интерес.

Работа посвящена развитию метода оценки распределения зеренно-субзеренной структуры (ЗСС) СМК простых металлов по размерам и оценке степени неравновесности их границ с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ).

Исследовали образцы СМК никеля, полученного методом равноканального углового прессования в состоянии поставки и после термического отжига при температурах 60° и 120°, 180° и 240°С. На основе СТМ данных были построены зависимости средних размеров зерна вдоль и поперек направления прессования образцов. Средние продольные размеры ЗСС СМК никеля в исходном состоянии больше средних поперечных размеров, что свидетельствует о неравносности структуры.

На поверхности образцов СМК никеля наблюдали блочные структуры, образующиеся в процессе ИПД. Отжиг образцов СМК никеля при T~60°С приводит к увеличению микротвердости и предела прочности. После отжига в интервале температур T~(120÷240)°С микротвердость и пластичность образцов изменяется незначительно. Отжиг при температуре T~240° приводит к росту размеров зерен и происходит за счет миграции большеугловых границ. При этом средний размер субзерен уменьшается. При исследовании субзеренной структуры наблюдается уменьшение степени неравносности структуры с ростом температуры, наличие пика в области температуры отжига T=120°С и последующее уменьшение средних размеров ЗСС с ростом температуры отжига до T=180°С. Обсуждается корреляция изменений структуры СМК никеля с изменением механических свойств. Сделан вывод об эффективности применения СТМ для исследования структуры СМК материалов.

---

1. Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М.: Логос, 2000, 272 с

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук П. В. Кузнецов

# АТОМНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ НИКЕЛИДА ТИТАНА ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ, ИССЛЕДОВАННАЯ МЕТОДАМИ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

В. О. Сёмин

Томский государственный университет  
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Перспективным методом улучшения эксплуатационных характеристик поверхностных слоев никелида титана является электронно-пучковое воздействие. Однако, представления о структуре модифицированного этим методом поверхностного слоя остаются неполными.

Целью данной работы является исследование микроструктуры в тонком поверхностном слое, испытывавшем циклическое расплавление и затвердевание при импульсном воздействии электронными пучками.

Гладкую поверхность массивного образца из сплава  $Ti_{49,5}Ni_{50,5}$  модифицировали низкоэнергетическим высокоплотным электронным пучком с плотностью энергии  $E=10\text{Дж/см}^2$ , 10 импульсами длительностью  $\tau=50\text{мкс}$  с частотой следования  $\nu=0,3\text{Гц}$ , при давлении рабочего газа  $P_{Ar}=0,035\text{Па}$ .

Использована методика приготовления образцов, при которой электронно-прозрачная крошка распространяется на глубину до нескольких десятков микрометров от облученной поверхности. При этом становится возможным проводить исследования атомно-кристаллической структуры материала на строго определенном удалении от поверхности, снимая дифракционные картины с шагом по глубине 25нм.

Подготовку образцов на установке ионного травления EM 09100IS (JEOL, Япония) и исследования на просвечивающем электронном микроскопе JEM 2100 (JEOL, Япония) проводили в центре коллективного пользования «НАНОТЕХ» (ИФПМ СО РАН, г. Томск). Расшифровка электронограмм выполнена в специально разработанной в Mathcad программе, анализирующей все возможные образующиеся в системе Ti-Ni фазы.

В облученном электронным пучком образце структура материала на глубине более 10мкм соответствует аустенитной фазе с кубической сингонией, присущей для необлученного образца на любой глубине от его поверхности. Дифракционные картины от поверхностного слоя (глубиной до 10мкм) не соответствуют той же сингонии, и характеризуется, предположительно, тетрагональными искажениями кристаллической решетки.

Научные руководители - д-р физ.-мат. наук, проф. Л. Л. Мейснер, канд. техн. наук А. А. Нейман.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственный контракт № 16.740.11.0140).

## **РАЗРАБОТКА ОСНОВ ПОЛУЧЕНИЯ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ В МАГНИЕВЫХ СПЛАВАХ МЕТОДОМ РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ**

М. А. Сухоярский, А. А. Козулин, А. С. Бодров, Н. В. Скрипняк  
Томский государственный университет

Для получения металлов и сплавов с объемной ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой широко применяются методы интенсивной пластической деформации (ИПД). В работе проводилось изучение процессов формирования УМЗ структуры в магниевом сплаве Mg2 численными и экспериментальными методами.

На основе результатов численного моделирования, реализованного с помощью метода конечных элементов в программном комплексе ANSYS Workbench, спроектирована оснастка для проведения равноканального углового прессования, исследовано деформационное поведение материала образца в процессе продавливания при разных температурных режимах и скоростях нагружения, оценены максимальные напряжения и деформации в образце и оснастке.

Следующим этапом исследования было изготовление оснастки пресс-формы, ее испытание и выбор оптимальных режимов прессования. Оснастка пресс-формы изготовлена разборной для удобства загрузки и извлечения образцов, контроля качества каналов, нанесения смазки. Материал оснастки сталь 40X с закалкой. Подбор режимов прессования проводился экспериментально. Был определен диапазон оптимальных температур прессования, подобрана смазка и скорость нагружения.

После прессования материалов при различных режимах проводился комплекс физико-механических исследований, который включал в себя: микроструктурный анализ, для определения размеров, форм зерен и их распределения в объеме образца; определение микротвердости; проведение исследований прочностных свойств при квазистатическом осевом сжатию и растяжению.

В результате проведенной работы заложены научные основы для проведения равноканального прессования магниевых сплавов, для измельчения структуры и изменения их физико-механических свойств, разработана и изготовлена оснастка. Проведен комплекс физико-механических исследований полученных материалов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 г. № П666 от 19 мая 2010 г., № П1247 от 07 июня 2010 г. и гранта Президента Российской Федерации МК-3066.2012.8.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Скрипняк

## ИЗУЧЕНИЕ XANES-СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ

М. М. Сыроквашин, Е. В. Кортаев  
Новосибирский государственный университет  
Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

Слоистые дисульфиды хрома-меди  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0-0.4$ ) являются потенциальными многофункциональными материалами, которые привлекают внимание исследователей в связи с широким спектром проявляемых ими физических эффектов: переход металл-диэлектрик, колоссальное магнетосопротивление, ионная проводимость, термоэлектрический эффект.

Вместе с тем, электронное строение данных соединений изучено слабо. Существующие работы оперируют с модельными представлениями. Это обстоятельство делает целесообразным применение рентгеновской абсорбционной спектроскопии для изучения этих веществ.

Ближняя тонкая структура рентгеновские спектров поглощения (XANES) несет в себе информацию о строении зоны проводимости.

В данной работе были исследованы рентгеновские К-спектры поглощения меди (1s-4p, 3d), хрома (1s-3d, 4p), ванадия (1s-3d) и серы (1s-3p, 3d) в  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0-0.4$ ). Спектры поглощения были зарегистрированы с использованием позиционно-чувствительного полупроводникового детектора БЛПП-369, для которого были специально разработаны абсорбционные приставки. Для проверки достоверности получаемых результатов аналогичные спектры были получены с помощью счетчика Гейгера-Мюллера. Для исследуемого класса соединений была рассчитана теоретическая структура спектров поглощения. К-спектры поглощения были привязаны к единой энергетической шкале, что позволило наблюдать изменения парциальных вкладов элементов в структуру дна зоны проводимости в зависимости от концентрации вводимых атомов ванадия.

Представления о данных соединениях были сформированы на основе исследований порошковых и компактированных образцов, однако, исследования монокристаллических образцов показывают, что свойства монокристаллов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0-0.4$ ) от свойств соответствующих порошков. По этой причине в данной работе для соответствующих по составу порошковых и монокристаллических образцов было проведено сопоставление структуры дна зоны проводимости.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Л. Н. Мазалов

## РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТА СОДЕРЖАЩЕГО КОБАЛЬТ И ВОЛЬФРАМ

И. О. Терёшкин

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящее время смеси карбида вольфрама и кобальта активно применяются в технике для изготовления инструментов, требующих высокой твёрдости и коррозионной стойкости, а также для износостойкой наплавки деталей, работающих в условиях интенсивного абразивного изнашивания с умеренными ударными нагрузками. Оба указанных металла являются тугоплавкими и получение материалов на их основе требует больших энергетических затрат. Однако, существует альтернативный способ – термическое разложение двойных комплексных солей (ДКС).

Рентгенографическое исследование продукта, полученного при нагревании  $[\text{CoEn}_3]_2(\text{W}_7\text{O}_{24})$  (En – этилендиаммин) в течение 1 часа в токе  $\text{N}_2$  при  $800^\circ\text{C}$ , проведено на дифрактометре Shimadzu ( $\text{CuK}\alpha$ -излучение, Ni-фильтр, схема Брэгга – Брентано). Индексирование полученной дифрактограммы было выполнено следующим образом. После определения максимумов отражений и перехода к межплоскостным расстояниям ( $d$ ), были найдены отношения  $d_i/d_1$ . В результате сравнения с теоретическими значениями была обнаружена гранецентрированная кубическая (ГЦК) ячейка. Ряд пиков оказался непроиндексированным. К ним была применена та же самая процедура, в результате была выявлена вторая фаза, имеющая объёмцентрированную (ОЦК) ячейку. Уточнение параметров элементарных ячеек привело к следующим значениям:  $a_{\text{ГЦК}}=10,899(2)$  Å,  $a_{\text{ОЦК}}=3,163(1)$  Å. Рентгенофазовый анализ проведен с использованием базы данных PDF [1]. Оказалось, что ГЦК-фаза представляет собой  $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$  [1, № 23-939] с размером частиц 86 нм, а вторая — твёрдым раствором на основе кристаллической структуры вольфрама ( $a_{\text{W}}=3,1648$  Å) с размером частиц 83 нм.

Таким образом, установлено, что при нагревании  $[\text{CoEn}_3]_2(\text{W}_7\text{O}_{24})$  в атмосфере  $\text{N}_2$  при  $T=800^\circ\text{C}$  (что гораздо ниже температур плавления Co и W) образуется композит, содержащий две нанокристаллические фазы — металлическую и карбидную.

---

[1] Powder Diffraction File. PDF-2/Release 2011. International Centre for Diffraction Data. USA. 2011.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов

# КЛАСТЕРНЫЕ МОДЕЛИ РАДИКАЛОПОДОБНОГО ЦЕНТРА $O^{1-}$ В СИСТЕМАХ $Ag_N O_M$ И $Ag_N O_{N-M} Cl_M$

Е. В. Трушин

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

Согласно принятой большинством исследователей концепции, активным центром ответственным за протекание реакции эпексидирования этилена на серебряных катализаторах является атомарная электрофильная форма адсорбированного кислорода  $O^{1-}$  [1]. Хотя предлагаются также и молекулярные модели данных центров [2].

Из-за невозможности использования традиционных методов исследования поверхности в условиях «реального» катализа электронная и геометрическая структура данных активных центров остается до конца неясной. Более того, непонятны механизмы стабилизации этих активных центров на серебряной поверхности.

В теоретических работах [3,4] в качестве «эпексидирующего» кислорода предложена модель атомарного кислорода в радикалоподобном состоянии  $O^{1-}$ . Рассмотрение было лишь качественным на основе простейших кластерных моделей  $Ag_2O$  и  $Ag_3O$ , при этом радикалоподобный кислород реализовывался в возбужденном состоянии данных систем.

В настоящей работе с помощью DFT расчетов показана возможность двух способов стабилизации радикалоподобного кислорода  $O^{1-}$  в системе кислород-серебро: (1) пересыщение системы кислородом; (2) допирование системы хлором.

В качестве модельных систем такого типа выбраны малые кластеры  $(AgO)_n$  ( $n=1-4,6$ ) и  $Ag_n Cl_{n-m} O_m$  ( $n=2-6$ ,  $m=1-3$ ), для которых энергетически выгодной оказывается реализация радикалоподобного кислорода  $O^{1-}$ . В расчетах предсказано, что данные кластеры являются ферромагнитными с неспаренными электронами, локализованными на атомах кислорода.

Аналогичный радикалоподобный кислород  $O^{1-}$  теми же двумя способами был получен на примере двух моделей серебряной поверхности, насыщенной кислородом и допированной хлором.

- 
1. V.I. Bukhtiyarov et al., Journal of Catalysis 238, 260 (2006).
  2. A.I. Boronin et al., Kintics and Catalysis 40, 653 (1999).
  3. E.A. Carter and W.A. Goddard, Journal of Catalysis 112, 80 (1988).
  4. S.Ph. Ruzankin, I.L. Zilberberg, and G.M. Zhidomirov, Research on Chemical Intermediates 30, 75 (2004).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук И. Л. Зильберберг

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НАНОКРИСТАЛЛОВ Si В МАТРИЦЕ SiO<sub>2</sub>, ОТОЖЖЕННЫХ ПРИ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ ДАВЛЕНИИ

П. Ю. Тяпкин

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Одним из основных направлений в области исследования полупроводниковых структур является поиск материалов, пригодных для создания высокоэффективных излучающих приборов. Таковыми могут являться различные наноструктуры на базе кремния. Объемный кремний – основной материал современной полупроводниковой промышленности и самый изученный полупроводник. Но его применение в качестве светоизлучающего материала ограничено из-за низкой эффективности излучательной рекомбинации, вследствие того, что кремний является непрямозонным полупроводником. Использование низкоразмерных структур позволяет увеличить вероятность оптических переходов и повысить эффективность люминесценции.

Нанокристаллы кремния, сформированные методом имплантации ионов Si<sup>+</sup> в SiO<sub>2</sub> с последующим термическим отжигом, являются многообещающими кандидатами на роль светоизлучателей. Эффективная люминесценция в видимой области спектра наблюдается даже при комнатной температуре. Данный метод позволяет с высокой точностью контролировать концентрацию и распределение атомов кремния, внедренных в SiO<sub>2</sub> матрицу. Структуры, полученные таким методом, стабильны, а сам метод совместим с современными технологиями промышленного производства сверхбольших интегральных схем.

Изменение параметров (температура отжига, давление), при которых формируется структура, ведет к изменению положения и формы спектра. Таким образом, изучение данного явления позволит создавать кремниевые структуры с желаемыми свойствами.

В работе исследуется температурная зависимость спектров стационарной фотолюминесценции (ФЛ) двух серий образцов: отожженных при одинаковой температуре, но разных давлениях и сформированных при одинаковом давлении, но различных температурах отжига. Возбуждение осуществляется He-Cd лазером с длиной волны 325 нм. Для стационарной ФЛ при комнатной температуре замечено, что при повышении давления (при одинаковой температуре отжига) и при повышении температуры отжига образцов (при одинаковом давлении) максимумы ФЛ смещаются в сторону больших энергий.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев



## ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕКОМПОЗИЦИИ ПЛЁНОК $\text{GeO}_x$ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

И. В. Ческовская

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Полупроводниковые нанокластеры, внедрённые в широкозонную диэлектрическую матрицу, интересны, как с точки зрения фундаментальных исследований, так и с точки зрения их практического применения в приборах микро- и оптоэлектроники.

Нанокристаллы и аморфные нанокластеры кремния в диоксиде кремния – уже довольно хорошо исследованный объект.

Схожая гетеропара – Ge в  $\text{GeO}_2$  изучена гораздо слабее. Она имеет важное преимущество – энергетическая щель диоксида германия гораздо меньше, чем у диоксида кремния, и инжекция носителей заряда в гетероструктуры Ge/ $\text{GeO}_2$  гораздо эффективнее. Это важно для светоизлучающих диодов и tandemных солнечных элементов.

Пленки  $\text{GeO}_x$  представляют собой твердый раствор германия и диоксида германия, причем германий в пленке может быть как в виде кластеров, так и виде отдельных атомов германия, включенных в матрицу оксида.

Данная работа посвящена исследованию начальной стадии распада субоксида германия в пленках  $\text{GeO}_x$  и в многослойных наногетероструктурах  $\text{GeO}_x/\text{SiO}_2$ . Целью работы было развитие технологии приготовления гетероструктур  $\text{GeO}_2$  с нанокристаллами германия предельно малых размеров, до 2 нм.

Исследования проводились с применением методов спектральной эллипсометрии, комбинационного рассеяния света, ИК-спектроскопии. Плёнки подвергались печному отжигу.

ИК-спектроскопия показала некоторые изменения в структуре плёнок  $\text{GeO}_x$  после отжига, произошел некоторый сдвиг полосы поглощения. Первоначально германий был распределен случайно по  $\text{GeO}_2$ -матрице. При отжиге часть избыточного атомарного германия собралась в кластеры. Тем самым концентрация связей Ge-O уменьшилась, что и привело к наблюдаемому сдвигу полосы поглощения.

В работе показано, что в первоначальном состоянии германий в пленках распределен хаотично. Печной отжиг приводит к изменению структуры пленок  $\text{GeO}_x$  с образованием нанокластеров германия.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук В. А. Володин

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ТВЁРДОГО ТЕЛА ИОНИЗИРОВАННЫМИ ГАЗОВЫМИ КЛАСТЕРАМИ

А. А. Шмаков

Новосибирский государственный университет

С момента начала изучения газовых кластерных ионных пучков уже прошло более 25 лет, но исследование возможного применения ведутся и по сей день. Взаимодействие ускоренных кластеров с поверхностью мишени характеризуется выделением очень высокой энергии на достаточно малой площади поверхности и вызывает нелинейные эффекты, которые не наблюдаются при традиционной обработке отдельными ионами. Кластерно-ионная технология обладает уникальными характеристиками, позволяющими производить модификацию поверхности любых твёрдых.

Большое практическое применение может иметь приповерхностная имплантация атомов, высокоскоростное напыление, сглаживание поверхности до атомарного уровня и низкотемпературное формирование тонких плёнок. При различных энергиях, различных составах газовой кластерной смеси и направлениях потока можно добиться преобладания интересующего эффекта.

На экспериментальном стенде ЛЭМПУС [2], построенном в ОПФ НГУ, были проведены работы по изучению формирования кластеров и проведены исследования по доставке и фокусировке кластерных потоков к поверхности модифицируемого материала. Изучен массовый состав сформированных в сверхзвуковой струе пучков ионизированных газовых кластеров с различными энергиями и при различных давлениях в сверхзвуковом сопле. Проведена первичная модификация поверхности мишени и интерпретация полученных результатов. Установлена зависимость между энергией кластерного пучка и средней шероховатостью модифицированной поверхности.

Полученные результаты позволяют определить наиболее перспективные пути дальнейшего изучения и применения технологии кластерной модификации материалов с использованием современных методов исследования твёрдого тела.

---

1. I. Yamada, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 257 (2007) 632.

2. N. G. Korobeishchikov, A. E. Zarvin, et al. Plasma Chem. Plasma Proc. 25 (2005) 319.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Н. Г. Коробейщиков

# ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША НА ВСЕХ СТАДИЯХ ПРИГОТОВЛЕНИЯ

А. С. Андреев, И. И. Силенцова

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН

Новосибирский государственный университет

Проблемы энергетики всегда занимали особое место в списке научных задач. Принимая во внимание то, что запасы нефти хоть и велики, но они всё же конечны, можно поставить вопрос о получении жидких углеводородов, например, из биомассы. Одним из примеров решения данной задачи является синтез Фишера-Тропша (СФТ) – получение жидких углеводородов из синтез газа СО, который, в свою очередь, получают путем неполного окисления каменного угля, природного газа или биомассы. Катализаторами процесса служат металлы VIII группы, но в промышленности нашли применение в основном Со и Fe, при этом наиболее ценные продукты получаются при использовании кобальта.

Одним из методов исследования строения кобальтовых катализаторов СФТ является метод  $^{59}\text{Co}$  ЯМР во внутреннем поле образца, который позволяет изучать не только правильные упаковки металлического кобальта (ГЦК и ГПУ), но и различные дефекты упаковки (д. у.) – деформационные и двойниковые [1-2].

Целью работы было исследование влияния различных модификаций оксида алюминия на строение металлического кобальта в активированном катализаторе (т.е. после восстановления образца) [3]. Возможность проследить за строением образца на всех этапах приготовления (для невосстановленных образцов при помощи  $^{27}\text{Al}$  MAS ЯМР) даёт интересные результаты о взаимодействии между носителем и активным компонентом. В ходе приготовления происходит изменение строения носителя, которое влияет на строение активного компонента, а также может затруднять восстановление кобальта.

---

1. Sort, J., et al., *Role of stacking faults in the structural and magnetic properties of ball-milled cobalt* Phys. Rev. B, 2003. **68**: p. 014421-1-014421-7.

2. Speight, R., et al., *( $^{59}\text{Co}$ ) NMR study of the allotropic phase transformation in small ferromagnetic cobalt particles*. Physical Review B, 2009. **79**(5).

3. Murty, A.N., et al., *Zero-field NMR studies of physically admixed Co/Co-ThO<sub>2</sub> ZSM-5 catalysts*. J. Appl. Phys., 1987. **61**(8): p. 4361-4363.

Научный руководитель – д-р хим. наук О. Б. Лапина

## **ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА РАЗНЫХ ФОРМ И РАЗМЕРОВ**

Н. С. Бажанова

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Одной из задач бионанотехнологии является синтез наночастиц (НЧ) заданных размеров и формы, стандартизованных для использования в биомедицине. Размеры НЧ являются важной характеристикой, однако их прямое измерение не всегда возможно, среди непрямых методов широко распространён метод фотонной корреляционной спектроскопии (ФКС). Поскольку метод ФКС является косвенным, возникает вопрос о точности получаемых размеров и их соответствии результатам прямых измерений.

Задачей данной работы является нахождение коэффициента соответствия между размером НЧ, определенным с помощью прямого измерения, и размером их гидродинамического диаметра, определенным с помощью косвенного метода измерения (ФКС).

НЧ золота синтезировали с помощью метода цитратного восстановления. При разных соотношениях золота и стабилизатора (цитрат натрия) получали частицы различных размеров. Изучение морфологии и измерение размеров полученных НЧ, сорбированных на формваровую подложку, проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа (JEM 1400, JEOL, Япония) при ускоряющем напряжении 80 кВ. Цифровые изображения получали с помощью цифровой камеры Veleta (SIS, Olympus, Германия).

Проведенное электронно-микроскопическое исследование выявило НЧ сферической формы. Суспензии НЧ были гомогенны, и, в зависимости от условий синтеза, средние размеры НЧ составляли 14 и 20 нм. Определение среднего гидродинамического диаметра этих же НЧ с помощью метода ФКС (Malvern ZS Nano, Англия) установило его величину равной 20 и 25 нм соответственно. Таким образом, данные прямого и косвенного измерений размеров НЧ золота существенно различаются.

Для получения коэффициента соответствия между размерами, определенными методом ФКС и прямым измерением, были использованы НЧ золота двух размеров с иммобилизованным на поверхности НЧ белком (БСА) и полиэтиленгликолем, в качестве растворителя использована дистиллированная вода и фосфатный буфер pH 7,2-7,4. Полученные первичные данные обработаны с помощью авторской программы, сопоставлены с данными измерений на приборе Malvern ZS Nano.

Научные руководители – канд. хим. наук И. А. Пышная;  
д-р биол. наук Е. И. Рябчикова

## ЭФФЕКТЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ИСКУССТВЕННЫХ АЛМАЗОВ

С. С. Брагин

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Создание квантового компьютера является многообещающим направлением развития современной физики. Использование так называемых NV-центров в алмазе представляется одним из наиболее перспективных подходов к решению данной проблемы [1].

Отрицательно заряженный NV-центр является дефектом кристаллической решетки алмаза, представляющим собой атом азота и расположенную рядом вакансию с дополнительно захваченным электроном. В качестве квантового бита предполагается использовать его спиновое состояние. Считывание информации осуществляется с помощью регистрации фотолюминесценции, которая зависит от приложенных СВЧ и постоянных магнитных полей.

В работе исследовалась зависимость интенсивности люминесценции алмазов, содержащих NV-центры, от величины внешнего магнитного поля. Использовался монокристалл алмаза, изготовленный методом HPHT. Образец облучался  $10^{18}$  электронов/см<sup>2</sup> с энергией 3 МэВ, затем отжигался в течение 2 часов при  $T=800$  °С. Возбуждение люминесценции производилось лазером с длиной волны 532 нм. Зависимость интенсивности люминесценции образца от магнитного поля исследовалась на двух установках. На одной эта зависимость определялась прямым измерением интенсивности люминесценции, на другой – с использованием модуляции магнитного поля и синхронного детектирования.

Были зарегистрированы общий относительно плавный спад люминесценции с ростом магнитного поля, а также резкие спады при величинах поля 0 Гс,  $\approx 500$  Гс и  $\approx 1000$  Гс. Высокопольные линии обусловлены антипересечением триплетных уровней NV-центра в возбужденном и основном состояниях [2]. Линия в нулевом поле не описана в научной литературе. Для выяснения ее природы проведены исследования зависимости магнитного эффекта от параметров облучения.

---

1. F. Jelezko et al., Observation of coherent oscillation of a single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 130501 (2004).

2. L. J. Rogers et al., Time-averaging within the excited state of the nitrogen-vacancy centre in diamond, *New J. Phys.* **11**, 063007 (2009).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. В. Анищик

# ИССЛЕДОВАНИЕ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ В ФОТОХИМИИ $\text{Ni}(\text{S}_2\text{COEt})_2$ В ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Д. С. Будкина, В. Ф. Плюснин, А. В. Коломеец  
Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Дитиолатные комплексы переходных металлов обладают широким спектром применения в различных областях науки и промышленности [1]. Исследование спектральных и кинетических характеристик промежуточных частиц, образующихся в фотохимических превращениях комплексов данного класса, позволит объяснить многие химические свойства и механизмы их действия и даст возможность существенно расширить область применения этих соединений.

В данной работе методами фемто- и наносекундного лазерного импульсного фотолиза, оптической спектроскопии и кинетического анализа изучены быстрые процессы и природа промежуточных частиц в фотохимии комплекса  $\text{Ni}(\text{S}_2\text{COEt})_2$  в растворе  $\text{CCl}_4$ . На основе полученных данных был предложен механизм фотохимических превращений ( $\text{Xan} \equiv \text{S}_2\text{COEt}$ ):

- 1)  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})_2 + \text{CCl}_4 \xrightarrow{h\nu} \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet+}) + \text{CCl}_4^{\bullet-}$
- 2)  $\text{CCl}_4^{\bullet-} \rightarrow \text{Cl} + \text{CCl}_3^{\bullet}$
- 3)  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet+}) + \text{Cl}^- \rightarrow \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet})\text{Cl}$  (A)
- 4)  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet})\text{Cl} + \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})_2 \rightarrow [\text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet})\text{ClNi}^{\text{II}}(\text{Xan})_2]$  (D)
- 5)  $\text{D} + \text{D} \rightarrow 2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})_2 + 2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})\text{Cl} + (\text{S}_2\text{COEt})_2$
- 6)  $2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})\text{Cl} \rightarrow \text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})_2 + \text{Ni}^{\text{II}}\text{Cl}_2$

Показано, что фотохимия  $\text{Ni}(\text{S}_2\text{COEt})_2$  связана с быстрым переносом электрона с возбужденного комплекса на ближайшую молекулу растворителя с образованием интермедиата  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{Xan})(\text{Xan}^{\bullet})\text{Cl}$  (A). Интермедиат А исчезает в реакции с исходным комплексом с формированием димера D, который за ~10 мс рекомбинирует с образованием конечных продуктов: комплекса  $\text{NiCl}_2$  и молекулы дисульфида  $(\text{S}_2\text{COEt})_2$ .

---

1. Fu Ping Hao, Ewen Silvester, Geoffrey David Senior. Spectroscopic characterization of ethyl xanthate oxidation products and analysis by ion interaction chromatography. // Anal. Chem. 2000, 72 pp. 4836-4845

Научные руководители – д-р хим. наук, проф. В. Ф. Плюснин, А. В. Коломеец

# АДСОРБЦИЯ ВОДЫ НА АЛЮМИНОФОСФАТАХ: РАВНОВЕСИЕ И КИНЕТИКА

И. С. Гирник

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

Алюминофосфаты (АФ) – относительно недавно открытый класс микропористых молекулярных сит [1]. В литературе было обнаружено, что для некоторых АФ и их метал-замещенных аналогов адсорбция воды характеризуется S-образной изотермой [2]. Материалы с такими изотермами могут представлять большой интерес для преобразования низкотемпературного тепла [3], что и послужило мотивацией для проведения данного исследования.

Целью работы является изучение адсорбционного равновесия чистых и кремний-замещенных АФ с парами воды, а также кинетики его установления в диапазоне температур и давлений, представляющих интерес для преобразования тепла. Изотермы адсорбции воды измеряли при  $T = 20, 35$  и  $50$  °С и давлении  $0 — 40$  мбар, используя изотермический дифференциальный метод.

Оказалось что изотермы адсорбции воды на  $AlPO_4-31$ ,  $SAPO-11$  и  $SAPO-31$  представляют собой гладкие кривые, так что величина адсорбции монотонно растет при увеличении давления. Изотермы адсорбции воды на  $AlPO_4-5$  и  $AlPO_4-11$  имеют S-образную форму, и резкий рост адсорбции наблюдается в относительно узком диапазоне давлений:  $0.25-0.3$  и  $0.1-0.15$ . Десорбция протекает при меньших относительных давлениях:  $0.2-0.25$  и  $0.07-0.12$ . Равновесные кривые адсорбции не инвариантны ни по отношению к относительному давлению  $P/P_0$ , ни к адсорбционному потенциалу  $\Delta F = -R \cdot T \cdot \ln(P/P_0)$ . Изостеры адсорбции, построенные из экспериментальных изотерм  $AlPO_4-11$ , представляют собой прямые линии в координатах  $\ln P$  от  $-1/T$ . Их наклон определяется теплотой адсорбции, которая уменьшается при увеличении количества поглощенной воды (от  $0,03$  до  $0,09$  г/г) с  $60$  до  $51$  кДж/моль.

Построен термодинамический цикл адсорбционного теплового насоса на основе исследованных АФ и оценены его эффективность и удельная мощность. Для оценки последней, динамика адсорбции воды изучена в условиях, близких к реальным условиям цикла.

- 
1. S. T. Wilson et al, J. Am. Chem. Soc. 104 (1982) 1146-1147.
  2. J. Kornatowski, C. R. Chime. 8 (2005) 561-568.
  3. Yu. I. Aristov, J. Chem. Engn. Japan, 2007, v. 40, N 13, pp. 1241-1251.

Научный руководитель — д-р хим. наук, проф. Ю. И. Аристов

# **ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОГО АНТИПИРЕНА НА КИНЕТИКУ РАЗЛОЖЕНИЯ И СТРУКТУРУ ПЛАМЕНИ ПОЛИЭТИЛЕНОВ РАЗЛИЧНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ВЕСА**

М. Б. Гончикжапов

Новосибирский государственный университет  
Институт химической кинетики и горения СО РАН

Полиэтилен один из самых распространенных материалов в современном мире. Существует много видов полиэтилена с различными молекулярными весами. В [1] было исследовано термическое разложение и горение сверхвысокомолекулярного полиэтилена с добавками трифенилфосфата (ТФФ). В данной работе объектами исследования стали полиэтилены низкого давления (ПНД) с молекулярными весами ( $MW_1=10^5$ ,  $MW_2=3,8*10^5$ ). Целью данной работы являлось установить влияние ТФФ на горючесть полиэтилена в зависимости от его молекулярной массы.

Методами динамического масс-спектрометрического термического анализа и термогравиметрии исследовано влияние ТФФ на процесс термического разложения ПНД при высоком ( $150\text{ }^\circ\text{C}/\text{с}$ ) и низком ( $0,17\text{ }^\circ\text{C}/\text{с}$ ) темпах нагрева в инертной среде. Исследована кинетика процесса разложения ПНД и смеси ТФФ/ПНД (10/90 масс.%). Определены энергии активации реакции разложения и предэкспоненциальные множители в аррениусовском виде для константы скорости. Исследована структура диффузионного пламени пресованных образцов ПНД. Получен температурный профиль в пламени. Методом хромато масс-спектрометрии определен состав продуктов в ближней зоне пламени при диффузионном горении и при термическом разложении в инертной среде.

Установлено влияние ТФФ на полиэтилены с различными молекулярными весами.

---

1. М.Б. Гончикжапов, А.А. Палецкий, О.П. Коробейничев. «Исследование процесса термического разложения и горения сверхвысокомолекулярного полиэтилена с добавлением трифенилфосфата». Вестник НГУ. Серия: Физика. 2011. Том 6. Выпуск 4. стр. 125-134.

Научные руководители – канд. физ.–мат. наук А. А. Палецкий, д-р. физ.-мат. наук О. П. Коробейничев



**ПАРАМАГНИТНЫЙ ЯМР:  
ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ,  
КОНФОРМАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ И ТЕРМОСЕНСОРНЫХ  
СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНИДОВ С КРАУН-ЭФИРАМИ,  
ДОТА И 2,2'-БИПИРИДИЛОМ В РАСТВОРАХ**

А. В. Горюнова

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

В парамагнитных комплексах лантанидов (Ln) за счет лантанид-индуцированных сдвигов (ЛИС) в спектрах ЯМР на несколько порядков расширяется диапазон доступных для измерения констант скоростей химического обмена (ХО) по сравнению с диапазоном констант скоростей в родственных диамагнитных соединениях. Использование динамического ЯМР (ДЯМР) для определения внутримолекулярной динамики лигандов парамагнитных комплексов Ln можно рассматривать как новый методический прием изучения кинетики процессов ХО, протекающих в лигандах, со своей характерной областью применения. Этот методический подход проиллюстрирован рядом примеров ДЯМР-исследования кинетики межмолекулярной и конформационной динамики электронейтральных краун-эфиров, 2,2'-бипиридила и ДОТА-подобных лигандов, а также анионов нитратных групп, бета-дикетонов и изо-дибутилдитиофосфинов, координированных с Ln в растворах (где Ln= Ce, Pr, Nd, Eu, Tb, Tm, Ho, Dy и Yb, а ДОТА= 1,4,7,10-тетрааза-1,4,7,10-тетраакис(карбоксометил) циклододекан). В частности обнаружено, что применение 2D-EXSY существенно упрощает отнесение сигналов в сложных системах (например, в системах с вырожденным многопозиционным ХО) по сравнению с 1D ДЯМР. Исследована конформационная динамика в комплексах ДОТА с Pr, предположительно обусловленная инверсией аниона макроцикла ДОТА. В результате исследования зависимости ЛИС от парамагнитных свойств катионов лантанидов с помощью анализа  $\Delta\delta/\langle S_z \rangle$  от  $k(\text{Ln})/\langle S_z \rangle$  обнаружена изоструктурность ряда комплексов  $[\text{Ln}(\text{NO}_3)_3(18\text{-краун-6})]$ , где  $k(\text{Ln})$ - константы Блани. Полученные экспериментальные результаты по исследованию парамагнитных свойств некоторых разнолигандных соединений Ln свидетельствуют о перспективности их практического применения для решения термометрических задач в жидких средах и для МРТ в качестве термочувствительных контрастных ЯМР реагентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 11-03-00197а).

Научный руководитель – д-р хим. наук С. П. Бабайлов

# ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА В ФОСФОЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ

А. А. Дмитриев

Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Фосфолипидные мембраны являются важной частью каждой живой клетки. Их исследование представляет собой актуальную задачу, т.к. позволяет понять свойства, структуру и участие в процессе метаболизма клетки биологических мембран.

Одним из методов исследования мембран является комбинационное рассеяние света (КРС). Высокочастотная область спектров КРС мембран к настоящему моменту достаточно хорошо изучена. В то же время данные по низкочастотной области КРС ( $< 200 \text{ см}^{-1}$ ) практически отсутствуют. Поэтому интересной задачей представляется исследование низкочастотных спектров КРС. Эти спектры позволяют получать информацию о колебательном и релаксационном отклике в диапазоне частот 30-3000 ГГц. Эта область включает акустические колебания двойного липидного слоя как целого. Знание частот этих колебаний дает возможность определить скорость звука в мембране. Также представляет интерес поведение НЧ спектров при фазовом переходе в фосфолипидных мембранах.

В нашей работе производились измерения низкочастотных спектров КРС мембран в широком температурном диапазоне для 2-х образцов: DPPC и POPC. В полученных спектрах наблюдается резкое увеличение значения максимума восприимчивости в низкочастотной области выше температуры плавления воды и его дальнейший рост с повышением температуры. Получены значения частоты и амплитуды максимума восприимчивости. Сделан вывод о значительном вкладе воды в спектр КРС.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. В. Суровцев

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТРАНСПОРТА ВОДЫ В ХРУСТАЛИКЕ ГЛАЗА МЕТОДАМИ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ

Е. А. Добрецов

Международный томографический центр СО РАН

Глазной хрусталик обладает уникальными оптическими свойствами. Он способен изменять свою форму и коэффициент преломления, что позволяет индивиду фокусировать взгляд на объектах, находящихся на различном расстоянии от него. Эти свойства обеспечиваются особенностями строения клеток, входящих в состав хрусталика. Отсутствие у клеток ряда жизненно необходимых органелл делает их зависимыми от транспорта питательных веществ извне, а отсутствие кровеносных сосудов в хрусталике говорит о существовании механизма доставки питательных веществ, отличающемся от обычного питания посредством крови.

Исследование процессов транспорта питательных веществ в хрусталике глаза необходимо для понимания причин образования старческой катаракты и старческой дальнозоркости и для разработки лекарств от этих заболеваний. Несмотря на многочисленные исследования *in vitro* в этой области, механизм транспорта питательных веществ внутрь хрусталика и вывода продуктов метаболизма до конца не ясен.

Недостатком большей части проведенных исследований является инвазивность использованных методов. Методы магнитно-резонансной томографии лишены этого недостатка и обладают широкими возможностями исследования. Они позволяют измерять широкий спектр характеристик образца и строить двумерные и трехмерные изображения исследуемого объекта, в частности – получать 2М и 3М диффузионные карты.

В данной работе исследуется процесс транспорта и определяется наличие возможных диффузионных барьеров и анизотропии диффузии воды в хрусталике глаза методами магнитно-резонансной томографии. Полученные результаты позволят сделать выводы о транспорте растворенных в воде питательных веществ. На основе сигнала ЯМР протонов воды получены серии двумерных изображений *in vitro* хрусталика глаза годовалой лабораторной крысы OXYS. Проведен анализ полученных серий, сделаны выводы относительно распределения спиновой плотности ядерных спинов протонов воды и их связи с окружающими макромолекулами.

Научный руководитель – д-р. хим. наук, проф. И. В. Коптюг

# ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНЕТИКАХ $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R}}$ МЕТОДОМ ЭПР

И. Ю. Дроздюк

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Исследование термо- и светопереключаемых молекулярных магнетиков актуально не только с фундаментальной точки зрения, но и благодаря потенциальному применению в области нанотехнологий. Новое семейство «дышащих кристаллов»  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R}}$  основано на комплексах гексафторацетилацетонатов меди с пиразолил-замещенными нитронил-нитроксильными радикалами. Эти соединения претерпевают обратимые перестройки, которые сопровождаются изменением величины обменного взаимодействия между спинами меди и нитроксила на один-два порядка, т.е. соединение переключается между двумя спиновыми состояниями: сильносвязанным и слабосвязанным. Ранее были разработаны подходы для успешного изучения этих соединений методом ЭПР.

В данной работе мы исследовали межкластерное обменное взаимодействие в соединениях семейства «дышащих кристаллов» методом ЭПР Q-диапазона. В предыдущих исследованиях было показано, что вследствие делокализации спиновой плотности на NO-фрагментах нитронилнитроксильных радикалов имеет место межкластерное обменное взаимодействие между соседними полимерными цепями. В результате этого, направление магнитной цепи принципиально не совпадает с направлением полимерной цепи. В этой работе исследовалась угловая зависимость ширины линии спиновой триады, было установлено, что ее поведение соответствует характерному поведению одномерных магнетиков, было определено направление магнитных цепей для нескольких соединений. Также было показано, что модификация лиганда на трет-бутилпиразолилный приводит к изменению направления магнитных цепей. В модифицированных соединениях присутствует сильный по шкале ЭПР межкластерный обмен внутри полимерной цепи. Изучены три представителя с модифицированным лигандом, проведены оценки величины межкластерного обмена. Кроме того, начаты исследования по изучению светоиндуцированных переходов в  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Me}}_{\text{tert}}$ . Характер этих переходов принципиально отличается от наблюдаемых ранее; время жизни возбужденного состояния достигает часов при температуре около 60 К. Работа поддержана грантами РФФИ № 11-03-00158, МК-1662.2012.3

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук М. В. Федин

## ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОДУКТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ УФ-ФИЛЬТРОВ

Е. А. Зеленцова<sup>а,б</sup>, О. А. Снытникова<sup>а,б</sup>, П. С. Шерин<sup>а</sup>, Ю. П. Центалович<sup>а,б</sup>  
<sup>а</sup>Международный томографический центр СО РАН  
<sup>б</sup>Новосибирский государственный университет

Катаракта – это прогрессирующее заболевание хрусталика глаза. Одним из основных факторов риска развития катаракты является ультрафиолетовое излучение. Хрусталик человека содержит соединения, поглощающие УФ-излучение в диапазоне 300-400 нм и защищающие глаз от фотоповреждений. Данные соединения называют УФ-фильтрами. Однако, претерпевая фотовозбуждение, УФ-фильтры могут приводить к модификациям кристаллинов и, как следствие, к развитию катаракты. Целью данной работы являлось изучение фотохимических свойств продуктов разложения УФ-фильтров: кинуренина желтого и кинурениновой кислоты, а также анализ их возможной роли в процессе развития катаракты.

Для обоих соединений (синтетического происхождения) мы получили следующие фотохимические характеристики: коэффициенты экстинкции, рК-константы при помощи спектрофотометра и рН-метра; синглетные время жизни и квантовые выходы флуоресценции с использованием флуориметра; спектры интермедиатов и квантовый выход триплетного состояния, измеренные на установке лазерного импульсного фотолиза; квантовые выходы фоторазложения под аргоном и кислородом с использованием стационарного фотолиза с последующим ВЭЖХ анализом. Продукты фоторазложения желтого кинуренина были определены при помощи ВЭЖХ с оптическим детектированием и подтверждены масс-спектрометрически.

Данная работа показала, что оба соединения (кинуренин желтый и кинурениновая кислота) эффективно образуют триплетную форму, которая может реагировать с белками или антиоксидантами, содержащимися в хрусталике глаза. Следующим важным свойством кинуренина желтого стало образование енольной формы, которая является нестабильной и распадается с образованием хинолина при комнатной температуре. Таким образом, оба исследуемых соединения более фотохимически активны и нестабильны, чем первичные УФ-фильтры, и их формирование в хрусталике может привести к развитию катаракты.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 11-04-00143 и 11-04-12006), ОХМН РАН и Правительства Российской Федерации (государственный контракт 14.740.11.0758 и грант №11.G34.31.0045).*

Научный руководитель – д-р хим. наук Ю. П. Центалович

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ ДИФФУЗИОННОГО ПОДХОДА К ОПИСАНИЮ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

М. В. Зеликман

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Законы диффузии работают на больших временах, однако они применяются также на молекулярных масштабах, на временах порядка наносекунд. Очевидно, что должна существовать граница применимости диффузионного подхода, т.е. можно указать времена, на которых он уже не работает. Целью работы является исследование применимости диффузионного подхода в жидкости на коротких временах. Данный вопрос до сих пор специально не исследовался, хотя диффузионные формулы широко используется для интерпретации физических экспериментов касающихся подвижности молекул в жидкости. Однако в последние годы, с появлением фемтосекундных экспериментов (например, изучение рекомбинации радикальных пар в электрическом поле), вопрос о границе применимости становится особенно важным. Ответ на вопрос может дать компьютерное моделирование.

Мы исследуем молекулярно-динамические модели леннард-джонсовской жидкости, используя пакет GROMACS [1]. Изучается процесс выхода атома на диффузионное движение с дрейфовой скоростью, под действием мгновенного включения постоянно действующей на него силы. Моделирование проводилось для разной величины силы, а также при разной плотности и температуре жидкости. Построены функции распределения координаты этого атома для разных моментов времени после включения силы. Эти распределения сравниваются с предсказаниями теории Смолуховского. Во всех моделях обнаружен переходный режим, на котором указанные распределения, рассчитанные по модели, не совпадают с теоретическими. Это время не превышает 0.5 пс, что совпадает с оценкой, полученной по моделированию выхода атома на дрейфовую скорость. Таким образом, диффузионный подход для исследованных жидкостей применим на пикосекундных временах, однако его уже не следует использовать на более коротких временах.

---

1. D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, et al., J. Comp. Chem., 26, 1701 (2005).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. Н. Медведев

# **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КРИОПРОТЕКТОРОВ НА ДИНАМИКУ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ МЕТОДОМ СТИМУЛИРОВАННОГО ЭЛЕКТРОННОГО СПИНОВОГО ЭХА**

Н. В. Иванисенко

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Криоконсервация живых клеток является актуальной задачей во многих областях медицины, пищевой и аграрной промышленности. В процессе замораживания и таяния мембраны подвержены повреждениям, которые могут приводить к гибели клеток. Существует множество криопротекторов, предотвращающих эти повреждения в живых организмах.

Несмотря на множество работ по исследованию влияния криореагентов на стабильность и функциональную способность мембран, многие вопросы остаются до сих пор неизученными. В частности, до сих пор неясен механизм влияния сахаров на свойства липидных мембран (помимо известной осмотической активности). Целью данной работы было исследование влияния криопротекторов – таких как глицерин, диметилсульфоксид, сахароза и сорбитол – на динамические свойства модельных фосфолипидных мембран при высоком уровне гидратации методом стимулированного электронного спинового эха спиновых меток.

Было обнаружено, что глицерин и диметилсульфоксид способствуют увеличению молекулярной подвижности липидов по всей глубине мембраны. Данный эффект противоположен тому, что наблюдается при комнатной температуре. Возрастание подвижности спиновых зондов может быть связано с возросшим средним пространством, приходящим на один фосфолипид в присутствии криореагентов, и как следствие, большей свободой для движения спиновых меток. Сахароза и сорбитол оказывают обратное влияние на молекулярную подвижность внутри мембран. Их присутствие приводит к значительному подавлению скорости молекулярных движений. Данный эффект проявляет себя преимущественно вблизи поверхности мембраны, что может быть вызвано специфическим взаимодействием сахаров и сахарных спиртов с полярными липидными головками.

Полученные данные позволяют глубже взглянуть на механизмы защиты клеток различными типами криопротекторов в процессе замораживания, а также понять их влияние на физико-химические свойства мембран.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук С. А. Дзюба, Н. П. Исаев

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В СОЕДИНЕНИЯХ Fe(III) С ОКСИКИСЛОТАМИ

М. С. Киселева, И. Н. Огородников  
Уральский федеральный университет  
им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Фотохимия соединений железа Fe(III) играет важную роль при изучении процессов окисления загрязняющих веществ в природных водных системах. Известно [1], что первичным фотохимическим процессом в этих системах является внутрисферный перенос электрона. В этой связи, целью настоящей работы является численное моделирование кинетики туннельного переноса электрона, стимулированного подвижностью реагентов в фотохимических реакциях для водных растворов комплексов железа Fe(III) с оксикислотами – винной ( $[\text{Fe}(\text{Tart})]^+$ ) и гликоксалевой ( $[\text{Fe}(\text{Gly})]^+$ ).

Детальное описание разработанной модели приведено нами в [2]. В основе модели лежит численное решение уравнения Смолуховского для парных корреляционных функций  $Y(r,t)$  разнотипных дефектов. Используя полученные решения для  $Y(r,t)$ , в работе определены временные зависимости функции скорости реакции  $K(t)$  и концентрации дефектов  $n(t)$ . Для параметризации модели были использованы экспериментальные данные, полученные методом наносекундного импульсного фотолиза для комплексов Fe(III) с оксикислотами в присутствии метил виологена [1, 3].

Результаты наших расчетов свидетельствуют о том, что скорость реакции в неравновесных процессах, протекающих после импульсного возбуждения, является функцией времени и изменяется в диапазоне нескольких порядков. Высказывается предположение, что помимо диффузионных механизмов переноса электрона в возбужденном светом комплексе, имеет место туннельный процесс. Таким образом, предложенная в настоящей работе модель может внести значимый вклад в интерпретацию экспериментальных данных по кинетике фотохимических процессов. Дальнейшее изучение кинетики переноса электрона в фотохимических процессах требует проведения экспериментальных работ по импульсному фотолизу с наносекундным разрешением.

---

1. Поздняков И.П., Глебов Е.М., Плюснин В.Ф. и др. Фотохимия комплекса Fe(III) с гликоксалевой кислотой в водных растворах, Химия высоких энергий, Т.43, N5, С. 461-464 (2009)

2. Огородников И.Н., Киселева М.С., Седунова И.Н., Химия высоких энергий, Т.46, N3, С. 1-6 (2012)

3. Сюй Чанг и др., Изв. РАН, Сер. Хим., 2009, № 9. С. 1771-1779.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. И. Н. Огородников



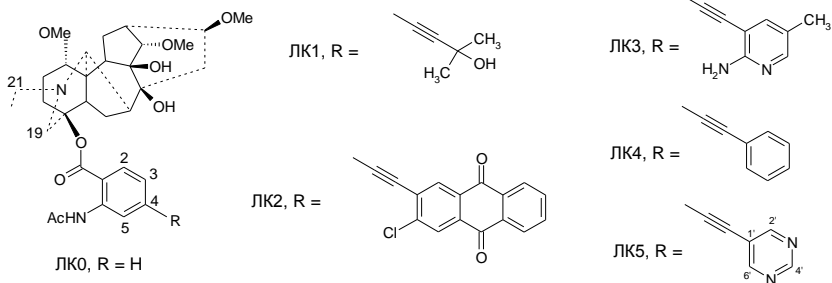
# ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ АЦЕТИЛЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЛАППАКОНИТИНА

В. И. Климентьев

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Лаппаконитин (ЛК) – это природный алкалоид, выделенный из аконита (*Aconitum Septentrionale Koelle*), который широко применяется в фармакологии в качестве гипотензивного и антиаритмического препарата. Серьезным недостатком данного соединения является его фототоксичность. Известно, что под действием света ЛК может разлагаться с образованием свободных радикалов, вызывая различные заболевания кожи. В связи с этим актуальной задачей является поиск подходов, снижающих побочные эффекты ЛК. Одним из таких подходов является введение заместителей в антралиловый фрагмент ЛК.

В данной работе был синтезирован новый класс ацетиленовых производных ЛК. Методами химической поляризации ядер (ХПЯ), ЯМР и оптическими методами было изучено влияние различных заместителей в 4 положении ЛК на скорость фоторазложения в реакциях внутримолекулярного переноса электрона, а также на фотоиндуцированные реакции с аминокислотой N-ацетилтирозином.



Обнаружено, что введение указанных заместителей заметно повышает фотостабильность ЛК в исследуемых процессах, а также в некоторых случаях влияет на механизм реакции. Полученные данные могут быть полезны для создания новых солнцезащитных препаратов на основе антралиновой кислоты, а также для создания более эффективных лекарственных препаратов.

Научный руководитель – д-р хим. наук Н. Э. Поляков

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР ПРИРОДЫ И СТРУКТУРЫ ПРИМЕСНЫХ ДЕФЕКТОВ В АЛМАЗАХ, ВЫРАЩЕННЫХ В КАРБОНАТНЫХ СРЕДАХ

А. Ю. Комаровских

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Кислород — содержащие дефекты в алмазах давно вызывают интерес у исследователей. Предполагалось, что центры ОХ1 и N3 обусловлены вхождением атомов кислорода в структуру дефектов. Однако последние исследования спектров люминесценции и ЭПР этих центров показали, что данные дефекты содержат атомы титана, а не кислорода. Для исследования вхождения кислорода в кристаллическую решётку были выращены алмазы в карбонатной среде. Синтез кристаллов проходил без катализаторов (Co, Fe и Ni) по «Барс» технологии на затравку. ИК спектры поглощения выращенных кристаллов содержат интенсивные линии  $1332\text{ см}^{-1}$  от  $\text{N}^+$  и  $1130\text{ см}^{-1}$  от замещающих атомов азота. Спектры ЭПР исследуемых кристаллов обусловлены проявлением спектра ЭПР замещающих атомов азота и двух новых анизотропных спектров ЭПР. Исследование угловой зависимости одного из них — ОХ1, показало, что спектр обусловлен центром с электронным спином  $S = \frac{1}{2}$  и анизотропным g- фактором со следующими значениями:  $g_1=2.0113$ ,  $g_2=2.0098$ ,  $g_3=1.9991$ . Направления главных значений g-тензора соответствуют следующим направлениям:  $g_1$  направлен вдоль [0-11],  $g_2$  отклонён на  $9^\circ$  от [100],  $g_3$  отклонён на  $9^\circ$  от [011]. Второй парамагнитный центр — ОХ2, имеет симметрию  $C_{3v}$  и g — тензор со следующими главными значениями:  $g_{||}=2.0028$ ,  $g_{\perp}=2.0032$ . Необычно высокая анизотропия g-факторов исследуемых центров при отсутствии ионов переходных металлов для кристаллов алмаза, выращенных в кислород — содержащей среде, дает основание предположить, что в структуру исследуемых центров входят атомы кислорода. В соответствии с этим предположением на основании данных по электронному состоянию центров и их симметрии для центров ОХ1 и ОХ2 предложены структурные модели в виде отрицательно заряженных расщепленной по  $\langle 100 \rangle$  межузельной конфигурации  $\text{>C-O<}$  (для ОХ1 центра) и замещающего кислорода (для ОХ2 центра). Причем донором электронов для исследуемых центров является примесный азот, состояние  $\text{N}^+$  которого проявляется в ИК спектрах полосой  $1332\text{ см}^{-1}$ .

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук В. А. Надолинный

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СВЯЗИ Fe(II)-NO

И. С. Лысков

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

Оксид азота широко используется в качестве спинового зонда в катализаторах окисления, содержащих Fe(II), таких как FeZSM-5 катализаторов [1]. До сих пор дискутируется вопрос об эффективной электронной структуре комплекса  $[\text{Fe-NO}]^{2+}$ . В работе для ответа на этот вопрос рассматривается характер спиновой плотности в модельном комплексе  $\text{Fe}(\text{NO})(\text{OH})_2$ .

Для расчета изучаемого комплекса использован спин-поляризованный подход DFT на уровне b3lyp/6-311g++(d,p) с анализом разложения неограниченного детерминанта и  $\langle \rangle$  в базисе парных орбиталей [2]. Функция спиновой плотности в базисе парных орбиталей разложена на сумму двух вкладов. Первый описывает плотность неспаренных электронов, второй – спиновую плотность, индуцированную поляризацией двукратно занятых оболочек.

Результаты расчетов показывают основное состояние системы с  $S_z = -$ . Характерным результатом является почти нулевые значения вклада чисто неспаренных электронов на атомах NO. Орбитальный анализ показал наличие двух парных орбиталей с интегралами перекрывания  $t=0.66$  и  $t=0.78$ . На языке парных орбиталей этот результат интерпретируется как наличие скоррелированных (парных)  $\alpha$  — и  $\beta$  — плотностей на фрагментах Fe и NO соответственно. Такая корреляция проявляет себя в существенном отклонении  $\langle \rangle$  от «точного» значения 6.0 по сравнению с изолированной системой  $\text{Fe}(\text{OH})_2$ . Проведенный анализ доказывает наличие антиферромагнитного состояния  $\text{Fe}^\uparrow(\text{II})\dots\text{NO}^\downarrow$ .

---

1. I. Zilberberg, S. Ph. Ruzankin, S. Malykhin, G. M. Zhidomirov, Unrestricted density functional theory of the bonding between NO radical and ferrous ion, Chem. Phys. Lett. 394 (2004) 392-396

2. I. Zilberberg, S. Ph. Ruzankin, Expansion of the unrestricted determinant in the basis of paired orbitals, Chem. Phys. Lett. 394 (2004) 165-170

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук И. Л. Зильберберг

# COLLISIONAL ELECTRON SPECTROSCOPY (CES) METHOD FOR GAS MIXTURES DIAGNOSTICS

E. Maksimova, A. Tsyganov, A. Mustafaev

Theoretical consideration of Collisional Electron Spectroscopy (CES) for gaseous media analysis and experimental results on CES detector are presented. It is demonstrated that a diffusion path confinement for characteristic electrons provides a possibility to measure electrons energy distribution function (EEDF) and to find characteristic spectra of species at high (up to atmospheric) gas pressure. Simple micro-plasma CES detector of two plane parallel electrode configuration with current-voltage measurement in afterglow of helium glow discharge may be designed to operate at a high gas pressure up to atmospheric one. Experimental electron energy spectra of pair He metastables collisions in dependence of inter-electrode gap are discussed.

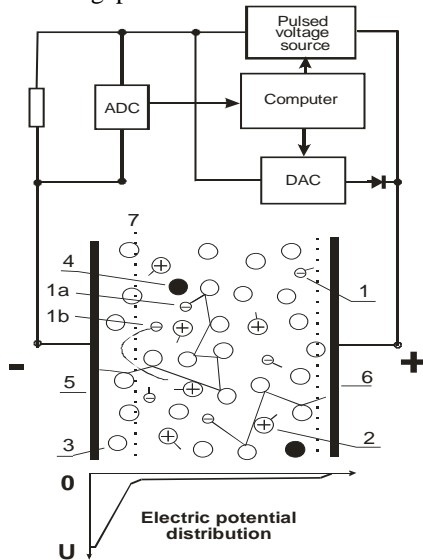


Fig.1 Scheme of microplasma CES-detector

Scientific adviser – Prof. A. S. Mustafaev

# ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ И МЕХАНИЗМА ПРЕВРАЩЕНИЙ ТЕТРАИЗОПРОПОКСИДА ТИТАНА В $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$ ПЛАМЕНИ

Р. А. Максютов

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Наноплёнки частиц оксида титана представляют новый класс функциональных материалов, которые являются перспективными для производства солнечных фотоэлементов (dye sensitized solar cells, DSSC) и датчиков газовых анализаторов. Для понимания физико-химических процессов, протекающих при образовании пленок, важно знать механизм химических превращений тетраизопропоксида титана, что и является основной целью данной работы.

Методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии в предварительно перемешанном пламени  $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$  (13%/14.5%/72.5%) с добавкой 0.12%  $\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$  измерены профили концентрации  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$ . Исследуемое пламя стабилизировалось на плоской горелке при давлении 1 атм.

В пламени масс-спектрометрически были идентифицированы 8 лабильных Ti-содержащих соединений —  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HTiO}_2$ ,  $\text{TiO}$ ,  $\text{TiOH}$ ,  $\text{Ti}$ ,  $\text{TiH}$ ,  $\text{Ti}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_3$  и измерены профили интенсивности их пиков масс. На основе полученных экспериментальных результатов, а также анализа существующих литературных данных предложена предварительная схема превращения  $\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$  в пламени, которая описывает как образование конечного продукта —  $\text{TiO}_2$ , так и всех обнаруженных промежуточных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-03-00442)

Научные руководители — д-р. физ.-мат. наук, проф.  
О. П. Коробейничев, канд. хим. наук А. Г. Шмаков

# СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ $\text{TiO}_2$ ДОПИРОВАННЫХ Fe В ПЛАМЕНИ $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}/\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$ И ИЗУЧЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОЭЛЕМЕНТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Р. А. Максютов

Институт химической кинетики и горения СОРАН  
Новосибирский государственный университет

Разработка технологии производства сенсibilизированных фотовольтаических преобразователей на основе нанокристаллических частиц  $\text{TiO}_2$  является актуальной научной проблемой. Солнечные батареи такого типа являются перспективными ввиду дешевизны их производства по сравнению с кремниевыми фотоэлементами. В настоящее время в литературе существует достаточно большое количество работ по улучшению эффективности солнечных батарей на основе  $\text{TiO}_2$  за счет введения в него добавок различных химических элементов. Одним из новых и перспективных методов получения мезопористой пленки нанокристаллических частиц  $\text{TiO}_2$  является метод получения в пламени [1].

Целью данной работы является получение образцов солнечных батарей на основе нанопленок  $\text{TiO}_2$ , осажденных на подложку из пламени  $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}/\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$ , а также изучение влияния малых добавок Fe в наночастицы  $\text{TiO}_2$  на эффективность полученных солнечных батарей.

Получены образцы мезопористых пленок нанокристаллических частиц  $\text{TiO}_2$  с массовым содержанием добавки Fe  $m_{\text{Fe}}/m_{\text{Ti}}=0, 0.002, 0.005$  и  $0.01$ . Методами просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения исследована структура синтезированных наночастиц. На основе полученных пленок наночастиц  $\text{TiO}_2$  изготовлены образцы солнечных батарей и определены их характеристики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-03-00442)

[1] О.П. Коробейничев, А.Г. Шмаков, ФГВ, 2012, т. 48, №1. сс.55-63

Научные руководители – д-р. физ.-мат. наук, проф. О. П. Коробейничев, канд. хим. наук А. Г. Шмаков

## **ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ ЗОНДОВ – КАК ИНДИКАТОР СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В БЕЛКАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ**

А. Г. Мельников, Е. В. Наумова, К. Скрипаченко, В. Зацепилов  
Саратовский государственный технический университет  
им. Ю. А. Гагарина

В настоящее время флуоресцентные зонды используются для исследования физико-химических свойств белков и их структурных перестроек [1]. Нами были исследованы взаимодействия солей тяжелых металлов с белками методом фосфоресцентных зондов. В качестве зондов использованы красители ксантенового ряда: эозин, эритрозин, роза бенгальская.

С целью изучения влияния взаимодействия зондов с альбуминами плазмы крови на излучательные переходы, нами было проведено сравнение спектрально-кинетических характеристик зондов в водных растворах, растворах сывороточного альбумина и плазме крови человека. Установлено, что молекулы зондов в плазме крови также как и в сывороточном альбумине человека связаны преимущественно с белками.

При добавлении в растворы белка и плазмы крови соли нитрата таллия и ацетата свинца наблюдалось тушение флуоресценции и фосфоресценции зондов. Тушение возбужденных синглетных и триплетных состояний зондов характеризуется константой Штерна-Фольмера, что свидетельствовало о динамическом характере тушения возбужденных состояний зондов в белках. Влияние тяжелых металлов на время жизни триплетных состояния зондов определялось нами по возрастанию константы скорости затухания фосфоресценции зондов. Из полученных результатов следует, что константы скорости тушения триплетных состояний не коррелирует с константой спин-орбитального взаимодействия, пропорциональной четвертой степени заряда ядра, выбранных тяжелых металлов. Для свинца должна быть наибольшей константа скорости тушения. Возможно, это связано с более сложным механизмом взаимодействия солей тяжелых металлов с белками, чем просто кулоновские взаимодействия. Нами предположено, что это связано с влиянием тяжелых металлов на структуру белков.

---

1. Bruce E. Cohen, Arnd Pralle, XiaoJie Yao, Gayathri Swaminath, Chris S. Gandhi, Yuh Nung Jan, Brian K. Kobilka, Ehud Y. Isacoff, and Lily Y. Jan A fluorescent probe designed for studying protein conformational change // PNAS January 25, 2005 vol. 102 no. 4 965-970.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. Г. В. Мельников

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРАТНЫХ ОБОЛОЧЕК МАЛЫХ ГИДРОФОБНЫХ МОЛЕКУЛ

А. С. Москалёв

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В данной работе исследуются молекулярно динамические модели водных растворов молекул благородных газов, и метана при различных температурах. Рассчитаны волнометрические характеристики растворов: кажущийся и собственный объёмы молекул, вклад гидратированной воды в кажущийся объём. Изучены структурные характеристики воды в гидратной оболочке: профили среднего числа водородных связей на молекулу воды и меры тетраэдричности ближайшего окружения молекул воды в зависимости от расстояния от растворенной молекулы.

Кажущийся объём определяется как разница объёмов раствора и чистого растворителя. Он также представляется как сумма собственного объема молекулы и вклада от гидратированной воды  $V^{app} = V^{int} + \Delta V^h$ . Тетраэдричность окружения данной молекулы воды определяется по

формуле  $T = \sum_{i < j} (l_i - l_j)^2 / 15\bar{l}^2$  где  $l$  — длины ребер тетраэдра,

вершины которого располагаются на 4-х ближайших молекулах воды. Водородные связи между молекулами воды определялись согласно геометрическому критерию, принятому в [1]. Наши модели представляли собой растворенную молекулу благородного газа (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) или метана, окруженную 4000 молекулами воды в боксе с периодическими граничными условиями. Для проверки отсутствия влияния размера модельного бокса, были дополнительно построены модели раствора метана, содержащие 16000 молекул воды.

Показано заметное отличие воды в гидратных оболочках наших молекул от чистой воды. В частности, видно уменьшение среднего числа водородных связей на молекулу воды и ухудшение тетраэдричности окружения вблизи растворенной молекулы. Это означает, что структура воды в ближайшем окружении наших молекул становится более разупорядоченной. Вклад в объём от гидратной оболочки зависит от размера молекулы, а знак эффекта зависит от температуры.

---

1. D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, et al., J. Comp. Chem., 26, 1701 (2005).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. Н. Медведев



# ИМПУЛЬСНЫЙ ЭПР РАДИКАЛЬНЫХ ПАР, РЕГИСТРИРУЕМЫХ ПО ВЫХОДУ ПРОДУКТОВ РЕКОМБИНАЦИИ. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ

Е. А. Насибулов

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Методы оптически детектируемого ЭПР и RYDMR (Reaction Yield Detected Magnetic Resonance) широко используются ввиду лучшей чувствительностью по сравнению со стандартным ЭПР. Данные методы основаны на детектировании доли радикальных пар, находящихся в синглетном спиновом состоянии  $\rho_{SS}(t)$ , по выходу продуктов их рекомбинации и воздействии на процесс рекомбинации посредством постоянного или переменного магнитного поля. Это делает возможным детектирование короткоживущих радикальных пар при комнатной температуре и измерение их магнитных взаимодействий. Непрямая регистрация ЭПР радикальных пар возможна не только оптическими методами, но и при наблюдении, например, изменений фототока, вызванных влиянием магнитного поля.

В данной работе проведено теоретическое рассмотрение возможности влияния на выход реакции короткими микроволновыми импульсами. В настоящее время импульсные методы в обычном ЭПР хорошо развиты, однако в RYDMR наблюдаемой величиной является не намагниченность, как в ЭПР, а  $\rho_{SS}(t)$ . По этой причине невозможно прямое использование импульсных последовательностей ЭПР, и требуется теоретическая разработка аналогов данных импульсных последовательностей для RYDMR. В данной работе исследована возможность рефокусировки населённости начального (синглетного) состояния при помощи различных импульсных последовательностей ( $\rho_{SS}$ -эхо). Был подтверждён известный результат Салихова и Молина (J. Phys. Chem., **97**, 13259 (1993)) и получено, что  $\rho_{SS}$  может быть полностью рефокусирована одним 180-градусным импульсом. Также были изучены возможности наблюдения модуляций  $\rho_{SS}$ -эха, вызванных анизотропией СТВ и электронным спиновым взаимодействием; кроме того, были предложены импульсные последовательности, являющиеся аналогами импульсных ДЭЯР (двойной электрон-ядерный резонанс) и ДЭЭР (двойной электрон-электронный резонанс). Данные результаты дают теоретическую основу для изучения радикальных пар импульсными методами RYDMR.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 11-03-00356) и ОХНМ (проект 5.1.1).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук К. Л. Иванов

## ВЛИЯНИЕ РЕАКЦИИ ПРОТОНИРОВАНИЯ НА СКОРОСТЬ ГОМОЛИЗА АЛКОКСИАМИНОВ

Д. А. Пархоменко

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Радикальная полимеризация, контролируемая нитроксильными радикалами (ПКНР), позволяет получать полимеры сложной структуры с контролируемой молекулярной массой и функциональными концевыми группами. Анализ кинетики ПКНР показывает, что эффективность полимеризации зависит от констант скорости гомолиза спящих цепей алкоксиаминов  $k_d$  и рекомбинации алкильных и нитроксильных радикалов  $k_c$ . В свою очередь, оптимальные значения констант  $k_d$  и  $k_c$  зависят от структуры мономеров, поэтому наличие механизма обратимого изменения этих констант позволяет получать широкий круг сополимеров, используя один контролирующий агент. В недавних работах [1] было показано, что протонирование контролирующего агента полимеризации приводит к заметному изменению константы  $k_d$ . В то же время, константа скорости  $k_c$  слабо изменяется при протонировании нитроксильных радикалов, поэтому основное влияние на процесс ПКНР оказывает изменение константы скорости  $k_d$  при протонировании алкоксиамина. Было установлено, что константа скорости гомолиза алкоксиамина уменьшается при протонировании нитроксильного фрагмента алкоксиамина и увеличивается при протонировании алкильной группы.

Для более глубокого понимания механизма влияния протонирования на константы скорости гомолиза  $k_d$ , были проведены расчеты свободной энергии Гиббса  $\Delta(\Delta G_{rxn}^0)$  реакций различных протонированных форм алкоксиаминов методами теории функционала плотности (DFT). Изменение рассчитанных значений  $\Delta(\Delta G_{rxn}^0)$  при протонировании алкоксиаминов согласуется с экспериментально наблюдаемыми тенденциями. Было установлено, что протонирование дестабилизирует нитроксильные радикалы и, напротив, стабилизирует алкильные. Это, в свою очередь, приводит к увеличению  $\Delta(\Delta G_{rxn}^0)$  реакции гомолиза протонированной формы алкоксиаминов по сравнению с депротонированной.

Работа поддержана грантом РФФИ 12-03-01042-а

- 
1. M.V. Edeleva et al. *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 5558.

Научные руководители – канд. хим. наук М. В. Еделева,  
канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев

## ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЭРИТРОЗИНА КАК РЕЗУЛЬТАТ СВЯЗЫВАНИЯ С НАНОЧАСТИЦАМИ ХИТОЗАНА

Н. М. Плотникова

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Сложность регистрации фосфоресценции (Ф) водных растворов красителей при комнатной температуре заключается в том, что триплетное состояние эффективно тушится кислородом и в этом случае наблюдается только замедленная флуоресценция (ЗФ). При добавлении биополимера может образовываться межмолекулярный комплекс с красителем и появляется возможность наблюдения фосфоресценции. В работе было проведено спектральное и кинетическое зондирование синглетного  $S_1$  и триплетного  $T_1$  состояний эритрозина в интервале рН 3,8–5,5 при введении наночастиц хитозана, на основе которого разрабатываются средства для лечения ран и ожогов, а также средства для транспорта лекарств. Эффект от практического применения хитозана в медицине многократно усиливается, если использовать биополимер в форме наночастиц на основе полиэлектролитных комплексов, которые обеспечивают высокую проникающую способность частиц через мембраны.

При снятии спектров водных растворов эритрозина наблюдалась только ЗФ, которая совпадает с контуром обычной флуоресценции. При добавлении наночастиц хитозана в интервале рН 3,8–5,5 появляется второй пик на 697 нм, соответствующий фосфоресценции эритрозина. При увеличении соотношения концентраций хитозана к эритрозину соотношение квантовых выходов ЗФ к Ф в растворах при рН 3,8 уменьшается вдвое, а в растворах с рН 4,6 и 5,5 падает в полтора раза. Измеренные времена жизни фосфоресценции эритрозина не зависят от рН и концентрации ПЭК и равны 0,13–0,15 мс. Эффекты связывания приводят не только к появлению фосфоресценции, но и к изменению других фотофизических и спектральных характеристик поглощения и испускания красителя. Так, при увеличении соотношения концентраций наночастиц хитозана к эритрозину наблюдается существенное увеличение квантового выхода флуоресценции красителя и уменьшение энергетической щели  $S_1-T_1$ , что приводит к разгоранию  $ST$ -конверсии. Показано, что константа ассоциации эритрозина, связанного с наночастицами хитозана, коррелирует с рН растворов: увеличивается в 4 раза при переходе от рН 5,5 ( $2,4 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ ) к рН 3,8 ( $9,1 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ ). Изменение ионной силы растворов позволило выявить механизм образования межмолекулярного комплекса между эритрозином и наночастицами хитозана.

Научный руководитель – М. А. Герасимова

# ИЗМЕРЕНИЕ И АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВРЕМЕНИ $\alpha$ -РЕЛАКСАЦИИ В СТЕКЛЮЮЩЕМСЯ ГЛИЦЕРИНЕ

В. А. Попова

Институт автоматики и электрометрии СО РАН

Работа посвящена изучению стеклющихся материалов в жидком состоянии. Известно, что температурная зависимость времени релаксации  $\tau_\alpha(T)$  стеклющихся веществ имеет сложный характер. Высокотемпературное поведение времени релаксации описывается Аррениусовским законом. При более низких температурах зависимость  $\tau_\alpha(T)$  становится неаррениусовской. Изменение характера поведения  $\tau_\alpha(T)$  часто интерпретируется как переход от свободного молекулярного движения к кооперативному (образование нанометровых неоднородностей). Температуру, при которой происходит отклонение от аррениусовского поведения, принято называть температурой  $T_A$ . Кооперативный характер молекулярного движения ниже температуры  $T_A$  активно исследуется в настоящее время и был подтвержден в ряде экспериментальных исследований.

Целью настоящей работы является детальный анализ температурной зависимости времени  $\alpha$ -релаксации вблизи температуры  $T_A$ . Этот температурный диапазон соответствует пикосекундным временам релаксации, измерение которых проблематично при использовании традиционных методов (таких как диэлектрическая спектроскопия). В настоящей работе релаксационный отклик был измерен методом неупругого рассеяния света с использованием тандема интерферометров Фабри-Перо, для которого область 1-100 ГГц является рабочей.

Спектры неупругого рассеяния света были измерены в глицерине в спектральном диапазоне от 1 ГГц до 400 ГГц при температурах 299 К – 460 К. Из полученных спектров была определена температурная зависимость времени релаксации и проведен анализ  $\tau_\alpha(T)$ . Полученные результаты обсуждаются в рамках подхода, предполагающего образование неоднородных локальных структур при температуре  $T_A$ .

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. В. Суровцев

# КОГЕРЕНТНЫЙ ПЕРЕНОС ГИПЕРПОЛЯРИЗАЦИИ В ГИСТИДИНЕ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ЯМР С ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

А. Н. Правдивцев  
Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Цель работы – изучение переноса поляризации в экспериментах ЯМР с переключением магнитного поля. Мы исследовали систему связанных протонов, неравновесная поляризация создавалась за счет приложения РЧ импульсов или в результате Химической Поляризации Ядер, образованной в результате реакции короткоживущих радикалов. Эксперименты с варьированием магнитного поля проводились на установке с быстрым механическим переключением магнитного (Свободный Университет Берлина).

В настоящей работе представлены результаты, полученные для биологически важной молекулы, аминокислоты L-N-ацетил гистидина в D<sub>2</sub>O. Гистидин содержит пять связанных протонов: три в пептидной группе и 2 в имидазольном кольце. Мы обнаружили, что в достаточно низких полях, где спины сильно связаны, неравновесная поляризация перераспределяется между ними. Более того, процесс переноса поляризации когерентный, при этом в области антипересечения уровней (АПУ) перенос поляризации наиболее эффективен. Мы исследовали процесс переноса поляризации между H2 и H4 протонами в полях менее 100 Гс. Перенос поляризации происходит с частотой около 1.4 Гц, что совпадает с частотой АПУ в этой области полей. В полях от 300 до 1000 Гс существует более двадцати АПУ с частотой менее 0.2 Гц. Наши исследования позволили определить их точное положение по перераспределению поляризации в этих полях. Также был обнаружен перенос поляризации между бета и альфа-протонами в полях около 3 кГц, где система из трех пептидных протонов имеет единственное АПУ.

Для объяснения полученных результатов мы численно решали уравнение Лиувилля с применением релаксационной теории Редфилда. Для моделирования переключения поля использовался реальный профиль поля. Результаты экспериментов хорошо согласуются с численным моделированием. Используя наши наблюдения и теоретические расчеты теперь можно возбуждать определенные когерентности в спиновой системе и переносить поляризацию между выбранными спинами.

Финансовая поддержка: РФФИ (проекты No. 11-03-00296а, 09-03-91006-FWF и 09-03-00837-а), программа Российского Правительства поддержки ведущих ученых (грант No.11.G34.31.0045), программа РАН (проект 5.1.1).

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук А. В. Юрковская,  
д-р физ.-мат. наук К. Л. Иванов.

# МОДИФИКАЦИЯ РЕАКЦИОННОГО ОПЕРАТОРА ДЛЯ СПИН-СЕЛЕКТИВНЫХ РЕАКЦИЙ РАДИКАЛЬНЫХ ПАР

Д. В. Сосновский

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Современную химическую кинетику невозможно представить без учета свободных радикалов, ведь радикалы часто являются короткоживущим промежуточным состоянием для многих реакций в органической и биорганической химии. Таким образом, изучение реакций с участием радикальных пар по-прежнему представляет большой интерес.

До недавнего времени для описания эволюции спиновой матрицы плотности радикальной пары часто использовалась феноменологическая экспоненциальная модель:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] - \frac{K_S}{2} (Q_S \rho + \rho Q_S) - \frac{K_T}{2} (Q_T \rho + \rho Q_T)$$

Однако в недавних работах Коминиса [1] утверждается, что основное уравнение спиновой химии надо видоизменить добавлением дополнительных членов:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] - \frac{K_S}{2} (Q_S \rho + \rho Q_S - 2Q_S \rho Q_S) - \frac{K_T}{2} (Q_T \rho + \rho Q_T - 2Q_T \rho Q_T)$$

В настоящее время существует дискуссия по этому поводу.

С помощью простейшей точной решаемой модели [2] было показано, что такое изменение феноменологического выражения приводит к неправильному результату. Поэтому нет причин для модификации самого уравнения, но возможно требуется уточнение вида реакционного оператора.

В работе производится обобщение точно решаемой модели. Такой подход приведет к некоторой модификации реакционного оператора без изменения структуры уравнения спиновой эволюции. К настоящему моменту получена аналитическая зависимость для населенности исходного синглетного состояния радикальной пары и обсуждается возможность определения нетривиального реакционного оператора и включения в решение синглет-триплетных переходов.

---

1. I. K. Komins, Quantum Zeno effect explains magnetic-sensitive radical-ion-pair reactions, *Phys. Rev. E*80, 056115 (2009).

2. P. A. Purtov, To the theory of Zeno chemical effect: The exactly solvable model, *Chem. Phys. Lett.* 496, 335-338 (2010).

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

# ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОВ {Ln<sup>III</sup>-Ni<sup>II</sup>-W<sup>V</sup>} МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Е. А. Сутурина

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Одним из наиболее перспективных направлений направлений молекулярного магнетизма является создание и исследование одномолекулярных магнетиков (ОМ) [1]. Получение устойчивых высокотемпературных ОМ позволит записывать информацию на носитель с плотностью 1 бит на молекулу. Самая важная характеристика ОМ – энергия переориентации намагниченности ( $U \sim DS^2$ ), которая пропорциональна квадрату спина ( $S$ ) основного состояния и параметру анизотропии ( $D$ ).

Комплексы, сочетающие в себе ионы 3d/4f металлов и органические лиганды, являются наиболее перспективными для создания ОМ. Входящие в них 4f ионы обладают высокой анизотропией, а ионы 3d металлов приводят к достаточно сильному обменному взаимодействию ( $J$ ) между магнитными центрами, по сравнению с комплексами, содержащими только ионы 4f металлов. В случае положительных  $J$ , магнитные моменты всех центров складываются, приводя к максимальному спину комплекса. Квантово-химические методы позволяют рассчитывать параметры спин-гамильтониана ( $J$  и  $D$ ), а так же выявлять структурные параметры, определяющие величину и характер обменного взаимодействия.

В данной работе были исследованы парные обменные взаимодействия в комплексах {Ln<sup>III</sup>-Ni<sup>II</sup>-W<sup>V</sup>}, где Ln=Gd, Tb, Dy. Расчеты были проведены методами теории функционала плотности с использованием неограниченного по спину подхода нарушенной симметрии с релятивистским гамильтонианом Дуглас-Кролла-Хесса (UB3LYP/DKH-SVP). Определены значения  $J(\text{Ni-W})$  для всех структур (Ln был заменен на диамагнитный La), в комплексах с Tb и Dy обменное взаимодействие между ионами Ni и W  $\sim 1 \text{ см}^{-1}$ ,  $-1 \text{ см}^{-1}$  в комплексе с Gd. Для комплекса с изотропным ионом Gd<sup>3+</sup> также рассчитаны все парные обменные взаимодействия обобщенным методом нарушенной симметрии. Полученные данные хорошо аппроксимируют экспериментальную зависимость магнитной восприимчивости от температуры.

- 
1. D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, 2006.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ КАТИОН-РАДИКАЛОВ В ОБЛУЧЕННЫХ РАСТВОРАХ ПРОСТЫХ ЭФИРОВ МЕТОДОМ ВРЕМЯРАЗРЕШЕННОГО МАГНИТНОГО ЭФФЕКТА В РЕКОМБИНАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СПИН-КОРРЕЛИРОВАННЫХ ИОН-РАДИКАЛЬНЫХ ПАР

К. С. Талецкий

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Метод времяразрешенного магнитного эффекта в рекомбинационной люминесценции спин-коррелированных ион-радикальных пар [1] позволяет обнаруживать и определять характеристики короткоживущих катион-радикалов, практически недоступных для наблюдения другими методами [2].

Данный метод был применён для исследования первичных носителей положительного заряда в облучённом тетрагидрофуране при комнатной температуре. Были измерены кривые времяразрешенного магнитного эффекта – отношение кинетик рекомбинационной люминесценции в сильном и нулевом полях – для растворов *para*-терфенила ( $5 \cdot 10^{-4}$  моль/л) в тетрагидрофуране (ТНФ). Полученные кривые магнитного эффекта показывают, что в исследуемом растворе образуется частица, которая при этом не является катион-радикалом ни *para*-терфенила, ни тетрагидрофурана. Предположительно, данная частица является комплексом катион-радикала и нейтральной молекулы тетрагидрофурана ( $\text{TNF}^+ \dots \text{TNF}$ ), образующимся в пикосекундном диапазоне времён.

Для идентификации данной частицы была предпринята попытка подобрать такой набор констант СТВ, который позволил бы описать наблюдаемый магнитный эффект в модели, предполагающей наличие двух групп магнитно-эквивалентных протонов в носителе положительного заряда, однако этого оказалось недостаточно. Для учёта более сложной сверхтонкой структуры была написана программа для численного расчёта элементов матрицы плотности в нулевом магнитном поле. Было проведено сравнение экспериментальных и расчётных данных.

---

1. В. А. Багрянский, В. И. Боровков, Ю. Н. Молин, Квантовые бинения в радикальных парах, Успехи химии, 76, 535 (2007)

2. V. I. Borovkov, P. A. Potashov, L. N. Shchegoleva, V. A. Bagryansky, and Y. N. Molin, Radical Cations of Branched Alkanes As Observed in Irradiated Solutions by the Method of Time-Resolved Magnetic Field Effect, J. Phys. Chem. A, 111, 5839-5844 (2007)

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук В. И. Боровков



# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА .....</b>	<b>5</b>
I. Gusachenko, M.-C. Schanne-Klein, Y. Houssen, V. Tran, J.-M. Allain .....	5
Stéphane Douezan, Damien Cuvelier, Françoise Brochard-Wyart .....	6
Т. И. Авсиевич, Е. В. Немцева, М. А. Герасимова .....	7
А. А. Асанова .....	8
А. А. Батурина .....	9
Е. М. Букина, И. Е. Суковатая .....	10
Д. В. Гульнов .....	11
Е. А. Денисенко .....	12
Е. А. Денисенко, А. А. Шевченко, К. А. Очкась .....	13
М. А. Ефремов .....	14
И. А. Капутская .....	15
Э. С. Карамамед-Оглы .....	16
М. А. Кириллова, И. Е. Суковатая .....	17
Н. Ю. Малых, Д. И. Строкотов, Д. Ю. Орлова .....	18
А. Е. Москаленский .....	19
А. Ф. Мунзарова .....	20
Д. А. Недосеков .....	21
К. А. Окотруб .....	22
Е. А. Осипов .....	23
А. С. Петрова, Р. Р. Алиева .....	24
Е. Д. Петровский .....	25
А. А. Польщицин, В. М. Некрасов .....	26
И. В. Польщицина .....	27
А. С. Садовский .....	28
Е. С. Смирнов .....	29
Н. А. Смирнова, Н. М. Андреев, И. С. Беспалов, А. И. Сафонов .....	30
А. С. Старостин, С. В. Мальцев .....	31
О. С. Сутормин, И. Е. Суковатая .....	32
И. В. Черепанов, Л. В. Копылова, О. А. Снытникова, Ю. П. Центалович .....	33
А. А. Шевченко, Е. А. Сапрунова, Е. А. Денисенко .....	34
<b>ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ .....</b>	<b>35</b>
А. С. Берёзин .....	35
П. Ю. Ванина .....	36
З. С. Винокуров .....	37
А. С. Гавриленко, А. В. Забугин .....	38

И. В. Гренев .....	39
Е. Ю. Гудимова, М. Г. Остапенко .....	40
Я. А. Джулай .....	41
Д. А. Дружбин .....	42
И. С. Дубков .....	43
А. М. Жармухамбетова, А. А. Козулин, Н. В. Скрипняк .....	44
А. В. Забугин, А. С. Гавриленко .....	45
В. П. Исаков, Д. Н. Никитин, А. В. Солнцев .....	46
Г. Е. Каражанова, А. С. Ибрагимова, Д. Н. Уразалиева .....	47
Г. М. Кемельбекова .....	48
Е. Г. Коэмец .....	49
Т. М. Кузин, С. А. Полуянов .....	50
Н. С. Куделин .....	51
С. С. Курилко .....	52
Ю. В. Ли, Е. Г. Скрипняк, А. А. Козулин, В. В. Скрипняк .....	53
О. А. Максимова, Н. Н. Косырев, С. А. Лященко .....	54
Э. Ю. Матхонова .....	55
И. А. Мик .....	56
Н. И. Морозов, Е. В. Коротаев .....	57
Н. В. Нагирный, М. В. Хомяков, А. А. Брылякова, А. С. Золкин .....	58
В. В. Никулин .....	59
А. В. Ондар, А. А. Хомушку .....	60
У. М. Оразбаева, А. С. Темирбаева .....	61
А. В. Панченко .....	62
Е. С. Папуловский .....	63
И. Ф. Подкомарная, В. Ю. Артамонов .....	64
А. В. Полушкин .....	65
О. Г. Санарова, П. В. Кузнецов .....	66
В. О. Сёмин .....	67
М. А. Сухоярский, А. А. Козулин, А. С. Бодров, Н. В. Скрипняк .....	68
М. М. Сыроквашин, Е. В. Коротаев .....	69
И. О. Терёшкин .....	70
Е. В. Трушин .....	71
П. Ю. Тяпкин .....	72
И. В. Ческовская .....	73
А. А. Шмаков .....	74
<b>ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....</b>	<b>75</b>
А. С. Андреев, И. И. Силенцова .....	75
Н. С. Бажанова .....	76
С. С. Брагин .....	77
Д. С. Будкина, В. Ф. Плюснин, А. В. Коломеец .....	78

И. С. Гирник .....	79
М. Б. Гончикжапов.....	80
А. В. Горюнова.....	81
А. А. Дмитриев.....	82
Е. А. Добрецов.....	83
И. Ю. Дроздук .....	84
Е. А. Зеленцова, О. А. Снытникова, П. С. Шерин, Ю. П. Центалович.....	85
М. В. Зеликман .....	86
Н. В. Иванисенко.....	87
М. С. Киселева, И. Н. Огородников .....	88
В. И. Климентьев.....	89
А. Ю. Комаровских.....	90
И. С. Лысков .....	91
Е. Maksimova, A. Tsyganov, A. Mustafaev .....	92
Р. А. Максюттов.....	93
Р. А. Максюттов.....	94
А. Г. Мельников, Е. В. Наумова, К. Скрипаченко, В. Зацепилов .....	95
А. С. Москалёв .....	96
Е. А. Насибулов.....	97
Д. А. Пархоменко.....	98
Н. М. Плотникова.....	99
В. А. Попова .....	100
А. Н. Правдивцев .....	101
Д. В. Сосновский.....	102
Е. А. Сугурина.....	103
К. С. Талецкий.....	104

МАТЕРИАЛЫ  
50-Й ЮБИЛЕЙНОЙ МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ  
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

«Студент и научно-технический прогресс»

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

*Материалы конференции публикуются в авторской редакции*

*Дизайн обложки – Студия дизайна Вадима Гончарова  
(<http://vadimdesign.ru>)*

---

Подписано в печать 03.04.2012 г.

Офсетная печать

Заказ № \_\_\_\_\_

Формат 60x84/16

Уч.-изд. л. 5,5. Усл. печ. л. 6,8.

Тираж 160 экз.

---

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