

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

**МАТЕРИАЛЫ  
51-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

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

**12–18 апреля 2013 г.**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

**Новосибирск  
2013**

УДК 53  
ББК 22.3

Материалы 51-й Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс»: Физические методы в естественных науках и материаловедении/ Новосибир. гос. ун-т. Новосибирск, 2013. 91 с.

ISBN 978-5-4437-0141-7

Конференция проводится при поддержке Президиума Сибирского отделения Российской академии наук, Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Новосибирской области, Комиссии РФ по делам ЮНЕСКО, Технопарка Новосибирского Академгородка.

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. В. Никулин.

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

д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов, канд. хим. наук В. А. Дребущак,  
канд. хим. наук В. В. Каичев, канд. физ.-мат. наук С. Н. Трухан,  
канд. физ.-мат. наук Д. Ф. Хабибулин, В. В. Никулин,  
д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Цыбуля, канд. физ.-мат. наук А. Н. Шмаков

**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, д-р физ.-мат. наук М. В. Федин,  
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,

**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,  
канд. физ.-мат. наук Д. И. Строкотов, канд. физ.-мат. наук В. В. Яньшолле,  
д-р биол. наук, проф. Л. В. Омелячук,  
канд. физ.-мат. наук А. В. Чернышев, канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин.

ISBN 978-5-4437-0141-7

© Новосибирский государственный университет, 2013

**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 51st INTERNATIONAL STUDENTS  
SCIENTIFIC CONFERENCE**

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

**April, 12–18, 2013**

**PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES**

**Novosibirsk, Russian Federation  
2013**

Proceedings of the 51<sup>st</sup> International Students Scientific Conference «*Students and Progress in Science and Technology*». Physical methods in natural sciences/ Novosibirsk State University. Novosibirsk, Russian Federation. 2013. 91 pp.

ISBN 978-5-4437-0141-7

The conference is held with the significant support of Presidium of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Russian Foundation for Basic Research, Novosibirsk Region Government, Commission of the Russian Federation for UNESCO, Technopark of Novosibirsk Akademgorodok.

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

**Scientific committee of the section «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. S. V. Tsybulya,  
Cand. Phys. Math. S. N. Trukhan, Cand. Phys. Math. A. N. Shmakov,  
V. V. Nikulin

**Scientific committee of the section «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

**Scientific committee of the section «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, Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin,  
Cand. Phys. Math. D. I. Strokotov, Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole.

# БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 615.014.22:615.011

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПЛЕНОК И ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ САМОСТРУКТУРИРУЮЩИХСЯ ПОЛИМЕРОВ

А. У. Байбакина, Н. Р. Рахимгереева, А. А. Накипекова,  
Т. Б. Жанабергенов

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Самоструктурирующиеся полимеры уже давно успешно используются в качестве носителей лекарственных веществ. Преимущества таких систем связаны с возможностью реализации контролируемого поступления лекарства в соответствующие зоны живого организма и со снижением токсического действия препарата благодаря его постепенному высвобождению из полимера, что исключает возникновение мгновенных высоких локальных концентраций лекарства. Объектами исследования нашей работы были выбраны: поливиниловый спирт (ПВС), желатин, лекарственные вещества – алхидин (Ах) и рихлокаин (Рх).

Были изучены возможности получения физически сшитых композиционных носителей лекарственных веществ на основе самоструктурирующихся природных полимеров. Выбор компонентов обусловлен тем, что они способны к гелеобразованию, совместимы и разрешены для использования в медицинской практике.

Методами равновесного набухания, ИК-спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии установлено, что в композициях полимеры с лекарственными веществами взаимодействуют с образованием комплексов, стабилизированных водородными связями и гидрофобными взаимодействиями. При этом нужно отметить, что получаются совместимые, однородные физические гели, отвечающие требованиям, предъявляемым к носителям лекарственных веществ. Исследование кинетики сорбции и десорбции алхидина и рихлокаина и их количественные характеристики показали возможность использования данных полимерных материалов в качестве пролонгирующих носителей лекарственных веществ.

Научные руководители – д-р хим. наук, проф. М. К. Бейсебеков,  
Б. М. Кудайбергенова.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЕ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕМБРАН ЭРИТРОЦИТОВ**

О. Ю. Глущенко

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Глицирризиновая кислота (ГК) – сапонин, содержащийся в корне солодки, известна своей высокой и разнообразной биологической активностью. ГК широко используется в медицине для лечения различных заболеваний. В водных и водно-спиртовых растворах она способна образовывать мицеллы, кроме того, ГК образует супрамолекулярные комплексы с различными органическими молекулами и может применяться для доставки лекарств. В опытах над животными с атеросклерозом ГК и ее соли снижают содержание холестерина, липопротеидов низкой плотности и триглицеридов в крови. Однако механизм её воздействия на организм до сих пор неясен.

Важной проблемой также является выяснение молекулярного механизма усиления терапевтического эффекта лекарств в присутствии ГК. Ранее было обнаружено, что ГК способна образовывать прочные комплексы с молекулами холестерина. Этот факт частично проясняет механизм воздействия ГК на организм, но он, тем не менее, нуждается в более детальном изучении.

Продвижение в понимании механизма биологической активности ГК могут дать данные о ее влиянии на свойства клеточных мембран. Данная работа посвящена исследованию воздействия ГК на проницаемость, упругость и структуру мембран эритроцитов. Эритроциты – клетки крови, которые широко используются в качестве модельных объектов для исследования воздействия химических соединений. Исследования проводились с применением методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Метод ЯМР продемонстрировал увеличение проницаемости мембран для молекул формиата натрия в присутствии ГК. Кроме того, методом АСМ выявлены изменения упругих свойств мембран эритроцитов, а также структуры поверхности эритроцитов в присутствии ГК. Поскольку холестерин является компонентом клеточных мембран, отвечающим за их жесткость, установленные в данной работе факты могут служить косвенным доказательством взаимодействия ГК с мембранным холестерином.

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

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ  
ЛИГАНД–РЕЦЕПТОР С ЛАМИНИН СВЯЗЫВАЮЩИМ БЕЛКОМ  
МЕТОДОМ ПРОТОЧНОЙ ЦИТОМЕТРИИ**

А. А. Городецкий

Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор»  
Новосибирский государственный университет

Взаимодействие типа лиганд-рецептор играет ключевую роль в иммунитете и этот тип взаимодействия важен для различных биологических процессов. Проточная цитометрия позволяет детально исследовать кинетику связывания лиганда с рецептором на поверхности клеток. Разработанная модель, учитывающая гетерогенность частиц по количеству рецепторов, позволяет получить подробную информацию о константах ассоциации и диссоциации комплексов лиганд-рецептор, а также функцию распределения рецепторов на частицах, которая может быть измерена непосредственно в ходе эксперимента [1]. В данной работе используется уникальная система Bio-Plex, позволяющая проводить анализы мультипараметрически.

Объектом исследования в настоящей работе является рекомбинантный ламинин связывающий белок (ЛСБ) человека. ЛСБ является рецептором для некоторых вирусов, в том числе и для вируса клещевого энцефалита. Моноклональные антитела (МКА) к ЛСБ способны блокировать проникновение вируса в клетку. Факт антигенной схожести нативного и рекомбинантного ЛСБ установлен в работе [2].

Целью работы является экспериментальное и теоретическое изучение связывания рекомбинантного ЛСБ с мышинными МКА IgG к ЛСБ на латексных частицах. С помощью методов проточной цитометрии и иммуноферментного анализа получены данные о кинетических характеристиках формирования комплексов лиганд-рецептор для ряда антител.

---

1. Surovtsev I.V., Razumov I.A., Nekrasov V.M., Shvalov A.N., Soini J.T., Maltsev V.P., Petrov A.P., Loktev V.B., Chernyshev A.V. Journal of Theoretical Biology - 2000. – V.206. – P. 407-417.

2. A. V. Sorokin, A. M. Mikhailov, A. V. Kachko, E. V. Protopopova, S. N. Konovalova, M. E. Andrianova, S. V. Netesov, A. N. Kornev, Loktev V. B. Biochemistry (Moscow), Vol. 65, No. 5, 2000, pp. 546-553.

Научный руководитель – канд. биол. наук В. А. Терновой.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ТГЦ ИЗЛУЧЕНИЯ НА КЛЕТКУ**

Л. Н. Дворецкая

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет  
информационных технологий, механики и оптики

Терагерцовое излучение проникает в органические материалы. Известно что вследствие низкой энергии фотона оно не вызывает их повреждений, связанных с ионизирующими излучениями. Однако любое электромагнитное излучение оказывает влияние на молекулярный и клеточный уровень различных тканей живого организма. Исследование физических механизмов воздействия терагерцового излучения на животную клетку и построение теории позволяющей точно описать этот процесс, является темой данного исследования.

Обмен веществами между клеткой и межклеточной средой происходит в результате транспорта ионов веществ через электрически заряженную клеточную мембрану.

Для моделирования клетки выбрана программа microwave CST studio. Животная клетка представлена в виде сферического резонатора диаметром 17 мкм. Размеры мембраны (толщина 10 нм) и ядра (диаметр 1 мкм) не сопоставимы с длиной волны терагерцового диапазона (3-0,03 мм), т.о. моделированная клетка не включала в себя их и различные органеллы.

При прохождении плоской волны  $f = 0,05-7$  ТГц, получены графики зависимости коэффициентов рассеяния (RCS) и поглощения (ACS) от частоты, для воды и диэлектрической проницаемости  $\epsilon = 50$ . С помощью этих графиков посчитано сечение экстинкции и квантовый выход.

Взаимодействие сферических колебаний внутри клетки приводит к изменению полярности и гомеостаза клетки (т.о. к некрозу), возбуждению волн, которые нарушают процессы жизнедеятельности клетки и могут повлиять на структуру хроматина, что приведет к изменению генов, белков, которые они кодируют и нарушить точность передачи генетической информации от клетки к клетке, т.е. привести к мутациям.

В настоящей работе, получены следующие результаты: построена модель взаимодействия ТГц излучения с клеткой; при моделировании клетки, с учётом относительных диэлектрических проницаемостей цитоплазмы и воды, получены собственные резонансные частоты в области 0,05-7 ТГц; получены частотные зависимости коэффициентов рассеяния, поглощения, пропускания. В работе проверяется достоверность данных об изменении процессов жизнедеятельности клетки.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОЧАСТИЦ $\text{TiO}_2$ НА КЛЕТОЧНУЮ МЕМБРАНУ МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

С. В. Демчук

Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор»,  
г. Новосибирск

В настоящее время в технике и медицине происходит активное внедрение наноматериалов, к которым относятся и ультратонкие порошки диоксида титана, нашедшие весьма широкое применение.

Взаимодействие наночастиц диоксида титана и поверхности клетки представляет интерес в первую очередь в связи с разработками противовирусных и противораковых препаратов на их основе.

В рамках данной работы методом атомно-силовой спектроскопии исследованы изменения локальных механических характеристик поверхности эритроцитов человека под действием наночастиц (4-8 нм)  $\text{TiO}_2$  в двух кристаллических модификациях – аморфная и анатаз. Осуществлены силовые измерения с модификацией поверхности АСМ-зондов. Показана зависимость сил связывания наночастиц  $\text{TiO}_2$  с поверхностью эритроцита от их кристаллической модификации.

Разработана методика изменения геометрических параметров АСМ-зондов (формирование площадки диаметром 50-250 нм), модифицированные зонды визуализировали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Методом атомно-силовой микроскопии (сканирование поверхности эритроцитов в полуконтактном режиме) показано встраивание наночастиц  $\text{TiO}_2$  в клеточную мембрану.

Для исследований использовали капиллярную кровь условно здорового донора. Силовые измерения проводили в среде фосфатно-солевого буфера при комнатной температуре (эритроциты сорбировали на покрытые полилизинном предметные стекла).

В работе использовали атомно-силовой микроскоп Solver P47Bio (NT-MDT, Россия) и электронный микроскоп JEM 1400 (Jeol, Япония).

---

Ismagilov Z.R., Shikina N.V., Bessudnova E.V., Korneev D.V., Ishchenko A.V., Chesalov E.A., Vladimirova A.V., Ryabchikova E.I., The Effect of Chemical Treatment Conditions of Titanium Dioxide Sols on Their Dispersion and Cytotoxic Properties, Chem. Eng. Tr., Vol. 27, pp. 241-246

Научный руководитель – Д. В. Корнеев.

## **ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ГЕНЕРАТОРА СВЕТА ДЛЯ МЕДИЦИНСКОГО ГАЗОАНАЛИЗА**

Н. Ю. Духовникова, А.А. Бойко

ООО «Специальные технологии», г. Новосибирск  
Новосибирский государственный технический университет

В настоящее время одним из актуальных направлений исследований является анализ газового состава атмосферы, в том числе регистрация концентрации летучих соединений в выдыхаемом человеком воздухе. На российском и зарубежном рынках представлено несколько аппаратных комплексов и приборов, нацеленных на решение данных задач. Основными недостатками существующих приборов являются малое количество детектируемых газов из-за узкого спектрального диапазона перестройки, большие габаритные размеры и вес, а также высокая стоимость.

Выдох человека является сложной газовой смесью различных соединений, таких как изотопы  $\text{CO}_2$ , этилен ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ), метан ( $\text{CH}_4$ ) и другие. Регистрация и определение концентраций таких соединений могли бы дать ценную информацию для диагностики биохимических и физиологических процессов, протекающих в организме, как в норме, так и при заболеваниях.

Некоторые молекулы, образующиеся в организме при специфичных условиях, могут служить естественными газообразными биомаркерами.

Оптикоакустическая спектроскопия (ОАС) является одним из наиболее чувствительных методов газоанализа, особенно при использовании лазерных источников излучения.

Нами разрабатывается газоанализатор на базе оптикоакустического детектора (ОАД) с применением в качестве источника излучения параметрического генератора света (ПГС), на базе кристаллов PPLN и AGS.

Длина волны излучения ПГС перестраивается в широком спектральном диапазоне от 2.4 до 3.9 мкм механическим перемещением кристалла относительно оси резонатора при помощи прецизионного координатного столика без использования температурной перестройки в случае PPLN структур и в спектральном диапазоне от 4 до 9 мкм поворотом кристалла в резонаторе относительно луча накачки в случае AGS.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Д. Б. Колкер.

## **РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ МНОГОЭЛЕМЕНТНОЙ ИК МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК**

С. Д. Иванов

Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Тепловидение получило распространение в широком спектре областей – в промышленности, строительстве, охранных системах, а также в медицине. Так, разработаны и используются методики диагностики воспалений и опухолей молочных желез, лимфоузлов, ЛОР заболеваний, поражения нервов и патологии сосудов конечностей.

В большинстве тепловизионных устройств необходимо охлаждение чувствительных элементов устройства. Пирозлектрический эффект является одним из известных физических принципов построения неохлаждаемых тепловизоров. Такие устройства имеют небольшую размерность, не более 350x350 элементов, она ограничена физико-технологическими факторами, в первую очередь проблемами теплоизоляции чувствительного элемента, размещением его на поверхности свободной мембраны. В связи с этим возникает задача разработки принципиально новых тепловизионных систем, более технологичных и обладающих в то же время большей размерностью - до 1000x1000 элементов и более.

В процессе работы экспериментально были определены зависимости пирозлектрического коэффициента от толщины и поданного смещения пленок разной структуры.

Рассматривается возможность создания многоэлементной ИК матрицы на основе пирозлектрических пленок одного из лучших материалов (ниобата бария-стронция) со следующими конструктивными особенностями:

1. Использование высококачественных пирозлектрических пленок для создания чувствительного элемента.
2. Чувствительный элемент находится на поверхности подложки, он не теплоизолирован от нее.
3. Использование пирозлектрического сигнала, в режиме накопления заряда как при нагреве элемента, так и при его охлаждении.

Исследование направлено на определение конструктивных параметров элемента для получения более высоких характеристик тепловизора.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Э. Г. Косцов.

## **ВЛИЯНИЕ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ НА СТРУКТУРУ И ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ ДНК/ДНК-КОМПЛЕКСОВ ОЛИГОНУКЛЕОТИДОВ**

К. А. Иванова

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Олигонуклеотиды – короткие синтетические фрагменты нуклеиновых кислот - находят все большее применение как в фундаментальных исследованиях, так и прикладных разработках за счет их способности образовывать комплексы с комплементарными последовательностями нуклеиновых кислот. Эффективность формирования таких комплексов в существенной степени зависит от условий, в которые они помещены.

Цель работы - исследовать влияние алифатических спиртов на структуру и термическую стабильность комплексов олигонуклеотидов.

Методом кругового дихроизма исследовали вторичную структуру олигодезоксирибонуклеотидов и их комплексов. Их КД-спектры, как в водном растворе, так и при добавлении до 50% объемной доли спирта (этанола, этиленгликоля, диэтиленгликоля, глицерина, цианоэтанола и 2,2,2,-трифторэтанола), характерны для В-формы дцДНК. Кроме того, добавление спирта не приводит к значительным структурным перестройкам в структуре олигонуклеотидов и их комплексов.

Методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала исследована термическая стабильность 7 комплексов олигонуклеотидов различной длины (8-20 п.о.) и ГЦ-состава (26-86%). Долю алифатических спиртов изменяли в пределах от 0 до 50%. Установлено, что увеличение концентрации спирта (за исключением 2,2,2,-трифторэтанола), приводит к линейному снижению температуры плавления дуплексов.

Составлена база данных термодинамических параметров формирования комплексов. Проведен анализ полученных данных с помощью модели, предполагающей дополнительное связывание молекул воды и соразтворителя с ДНК при формировании комплекса. Показано, что в зависимости от типа алифатического спирта изменяется число молекул воды, связывающихся с ДНК при образовании дуплекса, в то время как число молекул спирта остается неизменным. Данная модель позволяет с высокой точностью (1,34°C) прогнозировать температуру плавления ДНК/ДНК-комплексов олигонуклеотидов в присутствии алифатических спиртов.

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

## **ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ МОРФОЛОГИИ КЛЕТОК E. COLI С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕЙ ПРОТОЧНОЙ ЦИТОМЕТРИИ**

А. И. Конохова

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Характеризация морфологии бактерий является актуальной биофизической задачей. Высокая скорость и точность решения данной задачи позволит применять ее не только для идентификации микроорганизмов, но и для исследования кинетики роста и морфологических изменений бактерий при изучении клеточного цикла или проведении анализов на устойчивость бактерий к антибиоткам. Для решения этой задачи предлагается характеризовать отдельные бактерии по измерению зависимости интенсивности рассеянного ими света от угла (индикатрисе светорассеяния).

В данной работе представлен метод характеристики морфологии палочкообразных бактерий с использованием сканирующего проточного цитометра. Метод основан на измерении индикатрисы светорассеяния отдельных клеток и решении обратной задачи светорассеяния с целью определения их морфологических параметров. Решение обратной задачи осуществляется подгонкой экспериментальных сигналов теоретически рассчитанными, используя в качестве оптической модели клетки цилиндр с полусферическими концами. Для ускорения процесса подгонки была насчитана база данных из 80.000 теоретических индикатрис в широком диапазоне параметров модели (длина, диаметр, показатель преломления, угол ориентации частицы в потоке). Все это позволяет получать как индивидуальные характеристики отдельно взятой бактерии (длина и диаметр), включая оценку точности их определения, так и распределения по размерам всей популяции. При этом одним из важных достоинств данного метода является применимость к любым палочкообразным бактериям.

Представленный метод был протестирован на двух штаммах бактерий E.coli XL2-Blue и XL10-GOLD. Полученные распределения по длине и диаметру клеток находятся в хорошем согласии с литературными данными и проведенными в качестве контроля микроскопическими измерениями. Средняя погрешность в определении длины и диаметра составила 135 и 15 нм соответственно, что является хорошей точностью для оптического метода.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин.

## СТЕНД ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА УСТАНОВКЕ БНЗТ

Р. А. Морозов, А. С. Кузнецов, И. М. Щудло, А. Н. Макаров, Д. А. Касатов  
Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск

Перспективным подходом в лечении ряда злокачественных опухолей, в первую очередь, трудноизлечимых опухолей головного мозга и меланом, рассматривается бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ). Метод основан на селективном накоплении нерадиоактивного нетоксичного изотопа  $^{10}\text{B}$  в опухоли и последующем облучении надтепловыми нейтронами. В результате поглощения нейтрона бором происходит ядерная реакция  $^{10}\text{B}(n,\alpha)^7\text{Li}$  с большим выделением энергии именно в той клетке, которая содержала ядро бора, что приводит к ее гибели.

Однако широкое внедрение методики в клиническую практику требует компактных безопасных относительно недорогих источников надтепловых нейтронов. Для таких генераторов нейтронов могут использоваться ускорители заряженных частиц. В ИЯФ СО РАН был спроектирован и построен прототип источника эпитепловых нейтронов на основе ускорителя-тандема с вакуумной изоляцией и генерации нейтронов в результате реакции  $^7\text{Li}(p,n)^7\text{Be}$ .

В 2011 году была проведена серия экспериментов по облучению клеток, в результате которых был определен подходящий режим работы источника, было произведено облучение клеточных культур (глиобластома U87, фибробласты мыши), с последующим анализом клеток на цитометре.

В настоящее время на установке проводятся дальнейшие *in vitro* исследования БНЗТ. Для проведения следующей серии экспериментов с биологическими образцами установка была оборудована стендом, позволяющим термостатировать контейнеры с облучаемыми образцами, использовать различные замедлители нейтронного потока и осуществлять дозиметрию. Проведена серия экспериментов, в результате которой был выработан подход по определению радиационной дозы, получаемой клетками. Проведены эксперименты с биологическими образцами.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. Ю. Таскаев.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ НА СКЕЛЕТНУЮ МЫШЕЧНУЮ ТКАНЬ МЛЕКОПИТАЮЩИХ (КРЫСА, КОРОВА)**

А. Ф. Мунзарова<sup>1</sup>, Т. В. Сажина<sup>2</sup>, Е. Л. Зеленцов<sup>3</sup>

1) Институт химической кинетики и горения СО РАН,  
Новосибирский государственный университет

2) Новосибирский государственный медицинский университет

3) МЦ Интегральная медицина, Новосибирск

В 2009-2012 гг. в Сибирском центре фотохимических исследований СО РАН проводились исследования взаимодействия терагерцового лазерного излучения со скелетной мышцей млекопитающего (крыса, корова) на первой очереди лазера на свободных электронах (ЛСЭ), который генерирует излучение с плавной перестройкой длин волн 100-200 мкм в виде 50-пикосекундных импульсов, следующих с частотой повторения 5,6 МГц, при средней плотности мощности 20 Вт/см<sup>2</sup> и пиковой мощности 0,6 МВт. Общеизвестным является тот факт, что лазер терагерцового диапазона излучает на длинах волн, характерных для Ван дер Ваальсового взаимодействия и взаимодействия биологических молекул (белки, ДНК и др.) [1], в связи с этим ожидалось появление специфических повреждений мышечной ткани, характерных для данных длин волн.

Образцы исследовались при помощи электронной и оптической микроскопии. Проводилось гистологическое описание и статистическая обработка микрофотографий.

Установлено, что область воздействия на мышечную ткань для данных длин волн и данной мощности излучения значительно больше, чем характерная глубина проникновения ТГц импульсов. Поэтому существует предположение, что воздействие вызвано прохождением мощных ударных волн давления [2].

---

1. Петров А.К., Козлов А.С., Тарабан М.Б., Горячковская Т.Н., Малышкин С.Б., Попик В.М., Пельтек С.Е. Мягкая абляция биологических объектов под воздействием субмиллиметрового излучения лазера на свободных электронах // Доклады академии наук. 2005. Т.404, №5. С.698-700.

2. Мунзарова А.Ф. Исследование влияния терагерцового излучения на агрегацию эритроцитов. // Международная научная студенческая конференция, Секция: «Физические методы в естественных науках», 13 – 19 апреля 2012 г, Новосибирск.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ИММУНОГЛОБУЛИНОВ МЕТОДОМ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА

Е. О. Папаева

Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор»  
Новосибирский государственный университет

Иммуноглобулины (Ig) и другие белковые препараты – важные продукты фармацевтического производства, контроль уровня белка в которых является важной задачей. Однако набор способов определения концентрации белков ограничен. Кроме того, даже такой часто используемый метод, как иммуноферментный анализ имеет чувствительность определения общего IgG только 0,2 мг/мл.

Целью данной работы являлась разработка способа количественной оценки содержания IgG, прежде всего в низких концентрациях, для анализа фармпрепаратов и сыворотки крови человека и животных после иммунизации (вакцинации) или инфекционного заболевания с помощью капиллярного электрофореза.

В настоящей работе в качестве объекта исследования были использованы лекарственные препараты на основе человеческого иммуноглобулина IgG. За основу исследования белков методом капиллярного электрофореза был взят разработанный ранее протокол с рекомендованными условиями для разделения сывороточных белков [1]. Были проведены исследования по оптимизации условий анализа образцов, содержащих IgG: выбору значений pH и молярной концентрации буфера, количества и способа введения пробы в капилляр, а так же влиянию сахаров на чувствительность определения IgG.

В результате исследования были получены электрофореграммы и калибровочные линии для образцов, содержащих низкие концентрации IgG. Показано, что чувствительность определения IgG находится в области концентраций 1-5 мкг/мл. Разработаны методы, снижающие предел детектирования IgG. Также было исследовано содержание IgG в сыворотке крови лабораторных мышей, выживших после заражения их природным патогеном - вирусом экстремелии (оспы мышей).

---

1. Комарова Н.В., Каменцев Я.С. Практическое руководство по использованию систем капиллярного электрофореза «Капель».- СПб.: ООО «Веда», 2006.- 212 с.

Научный руководитель – канд. биол. наук В. А. Терновой

**ИЗУЧЕНИЕ РЕЧЕВОГО ТРАКТА ЧЕЛОВЕКА МЕТОДОМ МРТ**

Е. Д. Петровский

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящее время широко осознана необходимость сохранения культуры малочисленных народов. В нашей стране языки более тридцати этнических групп, проживающих на территории Сибири и Дальнего Востока, входят в список исчезающих [1], и потому проблема методов сохранения языков является на данный момент актуальной.

В Международном томографическом центре, совместно с Институтом филологии СО РАН, выполняется проект «Сравнительные исследования артикуляционных баз коренных народов Сибири», целью и идеей которого является сохранение данных об артикуляции, специфической для ряда исчезающих языков. В рамках проекта осуществляется накопление базы данных МРТ изображений речевого тракта дикторов при воспроизведении различных звуков и словоформ, с дальнейшей обработкой и сохранением данных о специфических характеристиках артикуляции как одной из составных частей языка.

Обработка до настоящего времени проводилась специалистами Института филологии вручную, и представляла собой описание качественных характеристик артикуляции с проведением нескольких количественных измерений. В рамках данной работы выполняется частичная автоматизация процесса анализа; целью работы является увеличение количества параметров, измеряемых для каждой артикуляции, а также ускорение процедуры.

В работе выделен набор информативных параметров, доступных для автоматического измерения; выявлены комбинации параметров, характеризующие артикуляцию независимо от диктора; также построен ряд классификаторов, описывающих качественные признаки, указываемые при описании артикуляции специалистом.

Таким образом, появляется возможность полуавтоматического анализа изображений речевого тракта, результаты которого частично повторяют качественное описание, и дополняют его большим числом количественных параметров. Ускорение процедуры анализа вследствие автоматизации также открывает ряд новых возможностей.

---

1. Красная книга языков народов России. М., 1994

# ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 621.793

## ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ

И. А. Азаров, Ю. Ю. Чопорова

Институт физики полупроводников СО РАН

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

Новосибирский государственный университет

В настоящее время большой интерес вызывает новый для экспериментальной техники диапазон частот электромагнитных волн. Область частот  $10^{12} \div 10^{13}$  Гц стала доступна благодаря разработке источников и приёмников для данного диапазона. Одним из таких источников является новосибирский лазер на свободных электронах. Также существует ряд активных оптических элементов для этого диапазона – поляризаторы, фазосдвигающие устройства. Всё это является базой для создания точных аналитических приборов для исследования взаимодействия излучения терагерцового диапазона с различными материалами и средами.

Эллипсометрия является наиболее точным методом для измерения оптических констант на чистых поверхностях объёмных материалов, а также толщин и оптических констант поверхностных плёнок и покрытий. Возможности эллипсометрии в видимом диапазоне ограничены прозрачностью материалов плёнок и качеством отражающей поверхности. С увеличением длины волны требования к качеству поверхности существенно снижаются. Становятся возможными измерения на грубо обработанных поверхностях, а также измерения шероховатых плёнок и мелкодисперсных покрытий, в том числе капельных.

В работе создан макет эллипсометра терагерцового диапазона и проведены исследования работы его составных частей, а также пробные измерения тестовых образцов. Проведено согласование элементов схемы эллипсометра. Исследованы погрешности, вносимые различными элементами схемы. Найдены оптимальные условия работы узлов оптической схемы. Разработаны методики измерения сигналов и вычисления эллипсометрических углов для данной схемы эллипсометра. Найдены алгоритмы корректировки систематических поправок для данной схемы. Вычислено влияние случайных ошибок на результаты измерений.

Проведены измерения следующих тестовых образцов: воздух (в режиме пропускания), граница объёмного кремния, плёнки крови различной толщины на кремнии. Точность измерения параметров  $\Psi$  и  $\Delta$  составила  $0,3^\circ$  и  $5^\circ$ , соответственно.

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

# ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ $\text{Cu}_x\text{S}$ , СФОРМИРОВАННЫХ В ПЛЁНКАХ ЛЕНГМЮРА-БЛОДЖЕТТ

С. А. Бацанов, А. К. Гутаковский

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

Полупроводниковые нанокристаллы, 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. Оптические свойства кристалла существенно изменяются при переходе из крупнокристаллического состояния в наноструктурированное.

Сульфид меди является перспективным материалом для оптоэлектроники и фотовольтаики. Он интересен тем, что может формироваться в различных стехиометрических формах (фазах), ширина запрещённой зоны которых существенно различается.

Сульфид меди (I)  $\text{Cu}_2\text{S}$  существует в трёх кристаллических модификациях. Температуры фазовых переходов этих модификаций:  $\alpha \rightarrow \beta$  ( $103^\circ\text{C}$ ),  $\beta \rightarrow \gamma$  ( $435^\circ\text{C}$ ). Сульфид меди (II)  $\text{CuS}$  имеет гексагональную кристаллическую структуру, при нагревании разлагается до  $\text{Cu}_2\text{S}$  и паров серы. Основной вопрос: сохраняется ли зависимость стехиометрической формы от условий синтеза (сохраняется ли температура переходов для нанокристаллов).

В связи с этим актуальным является исследование структурно-морфологических свойств нанокристаллов сульфида меди в зависимости от условий их синтеза. Наиболее адекватным методом исследования структурных особенностей нанокристаллов является высокоразрешающая электронная микроскопия (ВРЭМ).

В данной работе представлены результаты электронно-микроскопических исследований нанокристаллов  $\text{CuS}$  сформированных в плёнках бегената меди, нанесённых на углеродные подложки методом Ленгмюра-Блоджетт, непосредственно после сульфидирования и после термического отжига в атмосфере аргона при температуре  $150^\circ\text{C}$ . Исследования проведены на электронных микроскопах JEM-4000EX и TITAN 80-300. Установлено, что отжиг приводит к увеличению среднего размера кристаллитов в 2.5 раза. Из анализа межплоскостных расстояний установлено, что в тестовом материале формируется гексагональная кристаллическая фаза  $\text{Cu}_x\text{S}$  с  $x=1-1.4$ .

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. К. Гутаковский.

## ЭЛЕКТРОННЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

М. С. Белкин

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

Халькогениды переходных металлов являются одним из чрезвычайно интересных и практически важных классов неорганических веществ. Повышенный интерес исследователей к этим соединениям обусловлен прежде всего их замечательными структурными, электрофизическими, магнитными, оптическими, механическими и химическими свойствами, которые с успехом могут быть использованы в целом ряде областей новой техники и технологии. С теоретической точки зрения халькогениды переходных металлов являются прекрасными моделями для исследования новых физических явлений и физико-химических свойств, присущих неорганическим материалам металлокластерной природы и системам с пониженной размерностью.

В последнее время особенно возрос интерес к халькогенидам тугоплавких переходных металлов, т.е. металлов начала переходных рядов – IV – VII групп, в первую очередь к соединениям с протяженными металл – металл взаимодействиями.

Целью данной работы является исследование электронных транспортных свойств пленок халькогенидов переходных металлов.

В работе исследовались соединения переходных металлов из V и VI групп, таких как молибден (Mo) ниобий (Nb) и вольфрам (W). Контакт с материалом осуществлялся хорошо проводящей серебряной пастой. Измерения проводились по четырех-контактной схеме, с целью исключения вклада электросопротивления контактов в значение проводимости образца, в диапазоне температур от 300 до 4.2 К.

Для всех пленок наблюдается экспоненциальное возрастание электросопротивления с понижением температуры. Но функционально это возрастание лучше описывается флуктуационной моделью туннелирования (fluctuation-induced tunneling, FIT) с помощью уравнения  $\sigma(T) = \sigma_0 \exp[T_0/(T+T_0)]$ . Это указывает на то, что пока основной вклад в электросопротивление дают контактные области между чешуйками халькогенидов образующих пленку.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А. И. Романенко.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР ТРАНСФОРМАЦИИ  
СОЕДИНЕНИЙ ВНЕДРЕНИЯ Ni(cyclam)@CB[8] и Ni(cyclen)@CB[8]  
ПРИ ОТЖИГЕ В ВОДОРОДЕ**

А. С. Берёзин

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

Cyclen и Cyclam находят широкое применение в ролигандов и катализаторов различных реакций. Кукурбит[n]урилиз-за своих свойств и строения используется в роли «нанореактора», для синтеза соединений.

В данной работе представлены результаты исследования трансформации соединений Ni(cyclam) и Ni(cyclen), внедренных в CB[8] при отжиге в атмосфере водорода через 20 градусов в интервалах 200-380°C и 200-320°C соответственно. Спектры ЭПР снимались после каждого этапа отжига в водороде и длительного пребывания на воздухе.

Соединение с цикламом имеет состав  $\{[Ni(cyclam)]@CB[8]\}Cl_2 \cdot 16H_2O$  [1]. Ni находится в состоянии  $3d^8$ , имея плоско квадратное окружение из атомов азота циклама, из-за чего спектр ЭПР не наблюдается. При напуске воздуха в такую систему, происходит окисление никеля до состояния  $3d^7$ . Каждый последующий отжиг в водороде приводит к восстановлению Ni до состояния  $3d^8$ . Предположительно, после отжига Ni(cyclam) смещается к порталу кавитанда, образуя сэндвичевую структуру.

Соединение с цикленом имеет состав  $\{cis-[Ni(cyclen)(H_2O)Cl]@CB[8]\}Cl \cdot 12H_2O$ . Непосредственно после синтеза ионы Ni находились в состоянии  $3d^8$  и не проявлялись в спектрах ЭПР. После отжига образца в атмосфере  $H_2$  появляется спектр ЭПР  $3d^9$  состояния ионов Ni. Нахождение образца на воздухе приводит к окислению Ni до состояния  $3d^7$ .

При отжиге образцов в водороде при 220°C появляется и возрастает по интенсивности, по мере возрастания температуры, одиночная широкая линия с  $g = 2,003$  в обоих соединениях. Предполагается, что появление этого сигнала ЭПР связано с образованием кластеров металлического никеля. Наличие кластеров металла, в схожих соединениях  $Cu(acac)_2$  внутри Cucurbit[8]uril, фиксировалось электронной микроскопией [2].

В обоих случаях, на конечном этапе отжига, сигналы ЭПР ионов Ni исчезают, а интенсивность одиночной линии от кластеров Ni максимальна.

[1] Е. А. Коваленко [и др.]. // *Координационная химия*. **2011**, том 37, № 3.

[2] V. V. Bakovets [et al.], *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. **2010**. V. 5, №12.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МАССИВНЫХ ОБРАЗЦОВ СПЛАВА $Fe_{86}Mn_{13}C$ ПОСЛЕ КРИОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

М. Н. Волочаев, Е. В. Короткова  
Восточно-Казахстанский государственный университет имени  
С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск  
Сибирский государственный аэрокосмический университет имени  
академика М. Ф. Решетнева, г. Красноярск

Сплав  $Fe_{86}Mn_{13}C$  представляет определенный научный интерес в связи с его уникальными механическими, электрическими и магнитными свойствами. В частности появление локальной намагниченности материала в процессе эксплуатации. В работе исследуется структура утоненных образцов сплава, полученных методом электрополировки и ионного травления. Исследования структуры проводились методом высокоразрешающей электронной микроскопии и микродифракции. В исследуемых образцах обнаружен Лоренцев контраст, что подтверждается расщеплением рефлексов на электронограммах [1], полученных с образцов сплава. Было невозможно получить четкое изображение в точном фокусе, но при дефокусировки обнаружены четкие картины периодического магнитного контраста с периодом 7-8 нм. Наряду с аустенитной и мартенситной фазами выявлены карбидные фазы. Рефлексы с аустенитной фазы (ГЦК решетка в плоскости (111)) вполне четкие.

Обнаружено изменение кристаллической и магнитной структурах как в массивном, так и в пленочном состоянии после криомеханической обработки.

Авторы выражают благодарность Черкову А.Г. за помощь в проведении эксперимента.

---

1. Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М. "Электронная микроскопия тонких кристаллов", Москва, 1968 г.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Л. И. Квеглис.

## РАЗРАБОТКА НОВОГО ЭМПИРИЧЕСКОГО МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР

М. А. Высотин

Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Кремний является основным химическим, элементом используемым в современной микроэлектронике. Весьма перспективными представляются направления, связанные с применением кремниевых наноструктур, пористого и аморфного кремния. В связи с этим задачи по расчёту динамики систем с числом атомов кремния больше тысячи становятся всё более актуальным. Большой размер рассматриваемых систем и отсутствие периодичности делают невозможными расчёты из первых принципов в связи с огромным объёмом вычислений. В подобных случаях часто прибегают к использованию эффективных межатомных потенциалов, в которых межатомное взаимодействие моделируется эмпирически подобранным эффективным потенциалом взаимодействия. На данный момент наиболее часто используются потенциалы Стилинджера-Вебера, Терсоффа и модель EDIP.

В данной работе показано, что вышеупомянутые модели потенциалов, несмотря на то, что они неплохо описывают различные свойства кремниевых систем (упругие модули, энергии вакансий и др.) со структурой близкой к кристаллической, приводят к большой погрешности в определении сил, действующих на атомы, которые вычисляются из первопринципных расчетов. При этом сравнение производилось на большой выборке различных структур, соответствующих аморфному состоянию кремния, различным деформациям кристалла, а также наночастицам разного размера. В среднем, относительная ошибка в определении сил для потенциала Терсоффа составила 86% от величины сил, вычисленных из DFT расчетов. Для двух других моделей ошибки в определении сил составили 150-200%.

В ходе работы предложен новый потенциал, основанный на усложненной модели внедренного атома (EAM). 30 подгоночных параметров потенциала подбирались методом подгонки сил (*force matching method*) с помощью генетического алгоритма. В результате, силы, рассчитанные с помощью этого потенциала, хорошо согласуются с результатами *ab-initio* расчётов.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А. С. Фёдоров.

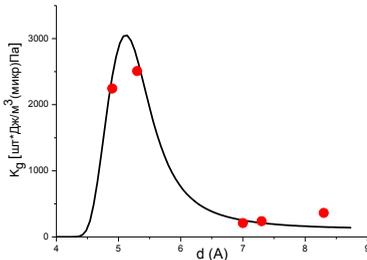
## КОНСТАНТЫ ГЕНРИ АДСОРБЦИИ $H_2$ ПРИ 77 К НА АЛЮМОФОСФАТНЫХ ЦЕОЛИТАХ $AlPO_4$ . ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И СОПОСТАВЛЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

И. В. Грнев

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

Одним из важнейших параметров характеризующим эффективность катализатора, является константа Генри. Константу Генри,  $K_g$ , можно определить как количественную меру межмолекулярного взаимодействия адсорбент – адсорбат. При малых величинах адсорбции, изотерма адсорбции описывается уравнением Генри:  $A=K_gP$ , где  $A$  - величина адсорбции,  $P$  – давление в системе. Все теоретические описания изотермы адсорбции в диапазоне малых давлений сводятся к уравнению Генри.

Удобным объектом для исследования констант Генри в микропористых объектах являются алюмофосфатный цеолиты  $AlPO_4$ , которые позволяют варьировать размеры микроканалов при сохранении химического состава скелета. Область давления, в которой выполняется уравнение Генри, шире при адсорбции газов, что позволяет более достоверно оценить значение  $K_g$ . Данному условию соответствует сорбция  $H_2$  при 77 К.



Целью работы является теоретический расчет и сопоставление с экспериментальными значениями констант Генри для адсорбции  $H_2$  на цеолитах  $AlPO_4$ .

Для расчета константы Генри каналы цеолитов моделировались цилиндрическими каналами с равномерно распределенными атомами кислорода на стенках. Для данной модели был получен потенциал межмолекулярного взаимодействия на основе потенциала Леннарда - Джонса (6-12), что позволило рассчитать значения констант Генри в зависимости от размера канала. В результате сопоставления расчетных и экспериментальных значений констант Генри (рис.) получены оптимальные значения констант межмолекулярного взаимодействия для исследуемой системы адсорбат-адсорбент.

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

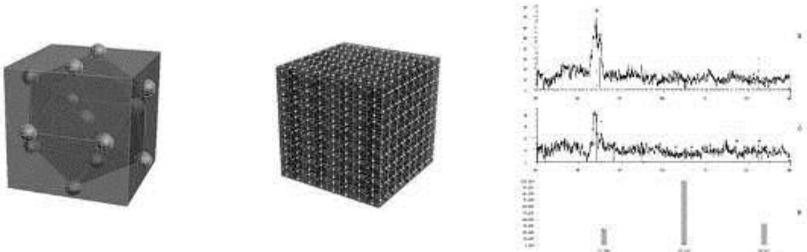
## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ $Fe_{86}Mn_{13}C$ ПРИ РАСШИФРОВКЕ КАРТИН РЕНТГЕНОВСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

А. В. Джес

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Сплав  $Fe_{86}Mn_{13}C$  (сталь Гадфильда) обладает уникальными механическими, электрическими и магнитными свойствами. Так как данный сплав широко используется в машиностроении, то целью работы является изучение массивных образцов такого сплава с целью улучшить его механические свойства. Другим направлением исследований является изучение тонких пленок  $Fe_{86}Mn_{13}C$  с уникальными электрическими и магнитными свойствами, как возможного материала для спинтроники.

В работе представлены трехмерные модели формирования структуры мартенсита деформации в сплаве  $Fe_{86}Mn_{13}C$  в виде самоорганизации кластеров. Приведенные модели основаны на экспериментальных исследованиях структуры и их свойств тонких пленок сплава. Показано, что комбинации антиферромагнитного аустенита и ферромагнитного мартенсита деформации создают уникальные электрические и магнитные свойства сплава  $Fe_{86}Mn_{13}C$  как в массивном, так и в тонкопленочном состоянии.



Вверху: слева – кластер - FK12; справа – трансляция кластера.

Слева: сравнение экспериментальных рентгенограмм с расчетной для данного кластера.

Сравнение расчетной картины интенсивности дифракции рентгеновских лучей, полученной из компьютерной модели с экспериментальными результатами позволяет объяснить эволюцию структуры при криомеханической обработке пленок  $Fe_{86}Mn_{13}C$ .

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Л. И. Квеглис.

## РАДИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ КОНТРОЛЯ МАТЕРИАЛОВ И ОБЪЕКТОВ

Н. В. Дорохова, Г. А. Вдовина, О. С. Зиборова, О. В. Янович  
Томский государственный университет

Радиационный метод контроля является основным методом контроля и испытаний продукции в промышленности.

Основными направлениями развития промышленности являются нанотехнологии и нанообъекты, наукоёмкие технологии, технологии композитных материалов. Методами контроля и испытаний становятся структуроскопия и интроскопия, а объектами контроля становятся объекты с размерами молекулы. Структуроскопия и интроскопия реализуются с помощью методов рентгеновского и гамма излучения.

Рентгеновские и гамма-лучи имеют одинаковую физическую природу, однако, источники их получения разные.

Гамма-рентгеновская интроскопия использует гамма- и рентгеновские излучения, проникающие сквозь жидкие и твёрдые объекты любого химического состава и температуры. Методы гамма-рентгеновской интроскопии позволяют выявить дефекты кристаллической решётки.

Рентгеноструктурный анализ позволяет установить фазовый состав образцов, устанавливает размеры и преимущественную ориентацию (текстурирование) зёрен в веществе. С помощью рентгенолюминесцентного анализа можно определить концентрацию примесей в драгоценных металлах с точностью  $10^{-5}$  %.

Выводы:

1. Методы радиационного контроля продукции подлежат внедрению в предприятия Томской технико-внедренческой зоны. Для вывода продукции этих предприятий на внешний рынок нужны современные методы контроля.

2. Рекомендовать применение радиационных методов в добывающих отраслях России. Например, результаты спектрального анализа пробы металла кадмия в лаборатории экспериментальной минералогии ТГУ показали, что в качестве примесей проба содержит следующие элементы: Алюминий – 0,001%, Свинец – 0,005%, Никель – 0,003%, Медь – 0,003%, Железо - 0,01%, Кальций – 0,001%, Ванадий - 0,0001%, Висмут– 0,0001%, Серебро – 0,003%, Кремний – 0,001%, Магний – 0,0005%, Марганец – 0,0001%.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Л. Н. Попов.

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ Р-МЕТИЛАЦЕТАНИЛИДА

Д. А. Дружбин

Научный образовательный центр

«Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии»

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Новосибирский государственный университет

Р-Метилацетанилид (ацетотолуидин) имеет большое фундаментальное значение в химии, благодаря наличию ацетамидной группы, которая входит в состав важных функциональных частей молекул различных биополимеров. Являясь производной ацетанилида, р-метилацетанилид обладает жаропонижающими и болеутоляющими свойствами, но из-за токсичности не имеет широкого применения в медицине. На данный момент известны две полиморфные модификации р-метилацетанилида – моноклинная и ромбическая, структуры которых были получены ранее [1]. Исследование электронной плотности этих модификаций, в сравнении с ранее полученными данными для парацетамола [2], являющимся другим производным ацетанилида, может позволить исследовать поведение метильной группы и водородных связей.

Задачами данной работы являлись получение и анализ электронной плотности для р-метилацетанилида при температуре 100К, исследование для этого соединения внутри- и межмолекулярных взаимодействий, сравнение с ранее полученными данными для парацетамола. Были получены структурные данные для обеих модификаций при температуре 100К. Для получения прецизионного распределения и деформации электронной плотности кристалла проводились рентгеноструктурные исследования высокого разрешения, позволяющие использовать мультипольную модель уточнения структуры. Исследования проводились на дифрактометре Oxford Diffraction Gemini (четырёх кружной дифрактометр с каппа-геометрией, MoK $\alpha$  излучение  $\lambda = 0.71073$  Å, графитовый монохроматор CCD детектор). Исследуемые образцы были получены ранее в лаборатории, испарением из этанол-метанолового раствора.

---

1. M. Haisa, S. Kashino, Y. Matsuzaki, R. Kawai, K. Kunitomi, Acta Crystallogr., Sect. B: 1977, 2449-2454.

2. Д. А. Дружбин, Рентгеноструктурное исследование полиморфных модификаций парацетамола при низких температурах, 50-я Международная научная студенческая конференция, 13–19 апреля 2012 г.

Научный руководитель – канд. хим. наук Т. Н. Дребущак.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ Ti-AL МЕТОДОМ МД

Е. В. Жиров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Одной из актуальных проблем материаловедения является создание интерметаллидов с высокой прочностью и жаростойкостью. К таким материалам относятся интерметаллиды типа Ti – Al. Существуют различные способы получения интерметаллидов: самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) [1], электроимпульсная консолидация порошков [2], прессование порошков в ударных волнах [3].

В работе в численных экспериментах, выполненных методом молекулярной динамики (МД), исследуются процессы образования интерметаллидов Ti – Al в этих методах. Производится верификация полученных данных о свойствах материалов с известными экспериментальными данными и составляется теоретическая модель образования интерметаллида Ti – Al, основываясь на результаты численных расчетов.

Для описания взаимодействия молекул выбран полуэмпирический потенциал ЕАМ [4].

В результате численных экспериментов установлено, что потенциал ЕАМ позволяет адекватно моделировать протекание реакции между Ti и Al и процесс образования интерметаллидов.

Детальный структурный анализ позволил сделать заключения о механизме протекания реакции в методах, упомянутых выше.

---

1. А.Г. Мержанов. Твердопламенное горение. // Черноголовка. Изд. ИСМАН. 2000.

2. U. Anselmi – Tamburinin, S. Gennari, J.E. Garai, Z.A. Munir Fundamental investigation on the spark plasma sintering / Sintesis process II Modeling of current and temperature distributions // Materials Science and Engineering. A 394. – 2005. – P. 139 – 148.

3. С.П. Киселев, В.П. Киселев, В.И. Мали Влияние структуры металла на потерю устойчивости тонкой пластины, разделяющей порошок, сжимаемый ударной волной // ФГВ. - 2010. - Т.46, № 1.

4. Rajendra R. Zope, M. Mishin Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti – Al system // Phys. Rev. B. – 2003. – V.68. – P. 024102-1 – 024102-14.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук проф. С. П. Киселев.

## **ПРИМЕНЕНИЕ ЭНДОСКОПИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ВНУТРЕННИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ТРУДНОСТУПНЫХ МЕСТ**

А. И. Зайцева

Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»,  
г. Санкт-Петербург

Глаз человека исторически являлся основным контрольным прибором в дефектоскопии. Глазом контролируют исходные материалы, полуфабрикаты, готовую продукцию, обнаруживают отклонения формы и размеров, изъяны поверхности и другие дефекты в процессе производства и эксплуатации: остаточную деформацию, пористость поверхности, крупные трещины, подрезы, риски, надиры, следы наклёпа, раковины и т.д.

Для расширения возможностей глаза используют оптические приборы - например, эндоскопы. Главными «потребителями» этих приборов являются медицинские учреждения, автосервисы, машиностроительные предприятия, атомные и электростанции, а также различные исследовательские центры, кроме того, технические эндоскопы используются в системах безопасности для досмотра скрытых полостей на таможене. Это позволяет увидеть мелкие дефекты, невидимые невооружённым взглядом, или их детали.

Данная работа посвящена изучению существующих типов эндоскопов для дистанционного получения информации о состоянии внутренних поверхностей труднодоступных мест.

Предложена методика контроля объектов таможенного контроля с применением гибкого USB-эндоскопа для получения информации о содержимом внутренних полостей транспортных средств.

Специальным требованием к эндоскопам является их работоспособность в агрессивных средах – бензине, маслах, спиртовых растворах, иных жидкостях, достаточно часто используемых правонарушителями для перемещения контрабандных грузов через таможенную границу.

В работе показано, что сочетание эргономики и оптических характеристик эндоскопа с условиями диагностики и характеристиками исследуемого объекта сказывается на производительности и качества труда контролера. При этом необходимо учитывать в комплексе технические характеристики эндоскопа (поле зрения, увеличение, разрешающую способность, светосилу, цветопередачу), условия осмотра (коэффициент рассеяния исследуемой поверхности, расстояние до нее и т. д.), минимальные размеры и форму подлежащего обнаружению дефекта и другие параметры.

Научный руководитель — Г. И. Красовская.

## ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ПРОПУСКАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

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

В предыдущей работе автором [1], проводились фотометрические исследования образцов - нанокompозитных полимерных тонких пленок: полиэтилен низкой плотности (ПЭНП) и полиметилметакрилат (ПММА) с добавлением различных концентраций наночастиц фуллерена  $C_{60}$ . Было показано, что добавление малой концентрации наночастицы фуллерена  $C_{60}$  в матрицах ПЭНП и ПММА сильно меняет оптические свойства исходных (чистых) образцов. С целью исследования оптических свойств исследуемых образцов (спектров поглощения и пропускания) проведен ряд экспериментов на базе спектрофотометра SPECORD® 250 PLUS (фирмы Analytik Jena). Полученные результаты данных экспериментов и являются, целью настоящего доклада.

Современный автоматизированный двухлучевой спектрофотометр SPECORD® 250 PLUS с варьируемой шириной щели и двойным монохроматором идеально подходит для получения спектров поглощения и пропускания, а также других оптических свойств исследуемых образцов. Сканирующий спектрофотометр SPECORD® 250 PLUS исследовательского класса обладает следующими основными техническими характеристиками: спектральный диапазон: 190-1100 нм, ширина щели 0.5, 1, 2, 4 нм, разрешение  $\leq \pm 0,02$  нм, другие её технические характеристики и возможности более подробно приведены в техническом паспорте установки.

Исследуемые нанокompозитные полимерные пленки имели следующие концентрации наночастиц фуллерена: первая группа: ПЭНП+1%  $C_{60}$ ; ПЭНП+3%  $C_{60}$ ; ПЭНП+5%  $C_{60}$ ; ПЭНП+10%  $C_{60}$  и вторая группа: ПММА+0.5%  $C_{60}$ ; ПММА+1%  $C_{60}$ ; ПММА+3%  $C_{60}$ ; ПММА+5%  $C_{60}$ ;

В результате проводимых экспериментов получены значения коэффициентов поглощения (пропускания) образцов, которые имеют важные фундаментальные и прикладные значения при дальнейших физико-химических исследованиях и применениях данных нанокompозитных полимерных материалов.

---

1. Каражанова Г. Е., Ибрагимова А.С., Уразалиева Д.Н. Материалы 50-й МНСК, Новосибирск, 2012.

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

**ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОСТОЙКОСТИ ОБРАЗЦОВ,  
ПОДВЕРГАЮЩИХСЯ ВОЗДЕЙСТВИЮ  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХЗВУКОВОГО ПОТОКА  
ВОЗДУХА**

А. С. Копылов

Институт теоретической и прикладной механики  
им. С. А. Христиановича СО РАН  
Новосибирский государственный университет

При реализации сверхзвуковых скоростей полета летательного аппарата  $M \geq 2$ , температура торможения воздушного потока может достигать крайне высоких значений  $T \geq 2000$  К. Следует отметить, что в данных условиях функционируют не только камеры сгорания воздушно-реактивных двигателей, но и такие элементы конструкции, как носовая часть летательного аппарата, кромки крыльев. Именно эти элементы испытывают наибольшие температурные нагрузки. На практике часто применяются конструкции в условиях повышенных температур, при наличии тепловыделения и горения. Важное значение приобретают знания об условиях воспламенения и жаростойкости материалов и поиск новых перспективных материалов.

В то же время научным исследованиям и вопросам горения кристаллических, композиционных и металлических материалов, в том числе в высокоскоростных потоках, уделено недостаточное количество внимания.

Данная работа посвящена изучению поведения образцов из перспективных материалов в сверхзвуковом потоке воздуха при высоких температурах, а также в водородно-воздушном пламени. Основной целью было определение условий, при которых образцы разрушались. Отслеживалась динамика разрушения, выявлялось, какие из образцов применимы для элементов конструкций летательных аппаратов.

Часть образцов выдержала испытание, некоторые образцы разрушились при запуске установки, либо деформировались в ходе экспериментов. Установлено, что потенциально пригодны для создания камер сгорания ПВРД следующие материалы: УКККМ, сталь ВЖ98.

Научный руководитель – канд. техн. наук. В. А. Забайкин.

## КОНТРОЛЬ ПОДЛИННОСТИ АЛМАЗОВ

И. В. Кофтерова

Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»  
г. Санкт-Петербург

Алмаз – это кристаллическая модификация чистого углерода. Это самый драгоценный камень, самый твердый и износостойкий минерал, самый блестящий и неподверженный времени самоцвет. В настоящее время, в связи со стремительным развитием рынка драгоценных камней, синтезом природных аналогов, изготовлением имитаций, поступлением партий контрабандной продукции на международный рынок, перед таможенными службами встает важная задача диагностики и идентификации драгоценных камней, выявление фальсифицированной продукции, выявление нарушений, связанных с неуплатой, либо намеренным занижением таможенных пошлин при провозе драгоценных камней.

При проведении исследований в качестве прибора используется прибор Даймонд-тестер, который предназначен для экспресс-идентификации алмазов и бриллиантов и, который позволяет отличить их от имитации. Прибор использует тот факт, что бриллиант проводит тепло лучше, чем любой другой похожий внешне материал. Не требуется времени ожидания между тестами, время восстановления после каждого теста составляет около 2 с. Тестер может быть использован непрерывно.

Диагностике подвергаются как камни без оправы так камни и вставленные в ювелирные изделия. Для более удобного и быстрого процесса идентификации бриллиантов в ювелирных изделий, я предлагаю к рассматриваемому прибору добавить приспособление, в виде тисков, которые будут выполнять роль держателя для закрепления изделий с бриллиантами (обычно эксперт самостоятельно держит исследуемое изделие в руках, что может неправильно повлиять на результат – касание оправы изделия, и т. д.).

В данной работе предложена система экспресс-контроля подлинности бриллиантов и методика диагностики.

Предложена методика контроля подлинности бриллиантов с помощью Даймонд-тестера.

Научный руководитель – Г. И. Красовская.

## IN SITU РФЭС ИССЛЕДОВАНИЕ АДсорбЦИИ NO И РЕАКЦИИ NO+CO НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ, НАНЕСЕННЫХ НА ОКСИД АЛЮМИНИЯ

Е. Г. Коэмец

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

Одним из важнейших экологических процессов сегодня является нейтрализация выхлопных газов автомобилей, заключающаяся в полном окислении углеводородов и CO, а также в восстановлении оксидов азота на катализаторах. В качестве таких дожигателей могут быть использованы системы, в которых наночастицы платины нанесены на оксид алюминия.

Проведение спектроскопических экспериментов в режиме *in situ*, т.е. в присутствии газовой фазы над поверхностью катализатора, позволяет получать весьма полезные сведения о процессах, протекающих на поверхности. В представленной работе для этих целей применялся метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Использование специальных ячеек высокого давления дает возможность проводить *in situ* РФЭС-исследования при давлении до 15 Па. В качестве модели промышленного катализатора Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> были взяты образцы – наночастицы Pt, нанесенные на пленку Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, сформированную на поверхности фольги сплава FeCrAl, со средним размером наночастиц Pt 4.7 нм и 2.3 нм.

Методом *in situ* РФЭС были исследованы адсорбция NO и реакция NO+CO при суммарном давлении газовой смеси 1 Па на поверхности платины в зависимости от температуры и среднего размера нанесенных частиц. В ходе анализа полученных данных были обнаружены две азотосодержащие адсорбционные формы N<sub>алс</sub> и N<sub>2</sub>O<sub>алс</sub> [1]. Показано, что состав адсорбционного слоя зависит как от температуры, состава газовой фазы, так и от размера частиц Pt. Обнаруженная размерная зависимость может быть весьма перспективна с точки зрения управления процессом нейтрализации выхлопов автомобилей.

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

---

[1] Nartova A.V., Bukhtiyarov A.V., Kvon R.I., Beck I.E., Koemets E.G., Gharachorlou A., Ribeiro F.H., Bukhtiyarov V.I. // Eighth International Symposium "Surface heterogeneity effects in adsorption and catalysis on solids. Krakow, 26 – 31 August, 2012. Poland. Book of Abstracts. P. 111-112.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ АБСОРБЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Н. Н. Кречетова

ООО «Международный научный центр по теплофизике и энергетике»  
Новосибирский государственный технический университет

Целью работы являлось получение данных о количественных характеристиках исследуемых образцов, основанное на абсорбционных свойствах материалов. Исследования проводились с применением метода измерения удельной поверхности  $S_{уд}$  и сравнения результатов со снимками просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ).

Определение величины удельной поверхности  $S_{уд}$  основано на измерении количества газа-адсорбата, сорбируемого на поверхности исследуемого образца при температуре кипения жидкого азота и различных относительных парциальных давлениях. Расчет удельной поверхности в настоящее время проводится по общепринятому методу БЭТ.

В частности исследовались одно- и многостенные углеродные нанотрубки (УНТ), а также технический углерод. Для таких материалов размер и химический состав являются ключевыми параметрами, определяющими их физические и химические свойства.

В основе углеродных наноструктур лежит графитовая поверхность. Удельное количество сорбированного материала определяется значением поверхностной плотности графитового слоя. Для УНТ экспериментальные данные отличаются от теоретически рассчитанного значения  $S_{уд}$ . Это может быть связано с увеличением слоев УНТ или числа трубок в пучке, уменьшающих доступную для абсорбции поверхность.

Из экспериментально определенной величины  $S_{уд}$  дисперсного материала можно рассчитать средний размер первичных частиц, совокупность которых и формирует данную поверхность, число слоев УНТ и число трубок в пучке, что очень важно при оценке качества продукта.

В работе показано, что измерение значения удельной поверхности является достаточно универсальным методом, пригодным для измерения различных характеристик образцов. Этот метод позволяет оперативно получить целый ряд значений параметров объектов исследования. Характеристики, полученные при измерении удельной поверхности и с помощью метода ПЭМ, хорошо согласуются между собой.

Научный руководитель – канд. физ.- мат. наук В. О. Сайк.

## **РАЗРАБОТКА МЕТОДА НАНЕСЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ НА ПОВЕРХНОСТЬ**

К. В. Кубрак, П. А. Фридрих

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН  
Новосибирский государственный технический университет

В настоящее время исследования в области создания солнечных элементов направлены на уменьшение их стоимости и повышении к.п.д. Одним из решений данной проблемы является использование тонких пленок аморфного гидrogenизированного кремния и поликристаллического кремния с легирующими добавками.

Данная работа посвящена исследованию процесса нанесения кремниевых покрытий газоструйным методом. Предполагается, что при разных газодинамических условиях в источнике (температуре, давлении несущего газа и температуре подложки) образуются пленки кремния с различной структурой: от аморфной до кристаллической. Целью работы было получение кремниевых покрытий с различной структурой, определение влияния параметров осаждения на структуру полученного кремниевого покрытия.

В ходе работы были получены кремниевые покрытия с аморфной и микрокристаллической структурой, было определено влияние параметров осаждения на их структуру.

Предполагается, что разрабатываемый метод позволит решить некоторые проблемы производства солнечных элементов:

-удешевить производство солнечных элементов в части получения тонких пленок при их технологической совместимости с устройствами на основе монокристаллического кремния *c*-Si;

-получить возможность нанесения тонких пленок практически на любых подложках — в отношении, как материала, так и размеров.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАФЕНА МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

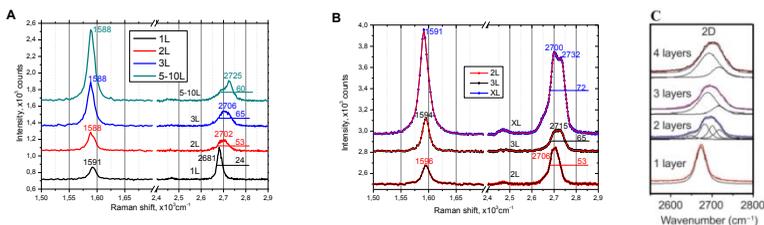
И. И. Куркина

Северо-восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова,  
г. Якутск

Графен, который представляет собой однослойную двумерную структуру атомов углерода, благодаря своим уникальным свойствам, в настоящее время вызывает большой интерес исследователей во всем мире.

В работе исследованы спектры комбинационного рассеяния света (КРС) графеновых пленок, полученных механическим (М.) и электростатическим (Э.) расслоением высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) на подложках кремния со слоями SiO<sub>2</sub> разной толщины.

Известно [1], что графен характеризуется двумя основными линиями G и 2D, причем интенсивность линии 2D (I<sub>2D</sub>) больше интенсивности линии G (I<sub>G</sub>). В многослойных графеновых пленках соотношение интенсивностей меняется (рис.1), а также происходит смещение линий КРС и уширение 2D. Это обусловлено тем, что в многослойном графене линии КРС спектра являются суммой компонент, характеризующих разные вероятности процесс двойного резонанса. Найдено, что интенсивности линий уменьшаются с увеличением толщины SiO<sub>2</sub>. В случае М. расслоения обнаружено, что, несмотря на соотношение I<sub>2D</sub>>I<sub>G</sub>, линия 2D находится на ~2706 см<sup>-1</sup> и показывает наличие двухслойного графена. Проведена оценка числа слоев графена по форме линии 2D и ее полной ширине на полувысоте.



**Рис.1.** Спектры КРС для графена, полученного Э. (А) и М. (В) расслоением ВОПГ, и (С) разложение на компоненты линии 2D [1].

[1] Zh. Ni, Y. Wang, T. Yu, and Z. Shen. Nano Res (2008) 1: 273 291

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

## ЗАДАЧА КОНТАКТНОГО КРУЧЕНИЯ ДЛЯ ОБЪЕКТА ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

А. В. Малоземов, А. В. Уколов  
Томский государственный университет

Механика контактных взаимодействий деформируемых твердых тел занимает центральные позиции в области механики деформируемого твердого тела. В современном машиностроении существует тенденция повышения эксплуатационных характеристик деталей, подвергающихся деформациям, в том числе при скручивании. В частности, знаменитые автомобильные концерны уделяют большое внимание моделированию контактных задач теории упругости. Объектами таких задач являются коленчатые и распределительные валы, передние оси автомобилей, валы и оси трансмиссии, пружины, торсионны. Моделирование выполняется на стадии проектирования деталей и позволяет выбрать оптимальные параметры по различным критериям. К тому же, математическое моделирование позволяет сократить затраты на разработку технологического процесса.

В данной работе рассматривается пространственная задача теории деформации. Отражены модифицированные уравнения Навье – уравнения равновесия записанные в перемещениях. Рассматривается схема численного решения методом простых итераций на неравномерной экспоненциально сгущающейся на пятне контакта разностной сетке.

Далее обосновывается возможность сведения пространственной задачи к плоской задаче контактного кручения. В результате чего, получаем уравнение для окружной компоненты перемещения и соотношения, определяющие напряжения. Таким образом, на основании изложенного материала получена вычислительная технология решения подобных задач, использующая простой итерационный метод. В случае однородного кручения удалось построить достаточно простое аналитическое решение. Была решена задача деформации стального стержня при кручении. На основании анализа полученных результатов сделаны соответствующие выводы. Если возникающие напряжения выше допустимых, следует увеличить пятно контакта, или упрочнить заданную область путем нанесения слоя другого металла. Визуализация результатов представлена с помощью программного пакета MATLAB.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А. М. Бубенчиков.

## **ИЗУЧЕНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ МИНЕРАЛОВ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПЕРИДОТИТОВ ИЗ КИМБЕРЛИТОВОЙ ТРУБКИ УДАЧНАЯ (ЯКУТИЯ)**

Э. Ю. Матхонова

Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Исследования в физике твердого тела и в материаловедении показывают, что существует взаимосвязь между условиями образования кристаллов, параметрами последующих физико-химических воздействий и их дефектной структурой. Поэтому имеется принципиальная возможность использования дефектов кристаллической решетки с целью восстановления условий образования и преобразования природных минералов и включающих их пород [1]. Изучение реальной (дефектной) структуры природных минералов и их химического состава в настоящей работе проводилось с использованием методов просвечивающей (JEM-4000) и сканирующей электронной микроскопии вместе с рентгено-спектральным микрозондовым анализом (TESCAN MIRA 3, снабжен EDX спектрометром OXFORD). При изготовлении образцов для исследования с помощью просвечивающей электронной микроскопии использовалась система ионной полировки PIPS (Нано-центр НГУ).

Изучались образцы деформированного лерцолита – глубинной породы, состоящей из магнезиального оливина, пироба, магнезиального ортопироксена (энстатита) и клинопироксена кимберлитовой трубки Удачная (Якутия). По оптическим наблюдениям для них характерны структуры течения, двойникование и прекристаллизация крупных кристаллов оливина. Эти процессы происходят на больших глубинах (190-250 км) в результате субвертикальных движений мантийных блоков.

Было установлено, что в группе исследуемых минералов наблюдаются деформационные дефекты – дислокации, дислокационные стенки и сетки дислокаций, свидетельствующие о высокотемпературном характере деформаций ( $> 2/3 T$  плавления). Проводится сравнительный анализ полученных результатов настоящей работы с литературными данными дефектной структуры аналогичных минералов из кимберлитов иного генезиса.

---

1. Электронная микроскопия в минералогии, под редакцией Г.-Р. Венка/ Москва «Мир», 1979

Научный руководитель – канд. геол.-минерал. наук А. Т. Титов.

## НЕРАЗРУШАЮЩИЕ МЕТОДЫ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОДЛИННОСТИ САПФИРОВ

Е. М. Мешкова

Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»,  
г. Санкт-Петербург

Драгоценные камни люди научились подделывать еще в глубокой древности. Технологии со временем совершенствовались, и в настоящее время все труднее становится определить, что же перед вами – природный камень или его синтетический аналог.

Подробнее рассмотрим одну из разновидностей корунда – сапфир. Этот драгоценный камень встречается разных цветов, но больше всего ценятся камни синих оттенков. Он обладает сильным блеском, а по твердости занимает второе место после алмаза. Сапфир пользуется огромным спросом, его часто подделывают. Можно встретить подделку из стекла, шпинели, турмалина и других камней, также можно столкнуться с композитным камнем. Кроме того, в настоящее время сапфиры часто подвергают термообработке для улучшения их характеристик.

Данная работа посвящена изучению существующих методов идентификации сапфиров. Использование лупы и микроскопа позволяет изучить имеющиеся включения, трещины и распределение окраски. Измерение показателей преломления, двупреломления и дихроизма позволяет определить к какому виду минерала относится рассматриваемый образец и дальнейший способ его исследования. Диагностика с помощью ультрафиолетового излучения является эффективным методом идентификации, так как основные физические свойства природных и синтетических сапфиров отличаются. Каждый минерал имеет свои линии поглощения, для измерения их величины служит спектрометр.

Наиболее подробно рассмотрен способ идентификации с помощью рефрактометра. Измерение показателя преломления является первым шагом для идентификации синего камня похожего на сапфир, если только предварительный осмотр с помощью лупы не выявил вполне определенно его природу. Из натуральных камней на сапфир больше всего похожи синяя шпинель и танзанит. Отличить их от сапфира поможет рефрактометр.

В работе показано, что достоверность определения вида минерала с помощью рефрактометра очень высока. Поэтому он является одним из основных приборов для проверки подлинности камней.

Научный руководитель – Г. И. Красовская.

## **ИЗМЕРЕНИЕ СИЛ РАЗРЫВА СВЯЗИ МОЛЕКУЛ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ПРИ ПОМОЩИ 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 (QCM).

Принцип метода заключается в том, что на поверхность QCM пришивается объект (макромолекула), подавая переменное напряжение на электроды QCM возникают механические напряжения, которые приводят к сдвиговой деформации кристалла - поверхность движется с ускорением пропорционально напряжению. При силе связывания равной инерционным силам происходит разрыв связи, и молекула слетает с поверхности.

Таким образом при отрыве молекулы от поверхности кварцевого резонатора за счёт ускорения наблюдаются искажения на амплитудно-частотной зависимости. С помощью мат. обработки эти искажения преобразованы в сигнал, величина которого пропорциональна количеству разорванных связей, а напряжение, при котором происходит отрыв, характеризует силу связи. Поскольку измерения искажений амплитудно-частотной зависимости проводятся в окрестности резонансной области колебаний QCM, любые самые малые нарушения согласованной колебательной системы (отрыв макромолекул от поверхности) приводят к заметным искажениям амплитудно-частотной зависимости. 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. Этим определяется высокая чувствительность и простота методики.

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

## **ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК УГЛЕРОДА И ДИОКСИДА ТИТАНА НА СКАНИРУЮЩЕМ НАНОТВЕРДОМЕРЕ НАНОСКАН-3D**

Н. В. Нагирный<sup>1</sup>, М. Н. Хомяков<sup>2</sup>, С. Ю. Чепкасов<sup>1</sup>  
Новосибирский государственный университет<sup>1</sup>  
Институт лазерной физики СО РАН<sup>2</sup>

Исследование свойств нанопленок таких как твердость, толщина, морфология, адгезия требует применения специального оборудования. Комплексное исследование таких свойств достаточно сложно и, как правило, требует применения нескольких специализированных приборов (атомно-силовой микроскоп, твердомер, склерометр и др.). Однако существует класс универсальных приборов, которые позволяют применять сразу несколько различных измерительных методик за одну установку образца. К классу таких приборов относится сканирующий нанотвердомер НаноСкан-3D (ТИСНУМ, г. Троицк, Россия). Он совмещает в себе функции нанотвердомера, склерометра, сканирующего силового микроскопа и другие функции. Прибор оснащен алмазным трехгранным индентором Берковича (характерный радиус закругления 40-60 нм). При работе с различными образцами, в особенности при работе с тонкими пленками, существуют особенности связанные со специфическими свойствами изучаемого материала. В данном случае предмет нашего интереса – это изучение возможностей сканирующего нанотвердомера "НаноСкан-3D" для исследования свойств алмазоподобных пленок углерода (DLC) и аморфных пленок диоксида титана на стекле полученных методом ионно-плазменного синтеза с точки зрения общности проблем, которые возникают при измерении. В докладе представлены теоретические основы методик наноиндетирования и склерометрии. А также экспериментальные данные демонстрирующие характерные особенности морфологии, измерения толщины и определения твердости пленок методом наноиндетирования. И, по возможности, параметры адгезии и износостойкости получаемые в режиме склерометрии. Обсуждается тема износостойкости покрытия получаемая в режиме склерометрии. Обсуждаются возможности определения толщины покрытия путем нанесения царапины и последующей визуализацией поверхности методом атомно-силовой микроскопии по сколу покрытия вокруг следа царапины или путем визуализации методом АСМ границы покрытие-подложка. В процессе исследования дополнительно использовались методы SEM, КР спектроскопии, ИК-спектроскопии и эллипсометрии.

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СВАРНЫХ ШВОВ КОРПУСА ПРОМЫШЛЕННЫХ НАСОСОВ**

Е. Найманкумарулы, Н. Кантай

Восточно-Казахстанский государственный университет  
имени С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск

Продукция такого типа как, промышленные погружные насосы типа ПНВ пользуются широким спросом во многих странах, в том числе и Казахстане, где они применяются в горнодобывающих, металлургических и перерабатывающих производствах.

Исследование совершенства сварочных процессов и коррозионной стойкости материалов и использование полученных результатов для прогнозирования свойств имеют особую актуальность и практическую ценность.

В процессе работы проводились экспериментальные исследования структурно-фазового состояния и механических свойств основы и сварных швов из стали 12Х18Н10Т – материала корпуса и рабочего колеса насосов.

Применение нового способа закрепления и новой формы отливок рабочего колеса насоса и увеличение выходного отверстия улиты позволило увеличить напор струи и производительность насосов на 30%. Впервые были применены сварочные технологии корпуса вместо традиционно применяемого способа литья, что позволило уменьшить ресурсозатраты и снизить общую массу насоса на 20%.

Применяемые, как обычно, технологии литья корпуса насосов типа ПНВ из-за образования пор и несовершенства технологии отливки приводят к выбраковке существенной части продукции, что наряду с большим весом литых корпусов в итоге приводит к удорожанию продукции и снижает её конкурентоспособность.

В результате исследования было установлено, что исходная аустенитная структура (ГЦК) преобразуется в мартенсит (ОЦТ) при прокатке стали, а в случае сварки стали сохраняется в виде аустенита. Сварной шов в стали 12Х18Н10Т характеризуется несколько пониженной микро твердостью и более мелкозернистой структурой. Варьируя режимами сварки можно управлять структурой сварного соединения стали, то есть и свойствами материала.

С целью дальнейшей модернизации насосов проводится работа по замене металлических деталей насоса на полиуретановые.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Д. Ерболатулы.

## ИССЛЕДОВАНИЕ УПОРЯДОЧЕННОСТИ МАКРОМОЛЕКУЛ ПРИ НАНЕСЕНИИ ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА НА ПОВЕРХНОСТЬ МЕТАЛЛА

А. А. Настулявичус, А. Р. Байджанов  
Череповецкий государственный университет

Одной из основных физических величин, влияющих на свойства полимерных покрытий металла (шероховатость, блески др.) является параметр дальнего ориентационного порядка  $\mu$ , для расчета которого использована формула:

$$\mu = \sqrt{1 - \frac{T}{T_c} \frac{\frac{1}{\pi^2} \sum_{s=0}^N \iint_0^{\pi} \frac{A_{n,s}^2}{(1 - \cos x) + (1 - \cos y) + \beta(1 - \cos q_s)} dx dy}{\frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{1}{(1 - \cos x) + (1 - \cos y) + \beta(1 - \cos z)} dx dy dz}}$$

Здесь  $T_c$  – температура фазового перехода для бесконечно протяженной системы,  $T$  – температура покрытия,  $\beta$  – коэффициент взаимодействия между слоями,  $N$  – число слоев покрытия,  $n$  – номер слоя.

На границе взаимодействия «полимер - металл» вследствие сильной адгезии полимерные молекулы закреплены, а на границе «полимер - воздух» – свободны. Поэтому для расчета параметра порядка в различных слоях покрытия использовались смешанные граничные условия и коэффициенты в разложении в ряд Фурье определялись формулами:

$$q_s = \frac{(2s+1)}{(2N+1)} \cdot \pi, \quad A_{n,s} = \sqrt{\frac{2}{N}} \cdot \sin(q_s \cdot (n-1)) \cdot$$

При вычислении по приведенным формулам показано, что вблизи точки фазового перехода (температуры  $T_c$ ) возникает аномальное поведение параметра ориентационного порядка. Например, при  $T \approx T_c$  на свободной поверхности полимерные слои разупорядочены, а вблизи металла наблюдается полное упорядочение макромолекул.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук О. Г. Максимова.

## ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ОЛИГОМЕРА

А. А. Настулявичус, Ж. В. Неелова  
Череповецкий государственный университет

Рассмотрена модель олигомерной молекулы, аналогичная классической модели полимерной цепи Рауза, в которой предполагается, что макромолекула представляет собой совокупность жестких частиц («бусинок»), соединенными между собой упругими пружинками. Кроме деформационных взаимодействий в данной работе учитываются также ориентационные взаимодействия. Поэтому потенциальная энергия олигомерной цепи представляется в виде двух слагаемых: энергии валентных связей и валентных углов.

С помощью метода молекулярной динамики был осуществлен расчет расстояния между концами олигомерной цепи (величины  $h$ ) при разных значениях ориентационных взаимодействий  $K$ . Результаты расчета приведены на рис.1. Показано, что величина  $h/b$  ( $b$  - равновесное расстояние между «бусинками») в отсутствие ориентационных взаимодействий пропорциональна величине  $\sqrt{N}$ , где  $N$  – число звеньев в цепи (прямая 1 на рис. 1), что соответствует классической теории олигомерных молекул. При увеличении ориентационного параметра, зависимости  $h(\sqrt{N})$  также имеют вид прямых (2 и 3 на рис. 1), но с большим углом наклона.

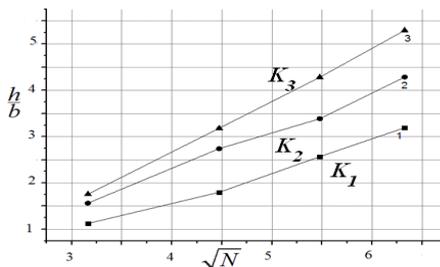


Рис.1. Зависимость среднего расстояния между концами олигомерной цепи от количества сегментов при различных значениях параметра  $K_i$ .  $K_1 = 0$  (прямая 1).  
 $0 < K_2 < K_3$  (прямые 2 и 3)

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук О. Г. Максимова.

## РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ $MnO_x/Ga_2O_3$

О. С. Никулина

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

Сложные марганецсодержащие оксиды представляют интерес как катализаторы для дожигания (полного окисления) углеводородов и СО и для сжигания топлива, в частности, Mn-Al-O катализаторы хорошо изучены и имеют широкое применение в промышленности. Известно, что галлий является аналогом алюминия со схожими химическими свойствами. Предполагается, что Mn-Ga-O катализаторы подобны Mn-Al-O, но ранее Mn-Ga-O широко не исследовались. Именно поэтому представляет интерес исследование Ga-Mn систем и сравнение с Al-Mn системами.

Рассматривалось 4 образца 12%  $MnO_2/Ga_2O_3$ , полученные при температурах прокаливания 600-900°C. Образцы получены методом соосаждения в ИППУ СО РАН (г. Омск).

Исследования образцов проводились с применением метода рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии. Для структурных расчетов была использована программа DIANNA, которая позволяет проводить моделирование дифракционных картин от ансамбля наночастиц заданной структуры, размера и формы, с расчетом интенсивности в каждой точке профиля методом Дебая.

В работе изучены структурные особенности и фазовый состав в зависимости от условий приготовления и содержания Mn в образцах. Рентгеноструктурный анализ показал, что в образцах, полученных при температурах прокаливания 900°C наряду с  $Ga_2O_3$  образуется соединение  $Mn_{3-x}Ga_xO_4$  ( $x=1,47$ ), имеющее структуру шпинели, при 700, 800°C наблюдаются фазы  $\beta-Ga_2O_3$ ,  $Mn_2O_3$ . Для образца, прокаленного при температуре 600°C ( $\gamma-Ga_2O_3+Mn_2O_3$ ), моделирование на основе структуры шпинели показало наличие катионных вакансий (30-40%) и дополнительных атомов в нехарактерных для шпинели позициях, рассчитаны размеры частиц.

Научный руководитель - канд. хим. наук О. А. Булавченко.

## МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ НЕСОВЕРШЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ МИНЕРАЛОВ Ir-Os-Ru

А. В. Панченко

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

Актуальной проблемой рентгеновской дифракции является изучение образцов размером меньше 1 мм в диаметре, которые не являются монокристаллами, но и не содержат достаточное количество разориентированных кристаллитов. Такая ситуация не позволяет применить ни одну из методик исследования моно- и поликристаллов. Дополнительные трудности возникают при невозможности истереть такую частицу. В работе [1] была предложена методика, основанная на использовании схемы Дебая-Шеррера, для получения кристаллоструктурных характеристик. С помощью нее были изучены поликристаллические частицы сплавов  $\text{Ir}_x\text{Re}_{1-x}$  размером от 0,1 до 2 мм. Представлялось интересным модифицировать методику для исследования несовершенных монокристаллов.

Исследованы 13 образцов (частицы до 0,5 мм) минералов системы Ir-Os-Ru, которые были любезно предоставлены д.г.-м.н. Н. Д. Толстых. Соотношение металлов в образцах изучено на электронном микроскопе Hitachi TM-3000. Рентгенографические измерения проводили на приборах X8 APEX и APEX DUO фирмы Bruker ( $\text{MoK}_\alpha$  и  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение, четырехкружный гониометр, двухкоординатный CCD-детектор, внешний эталон Au, температура 25°C, область углов  $2\theta$  0—90°, время накопления 5 мин.). Эксперименты проводили по специально разработанной методике, суть которой состоит в последовательном суммировании нескольких дебаеграмм (до 15), полученных под разными углами  $\omega$  и  $\chi$ , и с полным оборотом вокруг оси  $\varphi$ .

В работе проведен анализ изменения параметров элементарных ячеек, изученных минералов системы Ir-Os-Ru от состава.

---

1. А. В. Панченко, Развитие метода Дебая-Шеррера для исследования поликристаллических образцов, Вестник НГУ. Серия: Физика. 2012. Т. 7, выпуск 2. С. 93-97.

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

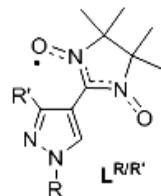
## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ДИНАМИК ГЕТЕРОСПИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R/R}'}$

А. В. Полушкин

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск

Гетероспиновые комплексы гексафторацетилацетоната меди(II)  $\text{Cu}(\text{hfac})_2$  со стабильными нитронилнитроксильными радикалами  $\text{L}^{\text{R}}$  являются ценными объектами для детального исследования структурных перестроек, индуцируемых внешним воздействием и выявления взаимосвязи *структура-свойство*. Открытая не так давно новая серия дышащих кристаллов, полученная в результате введения второго заместителя  $\text{R}'$  в третье положение пиразольного цикла, привлекает особое внимание, поскольку модификация лиганда - это еще один способ воздействия на характеристики магнитной аномалии в таких соединениях.

Цель настоящей работы – определение кристаллической структуры гетероспиновых комплексов гексафторацетилацетоната меди(II)  $\text{Cu}(\text{hfac})_2$  с диалкилзамещенными спин-мечеными пиразолами  $\text{L}^{\text{R/R}'}$  ( $\text{R}, \text{R}' = \text{Me}, \text{Et}$ ) и изучение температурной динамики структуры данных соединений в широком температурном диапазоне (296 К – 75 К) для исследования структурно-магнитных корреляций.



В ходе работы установлено, что все  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R/R}'}]$ , имеющие цепочечно-полимерное строение, изоструктурны и характеризуются одинаковой упаковкой цепей в кристалле, которая в свою очередь отличается от таковой в описанных ранее комплексах с моноалкилзамещенными спин-мечеными пиразолами  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Me}}$  и  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Et}}$ . Детальный анализ строения цепей показал, что наибольшее различие комплексов  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R/R}'}]$  и  $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R}}$  заключается во взаимной ориентации плоскостей пиразольного цикла (Pz) относительно диагоналей координационного квадрата  $\{\text{CuO}_4\}$ : увеличение размера заместителя  $\text{R}$  ( $\text{Me} \rightarrow \text{Bu}$ ) приводит к увеличению угла между ними от  $\sim 8^\circ$  до  $34^\circ$ , а введение второго заместителя увеличивает этот угол до  $\sim 50^\circ$ . Установлено, что наиболее существенное влияние на магнитные свойства соединения оказывает заместитель  $\text{R}$ . Введение второго заместителя при  $\text{R/R}' = \text{Me/Me}$  и  $\text{Me/Et}$  – увеличивает жесткость структуры, тогда как при  $\text{R/R}' = \text{Et/Me}$  и  $\text{Et/Et}$  – кардинально изменяется характер упаковки цепей и, соответственно, магнитных свойств.

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

## **ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КАК СРЕДСТВО ОПЕРАТИВНОГО КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА МАТЕРИАЛА**

П. Н. Русских

Новосибирский государственный педагогический университет  
Новосибирский государственный технический университет

Цель работы состояла в изучении устройства и принципа действия ИК Фурье-спектрометра, в котором спектр образца получают целиком из интерферограммы излучения через её Фурье-преобразование. Основной частью такого спектрометра является модифицированный интерферометр Майкельсона, который и производит первичное преобразование исследуемого спектра.

Современное производство различных материалов отличается высокими требованиями к качеству продукции, что требует применения экспресс-анализа последнего. Поэтому методика Фурье-спектроскопии, позволяющая быстро (в течение секунд) получать информацию о составе и других характеристиках материала на каждом этапе процесса его обработки и модификации, является весьма актуальной.

В качестве реального прибора использовался спектрометр Nicolet 5700 – настольный прибор с весьма высокими параметрами (разрешение  $0,09 \text{ см}^{-1}$  в диапазоне  $7400 - 350 \text{ см}^{-1}$ , скорость сканирования  $50 \text{ скан/с}$ ), позволяющий решать разнообразные задачи – от идентификации веществ и минералов до определения координации атомов данного типа в структуре и исследования кинетики протекания химических реакций.

Были проделаны ознакомительные эксперименты по снятию в различных условиях спектров гидроксипатита – перспективного материала для замены поврежденной костной ткани. Калибровка прибора проводилась путём снятия спектра золотой пластины. Далее снимались спектры синтезированного гидроксипатита (в таблетке KBr) и химически чистого гидроксипатита. В результате сравнения этих спектров с эталонными, в которых четко наблюдались характеристические полосы колебаний различных групп типа P=O, определен состав синтезированного образца и сделан вывод о качестве данного варианта синтеза. Таким образом показано, как спектральный экспресс-анализ, «следящий» за изменениями состава и структуры образца, позволяет сделать выбор между различными физико-химическими методиками получения конечного продукта.

Научные руководители – д-р техн. наук, проф. А. А. Величко,  
д-р физ.-мат. наук, проф. Ю. Э. Овчинников

## **ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРОВ В НАНОПОРИСТОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ Cr-MIL-101**

М. Н. Рябов

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева, г. Новосибирск

Органические полимеры, обладающие способностью к электронному транспорту - относительно новый и весьма перспективный класс материалов, находящий применение во многих приложениях, таких как микроэлектроника и создание антикоррозийных и антирадарных покрытий.

Электропроводящий полимер полианилин (полимер соединения  $C_6H_5NH_2$ ) является хорошо изученным соединением.

Исследованию проводимости отдельных цепочек полимера уделено меньше внимания, хотя именно знание механизма транспорта электронов от одного мономера к другому позволило бы создавать полимерные материалы с заранее заданными свойствами.

Образцы представляют собой твердую смесь полианилина и диэлектрика. Среди них можно различить анилин, полимеризованный в диэлектрической матрице металлоорганического соединения Cr-MIL-101, чистый полианилин и механическую смесь полианилина и диэлектрика. Первый способ приготовления образцов использовался для получения одномерных цепочек изучаемого полимера, что необходимо для увеличения вклада в проводимость поверхностных слоев.

Данная работа посвящена исследованию проводящих свойств образцов при температурах от 4,2 К до 300 К.

По полученным вольт-амперным характеристикам была установлена экспоненциальная зависимость величины протекающего через образцы тока от приложенного к ним напряжения. Для образцов наблюдались различные величины проводимости при одинаковом значении температуры.

В процессе работы было обнаружено, что проводимости полианилина соответствует флуктуационная модель туннелирования (FIT).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук А. И. Романенко.

## ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ И НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ КОМПОЗИТАХ

К. К. Самарханов, Ю. В. Паничкин  
Восточно-Казахстанский государственный университет  
имени С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Цель работы: исследовать закономерности переноса заряда в многослойной структуре ферромагнетик/неферромагнитный металл под действием внешнего магнитного поля. Для достижения цели были выполнены следующие задачи:

1) Получены пленочные образцы FeNdB-Cu-FeNdB методом термического вакуумного напыления.

2) Исследована структура полученных образцов как послойно, так и в многослойном варианте.

3) Исследовано электросопротивление полученных образцов как послойно, так и в многослойном варианте.

4) Исследовать магнитосопротивление полученных образцов как послойно, так и в многослойном варианте.

5) Исследовать влияние магнитного поля на магниторезистивный эффект пленочных композитов, имеющих различную магнитную структуру.

Методы проведенных исследований:

1) термическое и вакуумное напыление.

2) измерение электро и магнитосопротивления.

3) структурные исследования методами просвечивающей электронной микроскопии и дифракции электронов.

4) рентгеноструктурный анализ.

Основные результаты исследования заключаются в том, что обнаружена явление гигантского магнитосопротивления в системе FeNdB-Cu-FeNdB, полученной методом термического вакуумного напыления. Материал может быть использован при создании сенсоров магнитного поля, ячеек памяти в системах хранения данных, спиновых фильтров, спиновых транзисторов и других компонентов элементной базы неорганической спинтроники. Полученные данные закладывают основы для построения теоретической модели явления.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Л. И. Квеглис.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛЕ SrF<sub>2</sub> АКТИВИРОВАННОМ Zn<sup>2+</sup> МЕТОДОМ ЭПР

Н. А. Смирнова

Институт геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск  
Иркутский государственный университет

Изучение пространственной структуры примесного центра в решетке кристалла, важно для понимания фундаментальных свойств конденсированных сред и дальнейшего практического применения. Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) позволяет определить местоположение примеси относительно «родных» атомов кристалла и предположить характер взаимодействия примесного центра с ближайшим окружением.

Целью нашей работы являлось исследование структуры радиационных дефектов в кристалле SrF<sub>2</sub> активированном Zn<sup>2+</sup> методом ЭПР.

Для исследования был взят кристалл SrF<sub>2</sub>. В качестве примеси использовался двухвалентный ион цинка. Концентрация цинка в кристалле ≈ 1%. Образец облучался 30 минут при комнатной температуре рентгеновской трубкой в режиме 35кВ, 20мА. Исследование кристалла проводилось при двух направлениях магнитного поля: В//<100>, В//<110>.

ЭПР-спектр при направлении поля В//<100> состоит из 9 равноотдаленных линий. Из этого можно заключить, что ион цинка расположен в центре куба и окружен 8-ю эквивалентными ядрами фтора в узлах этого куба. Квадраты косинусов углов между направлением поля и собственными векторами кристалла SrF<sub>2</sub>-Zn равны ±1/3. Расстояние между уровнями A<sub>100</sub>=85.56±12.83 Гс

Так как мы имеем кубическую симметрию кристалла, то для направления поля В//<110> будет 2 группы эквивалентных ядер. В каждой группе по 4 ядра. Исходя из этого, можно предположить, что в спектре должно присутствовать 25 линий. Квадраты косинусов углов между направлением поля и собственными векторами кристалла SrF<sub>2</sub>-Zn равны ±(2/3)<sup>1/2</sup> и 0. Расстояние между уровнями при сверхтонком взаимодействии (СТВ) первой группы эквивалентных ядер A<sub>110-1</sub>=106.95±16 Гс и расстояние между уровнями при СТВ второй группы эквивалентных ядер A<sub>110-2</sub>=25.76±3.9 Гс.

Для исследуемого кристалла SrF<sub>2</sub> – 1%Zn были произведены расчеты констант сверхтонкого взаимодействия: константа изотропного СТВ равна 100.37±10.03 Гс, константа анизотропного СТВ равна 60.75±6.07 Гс.

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

## МОДЕРНИЗАЦИЯ СТАНЦИИ РЕНТГЕНОФЛЮОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА ДЛЯ РАЗВИТИЯ МЕТОДА РФА-ПВО

Д. С. Сороколетов<sup>1</sup>, В. В. Максимовская<sup>1</sup>, М. А. Холопов<sup>1</sup>, Ф. А. Дарьин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

<sup>2</sup>Сибирская государственная геодезическая академия

Метод рентгенофлюоресцентного анализа является классическим неразрушающим методом для точного определения концентраций элементов в исследуемых образцах.

Использование техники исследования проб в условиях полного внешнего отражения (ПВО) позволяет значительно, на несколько порядков, поднять порог чувствительности метода РФА. Сущность техники РФА-ПВО заключается в использовании геометрии скользящего падения и отражения рентгеновских лучей от зеркала-подложки с исследуемой пробой, нанесенной на его поверхность. Глубина проникновения рентгеновских лучей внутрь зеркала в условиях ПВО чрезвычайно мала, что резко уменьшает интенсивность фонового сигнала от подложки и увеличивает чувствительность метода РФА.

Техника РФА-ПВО идеально подходит для исследования жидких проб. В этом случае, капля исследуемой жидкости наносится на зеркальную подложку, а затем испаряется, при этом примеси, представляющие интерес, осаждаются на поверхности подложки. Метод РФА-ПВО также важен для анализа элементного состава поверхности (полупроводниковых) подложек и, в частности, их, загрязнений. Кроме того, сканирование по углу падения, в рамках ПВО, позволяет извлечь профиль распределения по глубине интересующих элементов вблизи поверхности образца.

Целью данной работы являлась модернизация станции РФА-СИ накопителя ВЭПП-3, для развития метода РФА-ПВО. Был разработан опытный образец РФА-ПВО спектрометра. Опытный образец был размещён в специальном модуле, а разработанное программное обеспечение было интегрировано в систему управления экспериментальной станцией РФА-СИ. Спектрометр введён в эксплуатацию, проведены тестовые испытания.

Применение метода РФА-ПВО на источнике синхротронного излучения позволяет проводить анализ элементов в жидких пробах на уровне  $1\text{ppb}$  и ниже, а также получать элементный состав и профиль его распределения в приповерхностной области твердых образцов с нанометровой точностью.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Я. В. Ракшун.

## РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ СОДЕРЖАЩИХ КАРБИДЫ КОБАЛЬТА И ВОЛЬФРАМА

И. О. Терёшкин

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

Различные области современной науки и техники требуют разработки новых функциональных материалов и инструментов, в том числе прочных, устойчивых к физическим повреждениям, термическим деформациям и пр. В частности, широко востребованы карбиды вольфрама. Изготовление материалов из тугоплавких металлов требует высоких энергетических затрат. В ИНХ СО РАН развивается альтернативный способ, который позволяет существенно снизить эти затраты – термическое разложение двойных комплексных солей. Так, специально для получения продуктов содержащих карбиды кобальта и вольфрама были синтезированы соли  $[\text{CoEn}_3]_2(\text{W}_7\text{O}_{24}) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (А) и  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{WO}_4)$ . В работе [1] было показано, что при термическом разложении А в атмосфере водорода образуются металлический вольфрам и  $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$  в соотношении 65/35 % вес. В настоящей работе, для увеличения доли карбидных фаз термическое разложение солей проводили, подмешивая к ним активированный уголь. Рентгенографическое исследование полученных продуктов (дифрактометр Shimadzu,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение, Ni-фильтр, схема Брэгга – Brentano) показало, что при разложении А в атмосфере гелия образуются W,  $\text{Co}_2\text{W}_4\text{C}$  и  $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$  в соотношении 48/33/19 % вес. Таким образом, долю металлического вольфрама удалось понизить на 17%. Лучший результат был получен при разложении этой соли в атмосфере водорода. При относительно невысокой температуре 800°C образовался продукт, в котором доля металлического W составляет всего 5 %. Основу образца составляют карбидные фазы  $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$ ,  $\text{Co}_3\text{W}_3\text{C}$ ,  $\text{W}_2\text{C}$ , WC в отношении 9/33/20/33 % вес..

Автор выражает благодарность к.х.н. С. П. Храненко за синтез комплексных солей и к.х.н. П. Е. Плюснину за проведение термических экспериментов.

---

[1] Куратьева Н.В., Терешкин И.О., Храненко С.П., Громилов С.А. // ЖСХ. 2013. Т. 54. В печати.

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

## ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТАТАХ С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ

И. В. Тотосов

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН,  
г. Новосибирск

Представлены результаты экспериментального исследования кислородной интеркаляции и электронных транспортных свойств двух соединений  $R\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$  с  $R = \text{Y}$  и  $\text{Dy}$ . Соединения  $R\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$  имеют слоистую структуру, составленную из плоскостей  $\text{CoO}_2$  с гексагональной (треугольной решеткой), и допускают изменение содержания кислорода в широких пределах от  $x=0$  до  $x=1.5$ . В зависимости от количества атомов кислорода приходящихся на элементарную ячейку, средняя степень окисления ионов кобальта в этих кобальтатах изменяется от  $\text{Co}^{2.25+}$  до  $\text{Co}^{3+}$ , что, соответственно, оказывает сильное влияние на их свойства. Однако, систематические данные о зависимости электропроводящих свойств соединений  $R\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$  от концентрации кислорода до сих пор отсутствуют. Поликристаллические образцы  $R\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$  были синтезированы и предварительно изучены на предмет наличия примесных фаз средствами рентгеновской дифракции, а так же прошли предварительную обработку в виде отжига в обедненной кислородом атмосфере. Измерения проводились по четырехконтактной схеме с возможностью варьирования температуры в диапазоне от 4.2К до 550К. Полученные результаты демонстрируют диэлектрический характер электронного транспорта во всем интервале составов и дают численную информацию об изменении энергии активации электронов в материале по мере его насыщения кислородом.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

А. В. Уколов, А. В. Малоземов  
Томский государственный университет

Такие виды наночастиц как фуллерен, графен и углеродные нанотрубки – уже довольно хорошо исследованные объекты. Предложены различные сферы их применения, исследованы инновационные технологические аспекты. Актуальными также являются и исследования механических свойств нанообъектов, таких как, например, сопротивление движению наноразмерных частиц в среде, хотя эта область остается наименее освещенной в научных трудах.

Данная работа посвящена исследованию вероятности соударения молекул с частицей, что в конечном счёте определяет теоретическую возможность найти сопротивление наноразмерных частиц. Целью работы было изучение динамики наночастиц различной формы в газовой атмосфере.

Исследования проводились с использованием понятий  $\lambda$  – слой, теоремы об изменении количества движения, моноскоростная модель газа, число Кнудсена, силы Ван-дер-Ваальса, эффективный радиус частицы.

Понятие  $\lambda$ -слоя, окружающего наночастицу, оказалось очень плодотворным в отношении решения задач молекулярной статистики. Установлен различный характер зависимости вероятности соударения от размеров частиц. В случае когда  $\lambda$  – слой имеет сферическое искривление имеем, что вероятность столкновения молекулы с наночастицей пропорциональна отношению площади центрального сечения частицы к площади большого сечения  $\lambda$  – сферы, что в безразмерном виде определяется соотношением  $\delta = \frac{4}{3(1+Kn)^2}$ . Если имеем дело с цилиндрическим случаем, то вероятность столкновения пропорциональна отношению диаметра частицы к диаметру  $\lambda$  – цилиндра. Если же рассматривается плоский случай, то вероятность столкновения не зависит от геометрических параметров пластинки и определяется значением  $\delta = 0,25765$ .

На основании полученных значений были построены графики доли столкнувшихся с фуллереновой частицей, и нанотрубкой молекул. Исследования в этой области очень актуальны, поскольку решение задач отделения фуллеренов и графенов из сажистой смеси представляет большой интерес и может иметь большое прикладное значение.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук М. А. Бубенчиков.

## ЖИДКОФАЗНАЯ ЭПИТАКСИЯ КРЕМНИЕВОГО СЛОЯ ИЗ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Ш. Н. Усмонов

Физико-технический институт НПО «Физика-Солнце» АН РУз, г. Ташкент

Методом жидкофазной эпитаксии из ограниченного объема Sn раствора-расплава, насыщенного металлургическим Si марки KP-3 на pSi подложках с диаметром 20 мм выращивались эпитаксиальные слои Si. Металлургический Si предварительно не подвергался химической обработке (не были использованы кислоты), его исходный состав в вес. процентах составлял: Si - 96, Al - 1.5, Fe - 1.5, Ca - 1. Оптимальными параметрами технологического процесса роста слоев были следующие: температура начала кристаллизации –  $1050^{\circ}\text{C}$ , скорость охлаждения – 1 град/мин. Скорость кристаллизации слоев составляла – 0.15 мкм/мин, толщина ~ 35 мкм, тип проводимости электронный. Анализ растровых снимков и результатов, полученных на рентгеновском микроанализаторе «Jeol» JSM 5910 LV-Japan показал, что выращенные слои являются сплошными с плотной адгезией к подложке, распределение примесей по площади слоя равномерное, а состав по толщине слоя в атомных процентах в среднем составляет: Si - 97.01, C - 2.06, Sn - 0.75, остальные примеси - 0.18. По-видимому, в составе металлургического Si углерод присутствует в виде соединения SiC, которое растворяется в Sn и раствор-расплав обогащается молекулами SiC. При охлаждении раствора-расплава на Si подложки, помимо атомов Si, происходит кристаллизация молекул SiC, что обеспечивает высокое содержание C в эпитаксиальном nSi- слое.

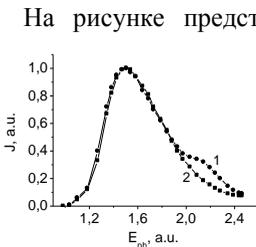


Рис. Спектральная фото-чувствительность pSi-nSi-структур с примесями (1) и без примесей (2) углерода.

На рисунке представлены спектральные чувствительности pSi-nSi-структур, в случаях, когда Sn раствор-расплав был насыщен металлургическим (кривая 1), и полупроводниковым (кривая 2) Si. Видно, что кривая 1 имеет подъем чувствительности в коротковолновой области спектра с максимумом при энергиях фотонов  $E_{ph} \approx 2,2$  эВ, который мы связываем с ионизацией SiC связи, находящейся в тетраэдрической решетке кремния, энергетический уровень которой находится на  $\Delta E = E_{ph} - E_{g, Si} = (2.2 - 1.1)$  эВ = 1.1 эВ ниже потолка валентной зоны кремния.

Научный руководитель – д-р физ.-мат.наук, проф. А. С. Саидов.

## ПОДГОТОВКА МИШЕНЕЙ ДЛЯ УСКОРИТЕЛЬНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА ИЗ БИМЕДИЦИНСКИХ ОБРАЗЦОВ

Т. М. Федотенко

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

Ускорительная масс-спектрометрия (УМС) – ультра чувствительный метод детектирования изотопов путем прямого счета атомов. Единственный в России ускорительный масс спектрометр (УМС ИЯФ) находится в центре коллективного пользования «Геохронология кайнозоя» СО РАН.

Ускорительная масс-спектрометрия находит широкое применение в биомедицинских исследованиях. Радиоуглерод используется в качестве «меток», которые вводятся в биологический объект для изучения процессов метаболизма, тестирования лекарств и т.д. Высокая чувствительность УМС позволяет проводить такие исследования без вреда для здоровья пациента, отслеживая «судьбу» вводимых препаратов в течении длительного времени.

До сих пор основной областью применения УМС ИЯФ было датирование археологических образцов по содержанию космогенного радиоуглерода  $^{14}\text{C}$ . Целью работы является адаптация метода для решения биомедицинских задач с помощью искусственных радиоуглеродных меток.

Для измерения методом УМС необходимо превратить исследуемый образец органического вещества в чистый углерод (мишень). В качестве базового подхода был выбран способ приготовления УМС мишеней из биологических образцов, включающий стадии сжигания образца, очистки  $\text{CO}_2$  от примесей, концентрирования  $\text{CO}_2$ , графитизации  $\text{CO}_2$  на железных катализаторах в присутствии водорода.

В ходе работы решены следующие задачи:

1. Проведены термодинамические расчеты для основных реакций, используемых в синтезе.
2. Впервые предложен метод концентрирования и очистки углекислого газа с использованием высокотемпературных регенерируемых поглотителей.
3. Создана и запущена линия подготовки биомедицинских образцов производительностью до 12 обр./сутки.
4. Исследована кинетика графитизации  $\text{CO}_2$  на Fe катализаторах.

Научный руководитель – канд. хим. наук А. Г. Окунев.

## **ГАЗОСТРУЙНЫЙ СИНТЕЗ И ОСАЖДЕНИЕ НАНОСТРУКТУР ЦИНКА И ЕГО ОКСИДА НА РАЗЛИЧНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ**

П. А. Фридрих, К. В. Кубрак

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН  
Новосибирский государственный технический университет

Использование нанотехнологий для создания новых материалов и модификации поверхностей - это общая тенденция развития для многих отраслей науки и техники. Одним из широко используемых направлений в этой области является получение материалов, состоящих из наночастиц металлов (оксидов металлов). Полученные наноструктурированные материалы, как правило, обладают новыми уникальными свойствами. Это значительно расширяет уже существующие и открывает новые области их применения.

Наноразмерный оксид цинка обладает оптоэлектронными свойствами: наблюдается сдвиг полосы поглощения в коротко – волновую область и интенсивная люминесценция в УФ – области.

Оксид цинка признан перспективным материалом для создания высокоэффективных светоизлучающих приборов, работающих в голубом и ультрафиолетовом диапазоне спектра электромагнитного излучения, солнечных элементов, проводящих прозрачных электродов, тонкопленочных транзисторов, сенсорных устройств и мощных электронных схем.

Данная работа посвящена исследованию газоструйного осаждения наноструктур цинка и его оксида при разных газодинамических условиях в источнике (температуре, давлении несущего газа и температуре подложки), установлению влияния параметров осаждения на морфологию получаемых наноструктур.

В ходе работы были получены наноструктуры цинка и его оксида, а так же было установлено влияние параметров осаждения на морфологию полученных наноструктур.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ ОКИСЛОВ InAs МЕТОДОМ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

С. Е. Хандархаева, А. К. Гутаковский  
Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

При создании приборов на основе структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) возникает проблема формирования границы раздела между бинарными соединениями  $A_3B_5$  и диэлектриком с низкой плотностью поверхностных состояний (ПС). В [1] показано, что в МДП-структурах с тонким фторсодержащим анодным оксидным слоем (ФАОС) наблюдается резкое снижение плотности ПС ( $<5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$ ), сравнимой с совершенной границей раздела Si-SiO<sub>2</sub>. На порядок снижается величина встроенного заряда ( $\sim 4 \cdot 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ), по сравнению с МДП-структурами с анодным оксидным слоем (АОС) без фтора. Целью данной работы является выяснение влияния состава электролита на структуру анодного окисла и границы раздела АОС-InAs(111)A и определение их влияния на электронные свойства границы раздела.

В данной работе методом высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии (ВРЭМ) поперечных срезов (110) было исследовано атомное строение границы раздела АОС-InAs(111)A и однородность пленок анодного окисла.

ВРЭМ исследования поперечных срезов показывают, что пленки толщиной 5 нм, сформированные в щелочном электролите без NH<sub>4</sub>F, имеют однородный контраст по всей толщине. При анодном окислении InAs в щелочном или кислотном электролите с NH<sub>4</sub>F однородность плотности анодного окисла по толщине пленки нарушается. В зависимости от условий окисления более плотные слои формируются либо у гетерограницы, либо в середине пленки. Важно отметить, что наименьшая шероховатость границы раздела (2-4 монослоя) наблюдается при отсутствии фтора в электролите. Наиболее шероховатая гетерограница формируется при использовании кислотного электролита со фтором. По данным электрофизических измерений наименьшее значение плотности ПС реализуется на границе раздела InAs/ФАОС.

---

1. Валищева Н.А., Гузев А.А., Ковчавцев А.П., Курьшев Г.Л., Левцова Т.А., Панова З.В. //Микроэлектроника. 2009, т.38. № 2. с.99

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. К. Гутаковский.

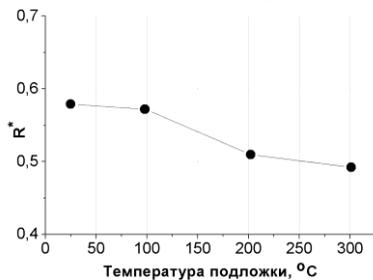
## ИЗМЕРЕНИЕ ПАРАМЕТРА МИКРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНОК АМОРФНОГО КРЕМНИЯ

И. В. Ческовская, А. О. Замчий

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Тонкие пленки аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) находят широкое применение в солнечных элементах, тонкопленочных транзисторах, жидкокристаллических дисплеях и т.д. Структурные свойства пленок являются важными параметрами и существенно влияют на характеристики таких устройств.

Работа посвящена исследованию пленок аморфного гидрогенизированного кремния методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Синтез пленок кремния осуществлялся методом газоструйного плазмохимического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой при различных температурах подложки.



*Рис. 1. Зависимость параметра микроструктуры от температуры подложки.*

микроструктуры:

$$R^* = \int I_{SiH_2}(\omega) d\omega / (\int I_{SiH_2}(\omega) d\omega + \int I_{SiH}(\omega) d\omega),$$

который был предложен в статье [1]. Из рис. 1 видно, что значение параметра микроструктуры составляет 0,5-0,6 и уменьшается с увеличением температуры подложки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-2361.2013.8.

---

*I. V. Vavrunkova, G. van Elzakker, M. Zeman, and P. Sutta. Phys. Status Solidi A 207, No. 3, 548-551 (2010).*

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. Я. Хмель.

# АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЁРДОГО ТЕЛА

А. А. Шмаков

Новосибирский государственный университет

Взаимодействие высокоэнергетичных кластеров с поверхностью твёрдой мишени характеризуется рассеянием энергии до нескольких десятков кэВ на поверхности с линейными размерами в десятки ангстрем и вызывает нелинейные эффекты, которые не наблюдаются при традиционной обработке ионным пучком.

Большое практическое имеет приповерхностная имплантация атомов, которая, в отличие от имплантации в глубинные слои, эффективно осуществляется только кластерными ионами. Высокоскоростное напыление с предварительной подготовкой подложки кластерно-ионным ударом позволяет наносить более ровные и тонкие плёнки. Сглаживание поверхности до атомарного уровня является одной из важнейших задач в области микроэлектроники, так как позволяет улучшить теплопроводящие характеристики зоны контакта двух твёрдых объектов. Полировка газовыми кластерными ионами, полученными из инертного газа, как раз позволяет достичь нужного уровня шероховатости ( $R_a$  около 5 нм) [1]. При различных энергиях, различных составах газово-кластерной смеси и направлениях потока можно добиться любого из описанных эффектов.

На экспериментальном стенде ЛЭМПУС [2], спроектированном и построенном в ОПФ НГУ, были проведены работы по изучению формирования кластеров и проведены исследования по фокусировке и доставке 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 обработка поверхностей образцов кластерно-ионными пучками с энергией до 30 кэВ. Полученные образцы исследованы на сканирующих электронных и атомно-силовом микроскопах.

В результате работы установлена связь между дозой облучения, энергией кластерных ионов и рельефом (шероховатостью) обработанных образцов.

---

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.

## РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛОСодЕРЖАЩИХ УГЛЕРОДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

А. А. Юсуф

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

Уникальные физико-химические свойства наноструктурированных форм углерода, в частности, графитоподобных материалов (ГМ) позволяют рассматривать их как перспективные объекты для применения в различных областях науки и техники. Использование таких материалов в качестве носителей для катализаторов различных процессов существенно снижает содержание благородных металлов в катализаторах, повышая их селективность и производительность.

Целью работы было установление в нанесенных катализаторах зависимости дисперсности активного компонента - платины от свойств носителя - ГМ. Все образцы содержали 1% вес. Pt и были получены одинаковым способом нанесения.

Изучаемые ГМ включают в себя промышленный активированный уголь, азот содержащие нанотрубки, синтезированные на катализаторе Ni/MgO, однослойные углеродные нанотрубки, синтезированные на двух видах катализаторов: Ni/CaO и Co/CaO, многослойные углеродные нанотрубки, полученные на катализаторе Ni/CaO. Нанесение платиновых частиц проводилось с применением предварительно приготовленного коллоидного раствора наночастиц платины.

Исследования проводились с применением рентгенографического метода фазового анализа (РФА). Экспериментальные рентгенографические картины получены на дифрактометре HZG-4 в монохроматизированном графитовым монохроматором медном излучении сканированием по точкам.

В ходе работы были охарактеризованы носители - определен их фазовый состав и размеры кристаллитов в фазах. Выяснено, что все образцы на основе нанотрубок содержат в своем составе остатки катализаторов в виде металлических частиц Ni либо Co с размерами 150-200Å, а активированный уголь - минеральную составляющую в виде фазы кварца  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.

Все образцы катализаторов содержали окристаллизованную фазу металлической платины, количество и размер кристаллитов которой зависит от носителя.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. Э. М. Мороз.

## **СОВРЕМЕННЫЕ ТРЕБОВАНИЯ И ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ И ПРОЕКТИРОВАНИЯ СЛУЖБЫ ТЕХНИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ НА ПРЕДПРИЯТИИ**

О. В. Янович, О. С. Зиборова, Г. А. Вдовина, Н. В. Дорохова  
Томский государственный университет

Одним из составляющих элементов системы управления качеством на стадиях производства и реализации промышленной продукции является организация и проведение технического контроля качества. СТК (система технического контроля) является основным элементом системы управления качеством. Технический контроль – это проверка соответствия продукции или процесса, от которого зависит качество продукции, установленным стандартам или техническим требованиям. Основной задачей технического контроля на предприятии является своевременное получение полной и достоверной информации о качестве продукции, состоянии оборудования и технологического процесса с целью предупреждения неполадок и отклонений, которые могут привести к нарушениям требований стандартов и технических условий.

Проектирование систем технического контроля выполняется при создании нового предприятия, совершенствовании системы технической подготовки предприятия, при совершенствовании управления производством и системы управления продукцией, при целевом совершенствовании системы технического контроля (СТК).

Известны следующие принципы проектирования СТК: системность, стандартизация, оптимальность, динамичность, автоматизация, преемственность. Известные принципы проанализированы в докладе.

Работы по совершенствованию и развитию СТК необходимо проводить в соответствии с современными требованиями, предъявляемыми к наукоёмким производствам и нанотехнологиям.

Существующие принципы и требования на наш взгляд необходимо дополнить новыми: 1. проектирования измерений с целью контроля, диагностирования или испытания технических систем (ТС); 2. подготовки и переподготовки технических специалистов и специалистов по управлению качеством; 3. разработка единой автоматизированной системы технического контроля и технологического процесса (во многих случаях невозможно определить четкую грань между технологией производства и технологией контроля); 4. принципом энергоэффективности; 5. принципом единства технологического процесса и системы технического контроля.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Л. Н. Попов.

# ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 543.424.2

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ГЛИЦИНА МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

С. С. Брагин

Институт автоматики и электрометрии СО РАН, г. Новосибирск  
Новосибирский государственный университет

Гидратация (взаимодействие молекул растворенного вещества с молекулами воды) играет ключевую роль во многих биологических процессах, к примеру, в образовании мембран, фолдинге белков. Кроме того, гидратация влияет на химические свойства растворенного вещества, к примеру, предельную растворимость в воде.

В нашей работе исследовались гидратные оболочки в водных растворах глицина. Глицин является простейшей аминокислотой, химическая формула –  $\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$ . Глицин входит в состав многих белков, его предельная растворимость в воде при комнатной температуре  $\approx 230$  г на кг воды.

Исследования производились методом комбинационного рассеяния света. Использовалась 90-градусная схема рассеяния. В качестве возбуждающего света использовалось лазерное излучение с длиной волны 532,1 нм и мощностью 200 мВт. Регистрирующая схема включала отрезающий фильтр, монохроматор (900 штрихов на мм) и ПЗС-камеру. Были исследованы диапазоны ОН и СН колебаний. Так как внутримолекулярные колебания чувствительны к окружению, то и спектры молекул воды, находящихся в гидратной оболочке, и молекул в чистой воде различны. Были измерены спектры чистой воды и растворов с различной концентрацией глицина, и с помощью них получены спектры, содержащие изменения спектра воды, вызванные присутствием растворенного вещества (англ. *solute-correlated spectra*).

Полученные данные использованы для оценки числа молекул воды в гидратной оболочке и определения зависимости этого числа от концентрации глицина.

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

## БЫСТРЫЕ ПРОЦЕССЫ В ФОТОХИМИИ $\text{Ni}(\text{S}_2\text{P}(\text{iBu})_2)_2$ В ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Д. С. Будкина

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Дитиолатные комплексы переходных металлов обладают широким спектром применения в различных областях науки и индустрии. Несмотря на это, фотохимия этих комплексов практически не изучена. Исследование спектральных и кинетических характеристик активных промежуточных частиц, образующихся в фотохимических превращениях, позволит объяснить многие химические свойства и механизмы действия дитиолатных комплексов в различных областях науки и позволит существенно расширить область их применения.

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  $\text{Ni}(\text{S}_2\text{P}(\text{iBu})_2)_2$  в растворе  $\text{CCl}_4$ . На основе полученных данных был предложен механизм фотохимических превращений  $(\text{dtp} \equiv \text{S}_2\text{P}(\text{iBu})_2)$

- 1)  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})_2 + \text{CCl}_4 \xrightarrow{h\nu} \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)^+ + \text{CCl}_4^{\bullet-}$  перенос электрона
- 2)  $\text{CCl}_4^{\bullet-} \rightarrow \text{Cl} + \text{CCl}_3^\bullet$  диссоциация анион-радикала
- 3)  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)^+ + \text{Cl}^- \rightarrow \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)\text{Cl}$  координация иона хлора
- 4)  $[\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)\text{Cl}] \rightarrow [\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)\text{Cl}]^{\text{A}}$  (A) изменение геометрии
- 5)  $\text{A} + \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})_2 \rightarrow [\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})_2]$  (B) образование димера
- 6)  $\text{B} + \text{B} \rightarrow 2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})\text{Cl} + (\text{dtp})_2 + 2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})_2$  реакция второго порядка
- 7)  $2 \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})\text{Cl} \rightarrow \text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})_2 + \text{Ni}^{\text{II}}\text{Cl}_2$  образование осадка  $\text{NiCl}_2$

Фотохимия  $\text{Ni}(\text{S}_2\text{P}(\text{iBu})_2)_2$  связана с быстрым переносом электрона с возбужденного комплекса на ближайшую молекулу растворителя с образованием интермедиата  $\text{Ni}^{\text{II}}(\text{dtp})(\text{dtp}^\bullet)\text{Cl}$  (A). Интермедиат A исчезает в реакции с исходным комплексом с формированием димера B, который за несколько миллисекунд рекомбинирует с образованием конечных продуктов: комплекса  $\text{NiCl}_2$  и молекулы дисульфида  $(\text{S}_2\text{P}(\text{iBu})_2)_2$ .

Полученная информация о фотохимии комплекса  $\text{Ni}(\text{S}_2\text{COEt})_2$  в  $\text{CCl}_4$  имеет фундаментальное значение и вносит существенный вклад в понимание быстрых процессов с участием широкого класса серосодержащих комплексов переходных металлов.

Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. В. Ф. Плюснин.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ АДсорбЦИИ ВОДЫ В СЛОЯХ АЛЮМОФОСФАТА FАМ-Z02

И. С. Гирник

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

Адсорбционные термотрансформаторы (АТТ) позволяют рационально использовать низкопотенциальную теплоту [1]. Целями данной работы являются а) исследование динамики адсорбции воды алюмофосфатом FАМ-Z02 в условиях, близких к изобарическим стадиям цикла АТТ, и б) оценка удельной мощности преобразования в зависимости от размера гранул адсорбента  $R$  (0.4-0.5 и 0.8-0.9 мм) и количества его слоев  $n$  (1, 2 и 4) на поверхности адсорбера. Гранул свободно лежали на металлической подложке, а адсорбцию инициировали ее быстрым охлаждением при почти постоянном давлении паров воды над слоем [2].

Оказалось, что кинетические кривые поглощения воды хорошо описываются экспоненциальной функцией  $1-\exp(-t/\tau)$ . Характерное время адсорбции растет при увеличении  $R$  (при  $n = \text{const}$ ) и  $n$  (при  $R = \text{const}$ ), но остается постоянным, если сохраняется отношение  $(S/m) = (\text{площадь теплопереноса})/(\text{масса адсорбента})$ . Так, кинетики для  $n$  слоев гранул 0.8-0.9 мм и  $2n$  слоев гранул 0.4-0.5 мм практически совпадают (здесь  $n = 1$  и 2). Эти результаты обсуждаются с точки зрения молекулярной теории тепло- и массопереноса по газовой фазе, окружающей гранулы адсорбента.

Полученные результаты согласуются с результатами аналогичного исследования для другого адсорбента, перспективного для АТТ - силикагеля Fuji RD [3]. Из начальной скорости адсорбции воды оценена максимальная удельная холодильная мощность  $W_{\text{max}}$ , которая может быть получена в испарителе АТТ. Эта мощность является линейной функцией отношения  $(S/m)$  независимо от природы адсорбента, размера его гранул и толщины слоя. Наличие этой универсальной инвариантности способствует более глубокому пониманию физико-химических процессов в АТТ и позволяет дать полезные рекомендации по оптимальному выбору сорбента и организации адсорбера.

1. F. Meunier, Clean Production Processes, V. 3 (2001) 8-20.
2. Yu.I. Aristov et al, Int. J. Heat and Mass Tr., V. 51, N 19-20 (2008) 4966-72.
3. Yu.I. Aristov, I.S. Glaznev, I.S. Girnik, Energy, V. 46, N 1 (2012) 484-492.

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

## ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОГО АНТИПИРЕНА НА ПОЛИЭТИЛЕНА РАЗЛИЧНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ВЕСА

М. Б. Гончикжапов

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН им. Воеводского

Горючесть полимеров является одним из самых важных аспектов в их применении. Одним из действенных способов снижения горючести полимеров является введение химически активных антипиренов в их состав. Фундаментальным аспектом решения задачи является построение физико-химического механизма действия химически активных антипиренов на процесс разложения и горения полимеров. Однако эта задача не решена. Ранее в работах [1,2] было исследовано влияние трифенилфосфата (ТФФ), как антипирена, на термическое разложение и горение сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ). Было показано, что ТФФ является эффективным антипиреном для СВМПЭ. В данной работе объектами исследований стали полиэтилены низкого давления (ПЭНД) с меньшими молекулярными массами  $MW_1=10^5$  и  $MW_2=3,8 \cdot 10^5$ , где в качестве антипирена также был использован ТФФ.

Методами динамического масс-спектрометрического термического анализа (ДМСТА), термогравиметрии, микротермопар и видеосъемки были определены кинетические параметры процесса термического разложения порошков чистых ПЭНД и с добавкой 10% ТФФ по массе, а также скорости горения прессованных образцов и температуры их поверхности при горении в воздухе. Показано, что эффективность ТФФ, как антипирена, зависит от молекулярного веса полиэтилена.

---

1. М. Б. Гончикжапов, А. А. Палецкий, Л. В. Куйбида, И. К. Шундрина, О. П. Коробейничев, “Снижение горючести сверхвысокомолекулярного полиэтилена добавками трифенилфосфата”, Физика горения и взрыва, 2012, том 48, № 5, стр. 97-109

2. O.P. Korobeinichev, A.A. Paletsky, L.V. Kuibida, M.B. Gonchikzhapov, I.K. Shundrina, “Reduction of flammability of ultrahigh-molecular-weight polyethylene by using triphenyl phosphate additives”, Proceedings of Combustion Institute, 34, 2012, 2699-2706.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БИЛИПИДНЫХ МЕМБРАН В ВОДНОМ РАСТВОРЕ NaCl МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

А. А. Дмитриев

Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Фосфолипидные мембраны являются удобной модельной системой, исследование которой позволяет понять свойства, структуру и участие в клеточном метаболизме биологических мембран. Одной из интересных задач, связанных с исследованием липидных мембран, является изучение их свойств при добавлении соли. В ряде работ было показано, что добавление солей с ионами разных валентностей вызывает изменение локальной подвижности липидов, образование связанных комплексов, состоящих из катионов и нескольких липидных молекул, оказывает влияние на гидратацию и фазовый переход. Известно, что при охлаждении клетки вокруг неё образуется оболочка из гидрогалита  $\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Поэтому одной из актуальных задач является определение влияния гидрогалита на целостность мембраны и её динамический отклик.

Данная работа посвящена исследованию влияния соли NaCl на поведение фосфолипидной мембраны POPC, а также влияния гидрогалита на фазовый переход в мембране. Исследование проводилось методом комбинационного рассеяния света (КРС). Были измерены спектры КРС систем POPC-вода и POPC-вода-NaCl в нескольких спектральных диапазонах, соответствующих колебаниям различных групп атомов и колебаниям мембраны как целого. Были определены температурные зависимости отношения пиков антисимметричной C-H моды к симметричной C-H моде для случаев нагрева и охлаждения, зависимости отношения интегральных интенсивностей линий C-C trans колебаний и C-N колебаний. Также были найдены температурные зависимости частот низкочастотных пиков, соответствующих колебаниям мембраны как целого.

В работе показано, что отношение антисимметричной C-H моды к симметричной C-H моде возрастает в случае добавления соли, что свидетельствует о более жесткой структуре мембраны по сравнению со случаем “чистого” POPC. Характеристики спектров КРС, отражающие конформационное состояние неполярных хвостов и поведение мембраны как целого, не показывают заметной зависимости от наличия NaCl.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ МЕТИЛПЕНТАНОАТА НА ОБРАЗОВАНИЕ ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ ПАУ В ПЛАМЕНИ СМЕСИ Н-ГЕПТАН/ТОЛУОЛ

А. М. Дмитриев

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Использование смеси дизельного топлива с биодизельным может стать актуальным не только в связи с сокращением потребления нефти, но также в связи со способностью добавки биодизельного топлива снижать выбросы загрязняющих веществ (в частности, сажи и полициклических ароматических углеводородов - ПАУ) в дизельных двигателях. Биодизель представляет собой, как правило, смесь метиловых эфиров жирных кислот. Хотя многие работы были посвящены исследованию влияния добавки различных метиловых эфиров (как моделей биодизеля) на образование сажи и ПАУ, экспериментальных данных о влиянии метиловых эфиров на образование предшественников ПАУ в пламени дизельного топлива крайне мало. Такие данные необходимы для проверки применимости разрабатываемых химико-кинетических механизмов образования предшественников ПАУ в пламени смесей метиловый эфир/углеводород.

Цель данной работы заключается в экспериментальном изучении влияния метилпентаноата на образование предшественников ПАУ в пламени н-гептан/толуол (7/3 по объему жидкости). Метилпентаноат (МП, 5 атомов углерода в алкильной цепи) и смесь н-гептан/толуол рассматриваются в качестве модельных аналогов биотоплива и дизельного топлива соответственно. Исследование влияния МП на образование предшественников ПАУ в смеси н-гептан/толуол является важным шагом к пониманию процессов в реальной смеси биодизель/дизельное топливо.

В работе изучены два богатых горючим пламени (горючее/O<sub>2</sub>/Ar), стабилизированных на плоской горелке при 1 атм. В качестве горючего в одном пламени использовалась смесь н-гептан/толуол, а в другом – смесь н-гептан/толуол/МП. Оба пламени имели одинаковый коэффициент избытка горючего  $\phi=1,75$ . Методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии измерены профили мольных долей реагентов, основных продуктов и различных промежуточных соединений в обоих пламенах. Проведен сравнительный анализ полученных профилей мольной доли предшественников ПАУ (ацетилен, этилен, пропаргил, бензол, диацетилен, стирол) в пламени с добавкой МП и без него.

Научный руководитель – канд. физ.- мат. наук Д. А. Князьков.

## ИССЛЕДОВАНИЯ СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫХ МАГНИТО-СТРУКТУРНЫХ ЯВЛЕНИЙ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНЕТИКАХ «ДЫШАЩИЕ КРИСТАЛЛЫ»

И. Ю. Дроздук

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Молекулярные магнетики, обладающие фотопереключаемыми магнитными свойствами, интенсивно изучаются в течение последних нескольких десятилетий. Они являются интересными объектами не только с фундаментальной точки зрения, но и благодаря потенциальной возможности применения таких соединений в спинтронике. Помимо хорошо известных комплексов переходных металлов, демонстрирующих классический спиновый кроссовер, были синтезированы соединения на основе обменно-связанных кластеров меди(II) со стабильными нитроксильными радикалами, способные к неклассическому спиновому кроссоверу. Семейство соединений данного типа, носящее название «дышащих кристаллов», демонстрирует высоко кооперативное термо- и фотоиндуцированное переключение спинового состояния. «Дышащие кристаллы» формируются на основе гексафторацетилацетонатов меди Cu(II) со стабильными нитронилнитроксильными радикалами. В зависимости от внешних условий, комплексы могут находиться в двух различных по своей структуре и магнитным свойствам состояниях: сильносвязанном (обменное взаимодействие между медью и нитроксильными радикалами достаточно велико, и спиновая триада O-Cu-O ведет себя как один эффективный спин) и слабосвязанном (обменное взаимодействие между медью и нитроксильными радикалами на 1-2 порядка меньше, чем в предыдущем случае, спиновая триада ведет себя как три независимых спина). Ранее были разработаны подходы для успешного изучения переключений этих спиновых состояний методом ЭПР. В рамках данной работы было исследовано явление светопереключения и его особенностей в новых представителях «дышащих кристаллов» с модифицированными лигандами. Одной из принципиально важных особенностей по сравнению с наблюдаемыми ранее соединениями стала достаточно высокая температура наблюдения возбужденного состояния (вплоть до 65 K).

Работа поддержана грантами РФФИ № 11-03-00158, 12-03-33010, грантом Президента РФ МК-1662.2012.3.

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

## МЕХАНИЗМ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЗАДЕРЖАННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ В ОБЛУЧЕННЫХ ПОЛИЭФИРАХ

В. А. Егоров

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Один из путей, по которому сегодня развивается производство литий ионных батарей, является оптимизация различных показателей электролитов, используемых в них. Недавние публикации показали привлекательность использования в этом отношении полиэфиров [1]. Поэтому с прикладной точки зрения немаловажным является улучшение понимания процессов транспорта носителей заряда в этих средах.

Одним из препятствий к предсказанию величин подвижности носителей заряда в полиэфирах является отсутствие данных о подвижностях ионов различного размера. С этой точки зрения представляет интерес изучение транспорта органических ион-радикалов. Однако ранее подвижности таких частиц в полиэфирах не измерялись.

Цель данного исследования состоит в установлении механизма возникновения задержанной флуоресценции в облученных полиэфирах и применимости метода времязрешенного электрического эффекта (ВЭЭ) для определения подвижности органических ион-радикалов в этих средах.

Была зарегистрирована задержанная флуоресценция растворов 1,2-дифенилиндола в диметиловых эфирах этиленгликолей, диглиме и триглиме, при облучении рентгеновским излучением. Обнаружено влияние внешнего электрического поля на скорость спада кинетики, и показано, что степень влияния поля пропорциональна квадрату напряженности. Это позволяет сделать вывод, что наблюдаемая задержанная флуоресценция облученных растворов 1,2-дифенилиндола в исследованных полиэфирах определяется рекомбинацией геминальных пар органических ион радикалов. С помощью полученных данных впервые определены значения подвижности ион-радикалов 1,2-дифенилиндола в диглиме и триглиме.

---

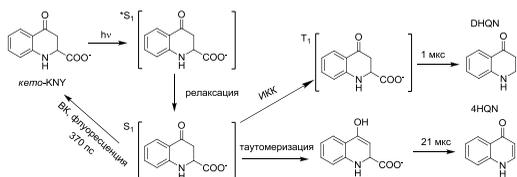
1. Electrolytes for high-energy lithium batteries / Jennifer L. Schaefer, Yingying Lu, Surya S. Mogant, Praveen Agarwal, N. Jayaprakash, Lynden A. Archer // *Appl. Nanosci.* (2012) 2:91–109.

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

## ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛТОГО КИНУРЕНИНА И КИНУРЕНОВОЙ КИСЛОТЫ

Е. А. Зеленцова, П. С. Шерин, О. А. Снытникова, Ю. П. Центалович  
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск  
Новосибирский государственный университет

Хрусталик человеческого глаза содержит фото-стабильные соединения, поглощающие ультра-фиолетовое излучение – УФ-фильтры. Фотовозбужденные состояния этих молекул быстро гибнут по безызлучательному каналу, защищая тем самым хрусталик и сетчатку от фотоповреждений. Было показано, что УФ-фильтры являются термически нестабильными, поэтому хрусталик может содержать также продукты их распада. Такими продуктами являются желтый кинуренин (KNY) и кинуреновая кислота (KNA), чьи фотохимические реакции могут приводить к нежелательным модификациям белков хрусталика. Целью данной работы было исследование фотохимических свойств KNA и KNY и сравнение со свойствами ранее изученных соединений данного класса. Для изучения свойств этих соединений был использован широкий спектр методов оптической спектроскопии. Исследование показало, что под воздействием УФ-излучения KNA эффективно образует триплетное состояние с квантовым выходом около 80%, основным механизмом гибели которого является триплет-триплетная аннигиляция. Основным каналом гибели фотовозбужденного KNY является внутренняя конверсия в основное состояние. Помимо этого, KNY образует триплетное состояние и, предположительно, енольную форму с квантовыми выходами около 2% и 1%. Эти формы неустойчивы и быстро гибнут с образованием продуктов – 2,3-дигидро-4-гидроксихинолина (DHQN) и 4-гидроксихинолина (4HQN), соответственно. Оба соединения являются фотохимически более активными и менее стабильными, чем исходные УФ-фильтры.



Образующиеся в результате фотолиза интермедиаты и продукты могут вступать в реакции с белками хрусталика, давая тем самым вклад в развитие

окислительного стресса.

РФФИ (11-04-00143, 11-03-00296 и 12-04-31244), ОХМН РАН, Правительства РФ (2012-1.2.1-12-000-1013-009, грант №11.G34.31.0045) и НШ (2429.2012.3).

Научные руководители – д-р хим. наук, Ю. П. Центалович, канд. физ.-мат. наук, П. С. Шерин, канд. хим. наук О. А. Снытникова.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛ И СТАБИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ [BMIM]PF<sub>6</sub> И [BMIM]BF<sub>4</sub> МЕТОДОМ ЭПР

М. Ю. Иванов

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск

Активное исследование ионных жидкостей (ИЖ) началось более 20 лет назад и не ослабевает в настоящее время. В частности, это связано с уникальными свойствами ИЖ и возможностью их применения в «зеленой химии». Одним из интересных свойств ИЖ является значительное отличие их вязкости на макро- и микро-уровне. Многие радикальные фотохимические реакции в жидкостях и магнитные эффекты, наблюдающиеся в ходе таких реакций, существенно зависят от вязкости, влияющей на взаимную диффузию радикалов и формирование поляризации. Поэтому, изучение фотохимических реакций, магнитных и спиновых эффектов в ИЖ представляется интересной и актуальной задачей. Методы ЭПР в стационарном и время-разрешенном (ВР) режимах широко применяются в спиновой химии. Однако на настоящий момент всего несколько исследований в ИЖ было проведено методом ЭПР. В частности, ЭПР спиновых зондов позволяет изучать микровязкость ИЖ [1], а ВР ЭПР – исследовать фотоиндуцированные триплетные состояния вплоть до комнатных температур [2].

Целью нашей работы является дальнейшее развитие данных подходов и систематическое изучение фотохимических реакций в ИЖ с аномальной вязкостью. Методом ЭПР спиновых зондов была исследована микровязкость двух ИЖ ([bmim]PF<sub>6</sub> и [bmim]BF<sub>4</sub>) в температурном диапазоне 80-290 К. В качестве спинового зонда использовался стабильный нитроксильный радикал ТЕМРО. Моделирование спектров медленного вращения позволило оценить микро-вязкость данных ИЖ. Далее, на модельной системе ZnTRP/ИЖ апробирована возможность применения ВР ЭПР к данному кругу задач. Фотовозбуждение с  $\lambda=532$  нм индуцирует долгоживущее триплетное состояние ZnTRP, детектируемое ВР ЭПР X-диапазона. Мы продолжаем изучение формирования и релаксации электронной спиновой поляризации в зависимости от температуры/вязкости ИЖ. Данная работа поддержана грантом РФФИ 12-03-33010.

1. V. Strehmel, A. Laschewsky, et al., *J. Phys. Org. Chem.* 19 (2006) 318–325.
2. A. Kawai, T. Hidemori, K. Shibuya, *Mol. Phys.* 104 (2006) 1573-1579.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР КИСЛОРОДНЫХ ДЕФЕКТОВ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛМАЗАХ

А. Ю. Комаровских

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

Вопрос вхождения кислорода в структуру алмаза до сих пор остаётся открытым. Для изучения возможности образования кислородных дефектов были выращены алмазы по «Барс» технологии в карбонатной среде без катализаторов (Co, Fe и Ni) как на затравку, так и без неё. Спектры ЭПР исследуемых кристаллов обусловлены проявлением спектра ЭПР замещающих атомов азота и трёх новых анизотропных спектров ЭПР. Исследование угловой зависимости одного из них – ОХ1, показало, что спектр обусловлен центром с электронным спином  $S=1/2$  и анизотропным  $g$ -фактором со следующими значениями:  $g_1=g_2=2.0032$ ,  $g_3=2.0038$ . Направления главных значений  $g$ -тензора соответствуют следующим направлениям:  $g_1$  отклонён на  $44^\circ$  от [100],  $g_2$  направлен вдоль [0-11],  $g_3$  отклонён на  $44^\circ$  от [0-1-1]. Второй парамагнитный центр – ОХ2, характеризуется спином  $S = 1/2$  и анизотропным  $g$ - фактором:  $g_1=2.0098$ ,  $g_2=1.9991$ ,  $g_3=2.0113$ . Направления главных значений  $g$ -тензора соответствуют следующим направлениям:  $g_1$  отклонён на  $9^\circ$  от [100],  $g_2$  отклонён на  $9^\circ$  от [011],  $g_3$  направлен вдоль [0-11]. Третий парамагнитный центр – ОХ3, характеризуется спином  $S = 1/2$  и анизотропным  $g$ -фактором:  $g_1=2.0064$ ,  $g_2=2.0008$ ,  $g_3=2.0052$ . Направления главных значений  $g$ -тензора соответствуют следующим направлениям:  $g_1$  отклонён на  $15^\circ$  от [100],  $g_2$  отклонён на  $15^\circ$  от [011],  $g_3$  направлен вдоль [0-11].

Высокая анизотропия  $g$ -факторов исследуемых центров при отсутствии ионов переходных металлов в кристаллах алмаза, выращенных в кислородсодержащей среде, дает основание предположить, что в структуру исследуемых центров входят атомы кислорода. На основании данных по электронному состоянию центров и их симметрии для центров ОХ1 и ОХ2 предложены структурные модели в виде отрицательно заряженных замещающего кислорода (для ОХ1 центра) и расщепленной по  $\langle 100 \rangle$  межузельной конфигурации (для ОХ2 центра). Для ОХ3 центра предложена структура двойной расщепленной по  $\langle 100 \rangle$  межузельной конфигурации, в которую входит примесный атом кислорода. Донором электронов для исследуемых центров является примесный азот, состояние  $N^+$  которого проявляется в ИК спектрах полосой  $1332 \text{ см}^{-1}$ .

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

## **ОПТИЧЕСКИЕ И СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЕ СПЕКТРЫ ЭПР ТОНКИХ ПЛЕНОК КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНОВ И ПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРОВ**

Е. А. Лукина

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск  
Новосибирский государственный университет

Данная работа посвящена исследованию композитов проводящего полимера РЗНТ (поли-3-гексилтиофен) и производных фуллерена РС60ВМ и РС70ВМ, используемых для создания органических фотоэлементов. При поглощении света происходит светоиндуцированный перенос электрона с полимерной цепи РЗНТ на фуллерен с образованием радикальной пары РСВМ/РЗНТ<sup>+</sup>, которая в дальнейшем распадается на свободные носители заряда.

Светоиндуцированные спектры ЭПР композитов РЗНТ/РС60ВМ и РЗНТ/РС70ВМ существенно различаются. В композите РЗНТ/РС60ВМ сигнал практически исчезает при температуре больше 250К, т.к. при высокой температуре уменьшается время рекомбинации зарядов. В композите РЗНТ/РС70ВМ сигнал ЭПР наблюдается и при комнатной температуре, предположительно, благодаря более медленной рекомбинации. В зависимости от температуры наблюдается изменение относительной интенсивности вкладов поляронов РЗНТ<sup>+</sup> и радикалов фуллерена РС60ВМ в спектр. При низкой температуре линия фуллеренов РС60ВМ становится интенсивнее, чем линия РЗНТ<sup>+</sup>, возможно из-за образования так называемых би-поляронов в синглетном состоянии – близко расположенных носителей заряда на полимерной цепи с суммарным спином равным нулю.

Спектры ЭПР композитов РЗНТ/РСВМ численно моделированы в приближении пары невзаимодействующих радикалов с анизотропными g-тензорами.

Отжиг композитов, полученных с использованием различных растворителей, приводит к изменению вклада полимера РЗНТ в оптический спектр, т.к. молекулы полимера перестраиваются, образуя более упорядоченную кристаллическую структуру. Кроме того, при отжиге выпаривается остаток промежуточного растворителя, что также может влиять на спектр. В результате отжига увеличивается поглощение в длинноволновой области, появляются более определенные пики поглощения.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Л. В. Кулик.

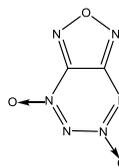
## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РЕАКЦИЙ ТЕРМОЛИЗА ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Д. Е. Машканцев

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Для создания детальных кинетических механизмов горения высокоэнергетических соединений необходимо знание констант скорости всех предполагаемых элементарных реакций. В связи с этим в настоящее время очень актуальной является задача теоретического расчета констант скорости, а также их зависимости от температуры и давления. Вычисления подобного типа требуют знания структуры и свойств реагентов, продуктов и переходных состояний каждой элементарной стадии. Современные квантовохимические методы позволяют рассчитывать эти величины с точностью, сравнимой с экспериментальной.

Основной задачей данной работы является исследование механизма первичных реакций термического разложения фуразано-1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксида (ФТДО, схема 1). Интерес к этому соединению, имеющему чрезвычайно высокую теплоту образования в стандартном состоянии (~160 ккал/моль), обусловлен перспективой создания на его основе высокоэнергетических конденсированных систем.



**Схема 1**

В рамках поставленной задачи были проведены расчеты свойств (геометрии, частот нормальных колебаний и термодинамики) исходного соединения и целого ряда предполагаемых переходных состояний и интермедиатов, первичных реакций термического распада ФТДО. При расчетах применялись теория функционала плотности (метод M06-2X, специально оптимизированный для расчетов термодинамики и активационных барьеров) и многоконфигурационные квантовохимические методы (CASSCF/CASPT2).

По результатам расчетов найдены несколько каналов реакций первичного разложения ФТДО. Установлено, что доминирующая первичная реакция протекает через бирадикальный интермедиат с последующим отщеплением монооксида азота. Активационный барьер данного процесса составляет около 30 ккал/моль, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев.

## **ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ПЛЕНОК НА ИХ СТРУКТУРУ ПРИ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РАЗЛОЖЕНИИ УГЛЕВОДОРОДОВ**

Н. В.Нагирный<sup>1</sup>, М. Н.Хомяков<sup>2</sup>, С. Ю.Чепкасов<sup>1</sup>  
Новосибирский государственный университет<sup>1</sup>  
Институт лазерной физики СО РАН<sup>2</sup>

Аморфные алмазоподобные тонкие пленки углерода интересны, как с точки зрения фундаментальных исследований, так и с точки зрения их практического применения, благодаря их уникальным и регулируемым свойствам, таким как высокая твердость, износостойкость, химическая инертность, хорошие трибологические характеристики.

Алмазоподобные пленки углерода уже довольно хорошо исследованный объект, однако процессы протекающие во время синтеза пленок и ведущие к определенным интересующим свойствам и структуре пленок, сложны и изучены большей частью как некоторые эмпирические зависимости. Таким образом, более полное понимание процессов формирования пленки позволит управлять ее свойствами в более широких пределах.

На данном этапе работы нас интересует зависимость структуры пленки от смеси газов используемых при синтезе, и параметров подложки (материал, температура). При этом мы ориентируемся на получение максимальной твердости пленки.

Исследования свойств и структуры пленок проводились методами атомно-силовой микроскопии, наноиндентирования, сканирующей электронной микроскопии, комбинационного рассеяния света, ИК-спектроскопии и эллипсометрии.

Синтез пленок проводился на установке плазмохимического синтеза "Спутник" в лаборатории экспериментальной физики НГУ с помощью ионных источников типов "Аида" и "Радикал" при давлениях 0,01-1 Па, и энергии ионов 10-500 эВ. Пленки подвергались температурной релаксации в вакуумной камере непосредственно после синтеза. Температура подложки контролировалась в диапазоне 30-400°C.

В данном докладе представлены зависимости твердости и шероховатости пленки от концентрации используемых газов в смеси (ацетилена, метана, водорода, аргона), а также зависимости скорости роста пленки от температуры подложки и используемой смеси газа.

В докладе обсуждается влияние концентрации водорода во время синтеза на свойства и скорость роста пленки, обсуждаются достоинства и недостатки использования различных смесей газа для синтеза алмазоподобных пленок.

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

# ТЕОРИЯ ИМПУЛЬСНОГО ЭПР РАДИКАЛЬНЫХ ПАР, РЕГИСТРИРУЕМОГО ПО ВЫХОДУ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИИ

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 при помощи 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 ЭПР хорошо развиты, однако в RYDMR наблюдаемой величиной является не намагниченность, как в ЭПР, а  $\rho_{SS}(t)$ . По этой причине невозможно использование импульсных последовательностей ЭПР, и требуется теоретическая разработка аналогов данных импульсных последовательностей для RYDMR. В настоящей работе исследована возможность рефокусировки населённости начального (синглетного) состояния при помощи различных импульсных последовательностей ( $\rho_{SS}$ -эхо). Был подтверждён результат Салихова и Молина (J. Phys. Chem., **97**, 13259 (1993)): 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 спин-спиновым взаимодействием; были предложены импульсные последовательности – аналоги импульсных ДЭЯР (двойной электрон-ядерный резонанс) и ДЭЭР (двойной электрон-электронный резонанс), детально исследованы случаи селективных и неселективных импульсов. Данные результаты дают теоретическую основу для изучения радикальных пар импульсными методами RYDMR.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-03-33082).

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРОКРЕКИНГА ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ**

П. Д. Парунин

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

В настоящее время в связи с истощением запасов текучей нефти, возрастает потребность в разработке новых технологических платформ, основанных на переработке в синтетическую нефть для получения дизельных и моторных топлив. В обозримом будущем битуминозные, гудроновые и сапропелитовые породы рассматриваются перспективным сырьем для получения синтетической нефти.

Существует только 2 подхода для получения легких нефтепродуктов: увеличение соотношения Н/С гидрированием или снижение соотношения С/Н коксованием. Наиболее предпочтительны методы с использованием водорода. При такой переработке получается наибольший выход углеводородных продуктов, чем при использовании термического коксования.

Проведение процесса гидрокрекинга напрямую может оказаться губительных для катализаторов из-за высокого содержания серы и металлов в битуминозном и др. сырье, которое может быстро формировать отложения в порах мезопористого катализатора и привести к его отравлению. Поэтому для их эффективного удаления предварительно в ходе процесса гидропереработки следует использовать катализаторы с большим диаметром пор. Одним из таких катализаторов может являться макропористый 3D структурированный оксид алюминия с нанесенными никелем, кобальтом, молибденом/или вольфрамом.

Целью данной работы является исследование данного вида катализаторов в процессе гидропереработки тяжелых углеводородов и подбор оптимальных условий процесса.

Исследования проводились на установке каталитического гидрокрекинга на татарской нефти с большим содержанием гудрона и битума.

Для оценки эффективности процесса анализировали содержание серы и металлов в продуктах гидропроцесса.

Научный руководитель – канд. хим. наук А. И. Лысиков

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ Ca<sup>2+</sup>-РАЗРЯЖЕННОГО ФОТОПРОТЕИНА ОБЕЛИНА В ПРИСУТСТВИИ ГЛИЦЕРИНА И ЭТАНОЛА

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

Ca<sup>2+</sup>-разряженный фотопротеин обелин, комплекс апопротеина с целентерамидом, является продуктом биолюминесцентной реакции обелина, ответственной за свечение гидроида *Obelia longissima*. Разряженный обелин, в отличие от исходного обелина, является флуоресцентным белком с  $\lambda_{\max}=500$  нм. Благодаря стабильности и нетоксичности разряженный обелин имеет достаточно широкий спектр возможного применения, и может быть использован в таких областях как гистология, цитология и криология. В связи с этим важно выявить влияние наиболее распространенных агентов – сопутствующих веществ, которые применяются в подобных исследованиях: глицерина и этанола. Этанол используют в цитологии и гистологии для фиксации клеток и тканей, а глицерин в качестве стабилизирующего агента, также глицерин используют в криологии в качестве проникающего криопротектора.

Данная работа посвящена выявлению зависимости спектральных характеристик фотолюминесценции Ca<sup>2+</sup>-разряженного обелина от концентрации глицерина и этанола в ферментативной среде.

Изучены спектры фотолюминесценции Ca<sup>2+</sup>-разряженного обелина при различной концентрации этанола (от 0,05% до 5,5%) и глицерина (от 0,52% до 3,3%). Все полученные спектры разложены на контуры, имеющие гауссово распределение. Установлено, что спектр испускания является суперпозицией трех контуров. Произведено соотнесение выделенных контуров различным флуоресцентным формам целентерамида: протонированной, частично протонированной и депротонированной формам. Следует отметить, что вклады контуров изменялись с ростом концентрации этанола и глицерина в сторону увеличения испускания протонированной формы целентерамида. Это может быть следствием деструктуризации активного центра и разрыва водородных связей между целентерамидом и аминокислотным окружением.

В результате проведенной работы установлено, что с увеличением концентрации глицерина и этанола вследствие возрастает вероятность испускания протонированной формы целентерамида. Для обоих случаев рассчитана константа спада интенсивности фотолюминесценции.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПИНОВОЙ ДИНАМИКИ ПОЛЯРОННЫХ ПАР В КОМПОЗИТАХ ФУЛЛЕРЕН/ПРОВОДЯЩИЙ ПОЛИМЕР

А. Г. Попов

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В настоящий момент большой интерес представляют солнечные батареи, созданные на основе композитов из проводящих полимеров и производных фуллеренов. Основным преимуществом выбора таких веществ является хорошая их растворимость в органических растворителях, что позволяет простыми методами производить тонкопленочные фотоэлектрические элементы.

Ключевым процессом в фотоэлектрической ячейке является фотоиндуцированный перенос заряда с молекулы донора на акцептор, с образованием радикальной пары. В литературе существуют данные о временах рекомбинации радикальной пары в диапазоне от 10 нс до нескольких десятков микросекунд, поэтому важно изучить механизмы их рекомбинации и спиновой динамики.

В данной работе исследовался композит, состоящий из поли(3-гексилтиофен-2,5-диил) РЗНТ и производных фуллеренов  $PC_{60}BM$ ,  $PC_{70}BM$ .

Образцы облучались видимым светом галогеновой лампы и импульсами лазера с длиной волны 532 нм. С использованием двухимпульсной последовательности СВЧ, были получены эходетектированные (ЭД) спектры ЭПР композитов РЗНТ:PCBM в диапазоне температур от 7К до 80К. ЭД ЭПР спектры, записанные сразу после облучения импульсом лазера, содержат участки эмиссии и абсорбции. Это может быть объяснено тем, что после фотовозбуждения сначала заселяются состояния с проекцией спина равной нулю, что приводит к неравновесной населенности спиновых подуровней. Были измерены времена продольной и поперечной релаксации, а также оценены времена исчезновения связанных поляронов в  $РЗНТ^+ : PC_{60}BM$ ,  $РЗНТ^+ : PC_{70}BM$ .

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук М. Н. Уваров.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЕВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЯДЕРНОЙ СПИНОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ МЕТОДОМ ЯМР

А. Н. Правдивцев

Международный томографический центр СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Цель работы – экспериментальное и теоретическое исследование динамики и релаксации неравновесной ядерной спиновой поляризации, в том числе, гиперполяризации во внешнем магнитном поле. В настоящей работе мы исследовали полевые зависимости времен жизни долгоживущих синглетных спиновых состояний в многоспиновых системах, а также влияние антипересечений уровней на данные спиновые состояния. Суть экспериментальной методики заключается в комбинировании ЯМР высокого разрешения с методом быстрого переключения магнитного поля, который позволяет создавать химическую поляризацию ядер (ХПЯ) в произвольных магнитных полях.

Исследования долгоживущих спиновых состояний, гиперполяризованных за счет ХПЯ, были проведены для аминокислот тирозина (Tyr), гистидина (His), их изотопомеров: Tyr-3,5-d<sub>2</sub>, Tyr-2,6,α-d<sub>3</sub>, Tyr-2,3,5,6,α-d<sub>5</sub>, His-2,α-d<sub>2</sub>, His-2,4,α-d<sub>3</sub>; и дипептидов: Н-Tyr-Tyr-ОН, Н-Tryptophyl-Tyr-ОН. Были экспериментально и теоретически исследованы полевые зависимости времени жизни долгоживущего спинового состояния двух β-СН<sub>2</sub> протонов в магнитных полях в диапазоне от 0.1 мТл до ~7 Тл. Было показано, что время релаксации синглетного состояния β-СН<sub>2</sub> протонов в полях, где выполняется условие сильной связи, возрастает при увеличении количества дейтероатомов в соединении и достигает ~26 с и ~55 с для Tyr-2,3,5,6,α-d<sub>5</sub> и His-2,4,α-d<sub>3</sub> соответственно. Эти времена жизни синглетного состояния β-СН<sub>2</sub> протонов в 45 раз превосходят их времена T<sub>1</sub>-релаксации.

В работе была разработана теория спиновой релаксации, вызванной диполь-дипольным взаимодействием в скалярно связанных спиновых системах, с помощью которой были промоделированы полученные экспериментальные данные для полевых зависимостей времен жизни долгоживущих спиновых состояний. Теоретически был исследован механизм кросс-релаксации в гиперполяризованных спиновых системах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-03-31042).

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ НА СИНХРОТРОННОМ ИЗЛУЧЕНИИ**

А. Г. Селютин, Д. В. Красников

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

Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) обладают рядом специфических физико-химических, механических, электрических и других свойств. Уникальные свойства МУНТ обуславливают их привлекательность для использования в различных областях науки и технологии. Наиболее распространенными способами получения МУНТ являются электродуговой синтез, лазерная абляция и метод каталитического пиролиза углеводородов (CVD).

МУНТ, получаемые различными способами, обладают соответствующими характерными особенностями, но во всех случаях имеются широкие распределения по параметрам трубок, таким как толщина, количество стенок и др. Поэтому для конечного продукта требуется проведение определенной селекции. Метод CVD синтеза является наиболее часто используемым, поскольку характеризуется наименьшими энергозатратами и высоким выходом МУНТ. Изучение поведения катализаторов при CVD синтезе, в особенности на самом начальном этапе синтеза МУНТ, является критичным для понимания процессов зарождения и роста нанотрубок.

В данной работе с использованием комплекса физико-химических методов, таких как рентгенодифракционный фазовый анализ и построение функций радиального распределения атомов по данным дифракции синхротронного излучения, сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия были исследованы процессы нуклеации МУНТ на железо-кобальтовом катализаторе.

Варьированием условий синтеза, таких как размер частиц катализатора, температура проведения реакции, парциальное давление этилена и время контакта с образцом, выявлены характерные особенности нуклеации и роста МУНТ.

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

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНО-СПИНОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ХИРАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Д. В. Сосновский

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Исследование хиральных систем представляет большой интерес. Причина этого заключена в том, что более половины всех лекарств являются хиральными соединениями, но чаще всего лечебным действием обладает только один изомер.

В лаборатории магнитных явлений ИХКиГ СО РАН проводятся исследования элементарных фотоиндуцированных превращений хиральных диад (напроксен-метилпирролидин) в растворах с помощью методик химической поляризации ядер (ХПЯ). Целью этих исследований является установление природы влияния хиральных центров на фотопревращения диады.

В настоящее время зарегистрированы зависимости эффекта ХПЯ протонов N-метил пирролидина диады от полярности растворителя. Обнаружено, что на протонах диады ХПЯ проявляется уже в средах с малой полярностью, ниже  $\epsilon=10$ , что не характерно для разделенных ион-радикальных пар. Анализ этих зависимостей позволил сделать предварительное заключение, что ион-бирадикал диады находится в равновесии с эксиплексом. Интересно, что в литературе имеется предположение о том, что именно в эксиплексе имеет место максимальное воздействие хиральных центров на фотопроцессы.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию хиральных систем на примере диады. Целью работы было всестороннее изучение фотореакций, в частности, нахождение вероятности реакции образования продукта из различных спиновых состояний и эксиплекса диады, получение аналитического выражения для величин эффекта ХПЯ в различных приближениях и вариантах модификации предполагаемой реакционной схемы превращений.

Исследование проводилось с использованием метода, основанного на введении матриц плотности для спиновых состояний диады и эксиплекса и написанием основного уравнения спиновой химии.

В работе показано, что важную роль в формировании поляризации ядер играет диэлектрическая проницаемость среды и характер относительного движения радикальных центров в диаде.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ КАТИОН-РАДИКАЛОВ РЯДА ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИЭФИРОВ МЕТОДОМ ВРЕМЯРАЗРЕШЕННОГО МАГНИТНОГО ЭФФЕКТА

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] является специфически чувствительным к ион-радикалам и позволяет получить информацию о величинах сверхтонких констант для короткоживущих частиц с малой концентрацией, недоступную для ЭПР-эксперимента.

С применением этого метода было проведено исследование носителей положительного заряда в облученных диметилловых эфирах п-этиленгликолей, начиная с 1,2-диметоксизтана (моноглим), заканчивая 2,5,8,11,14-пентаоксапентадеканом (тетраглим). Была зарегистрирована рекомбинационная флуоресценция растворов *пара*-терфенила ( $3 \cdot 10^{-4}$  моль/л) в указанных эфирах. Кривые магнитного эффекта – отношение кинетики флуоресценции в сильном магнитном поле к кинетике в нулевом поле – практически совпадают для всех исследованных членов ряда и могут быть описаны в модели сверхтонкого взаимодействия электрона с двумя эквивалентными протонами.

Для объяснения наблюдаемого магнитного эффекта был предложен механизм внутримолекулярного обмена с переносом протона с метильной группы на один из атомов кислорода. Квантово-механические расчёты (DFT B3LYP, M06-2X) были использованы для нахождения структур, соответствующих стационарным точкам на поверхности потенциальной энергии. Результаты расчетов показывают, что оставшиеся два протона на метильной группе эквивалентны и имеют константы СТВ по 15 Гс.

Кроме того, в эксперименте были получены указания на внутримолекулярный характер реакции. В разбавленном растворе эфиров из исследуемого ряда ( $3 \cdot 10^{-2}$  моль/л) в алканах с вязкостью 1-30 сПз наблюдается та же картина биений в магнитном эффекте, что и при отсутствии разбавления.

---

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

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

## АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Азаров И. А.....	18	Кантай Н. ....	42
Алиева Р. Р.....	80	Каражанова Г. Е. ....	30
Байбакина А. У.....	5	Касатов Д. А. ....	14
Байджанов А. Р.....	43	Кемельбекова Г. М.....	30
Бацанов С. А. ....	19	Комаровских А. Ю.....	74
Белкин М. С. ....	20	Конохова А. И. ....	13
Берёзин А. С. ....	21	Копылов А. С. ....	31
Бойко А. А. ....	10	Короткова Е. В. ....	22
Брагин С. С. ....	64	Кофтерова И. В. ....	32
Будкина Д. С.....	65	Коэмец Е. Г.....	33
Вдовина Г. А.....	26, 63	Красников Д. В.....	83
Волочаев М. Н. ....	22	Кречетова Н. Н.....	34
Высотин М. А. ....	23	Кубрак К. В.....	35, 58
Гирник И. С. ....	66	Кузнецов А. С.....	14
Глущенко О. Ю. ....	6	Куркина И. И.....	36
Гончикжапов М. Б.....	67	Лукина Е. А. ....	75
Городецкий А. А. ....	7	Макаров А. Н.....	14
Гренев И. В. ....	24	Максимовская В. В. ....	52
Гутаковский А. К. ....	19, 59	Малоземов А. В.....	37, 55
Дарьин Ф. А. ....	52	Матхонова Э. Ю.....	38
Дворецкая Л. Н. ....	8	Машканцев Д. Е. ....	76
Демчук С. В. ....	9	Мешкова Е. М. ....	39
Джес А. В. ....	25	Мик И. А. ....	40
Дмитриев А. А. ....	68	Морозов Р. А. ....	14
Дмитриев А. М. ....	69	Мунзарова А. Ф.....	15
Дорохова Н. В.....	26, 63	Нагирный Н. В. ....	41, 77
Дроздюк И. Ю. ....	70	Найманкумарулы Е.....	42
Дружбин Д. А. ....	27	Накипеева А. А. ....	5
Духовникова Н. Ю. ....	10	Насибулов Е. А.....	78
Егоров В. А. ....	71	Настулявичус А. А.....	43, 44
Жанабергенов Т. Б. ....	5	Неелова Ж. В. ....	44
Жиров Е. В. ....	28	Никулина О. С.....	45
Зайцева А. И. ....	29	Паничкин Ю. В. ....	50
Замчий А. О. ....	60	Панченко А. В. ....	46
Зеленцов Е. Л.....	15	Папаева Е. О. ....	16
Зеленцова Е. А.....	72	Парунин П. Д.....	79
Зиборова О. С.....	26, 63	Петрова А. С.....	80
Ибрагимова А. С. ....	30	Петровский Е. Д. ....	17
Иванов С. Д.....	11	Полушкин А. В.....	47
Иванов М. Ю. ....	73	Попов А. Г. ....	81
Иванова К. А.....	12	Правдивцев А. Н. ....	82

Рахимгереева Н. Р. ....	5	Усмонов Ш. Н. ....	56
Русских П. Н. ....	48	Федотенко Т. М. ....	57
Рябов М. Н. ....	49	Фридрих П. А. ....	35, 58
Сажина Т. В. ....	15	Хандархаева С. Е. ....	59
Самарханов К. К. ....	50	Холопов М. А. ....	52
Селютин А. Г. ....	83	Хомяков М. Н. ....	41, 77
Смирнова Н. А. ....	51	Центалович Ю. П. ....	72
Снытникова О. А. ....	72	Чепкасов С. Ю. ....	41, 77
Сороколетов Д. С. ....	52	Ческовская И. В. ....	60
Сосновский Д. В. ....	84	Чопорова Ю. Ю. ....	18
Талецкий К. С. ....	85	Шерин П. С. ....	72
Терёшкин И. О. ....	53	Шмаков А. А. ....	61
Тотосов И. В. ....	54	Щудло И. М. ....	14
Уколов А. В. ....	37, 55	Юсуф А. А. ....	62
Уразалиева Д. Н. ....	30	Янович О. В. ....	26, 63

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА .....</b>	<b>5</b>
А. У. Байбакина, Н. Р. Рахимгереева, А. А. Накипекова, Т. Б. Жанабергенов.....	5
О. Ю. Глушенко .....	6
А. А. Городецкий .....	7
Л. Н. Дворецкая .....	8
С. В. Демчук .....	9
Н. Ю. Духовникова, А.А. Бойко .....	10
С. Д. Иванов.....	11
К. А. Иванова.....	12
А. И. Конохова .....	13
Р. А. Морозов, А. С. Кузнецов, И. М. Щудло, А. Н. Макаров, Д. А. Касатов .....	14
А. Ф. Мунзарова, Т. В. Сажина, Е. Л. Зеленцов .....	15
Е. О. Папаева .....	16
Е. Д. Петровский .....	17
<b>ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ .....</b>	<b>18</b>
И. А. Азаров, Ю. Ю. Чопорова .....	18
С. А. Бацанов, А. К. Гутаковский .....	19
М. С. Белкин .....	20
А. С. Берёзин .....	21
М. Н. Волочаев, Е. В. Короткова .....	22
М. А. Высотин .....	23
И. В. Гренев .....	24
А. В. Джес .....	25
Н. В. Дорохова, Г. А. Вдовина, О. С. Зиборова, О. В. Янович.....	26
Д. А. Дружбин .....	27
Е. В. Жиров.....	28
А. И. Зайцева .....	29
Г. Е. Каражанова, А. С. Ибрагимова, Г. М. Кемельбекова, Д. Н. Уразалиева.....	30
А. С. Копылов.....	31
И. В. Кофтерова.....	32
Е. Г. Коэмец .....	33
Н. Н. Кречетова .....	34
К. В. Кубрак, П. А. Фридрих.....	35
И. И. Куркина .....	36
А. В. Малоземов, А. В. Уколов.....	37

Э. Ю. Матхонова .....	38
Е. М. Мешкова.....	39
И. А. Мик .....	40
Н. В. Нагирный, М. Н. Хомяков, С. Ю. Чепкасов .....	41
Е. Найманкумарулы, Н. Кантай .....	42
А. А. Настулявичус, А. Р. Байджанов .....	43
А. А. Настулявичус, Ж. В. Неелова .....	44
О. С. Никулина .....	45
А. В. Панченко .....	46
А. В. Полушкин .....	47
П. Н. Русских .....	48
М. Н. Рябов .....	49
К. К. Самарханов, Ю. В. Паничкин .....	50
Н. А. Смирнова.....	51
Д. С. Сороколетов, В. В. Максимовская, М. А. Холопов, Ф. А. Дарьин.....	52
И. О. Терёшкин.....	53
И. В. Тотосов .....	54
А. В. Уколов, А. В. Малоземов .....	55
Ш. Н. Усмонов.....	56
Т. М. Федотенко .....	57
П. А. Фридрих, К. В. Кубрак.....	58
С. Е. Хандархаева, А. К. Гутаковский.....	59
И. В. Ческовская, А. О. Замчий.....	60
А. А. Шмаков.....	61
А. А. Юсуф .....	62
О. В. Янович, О. С. Зиборова, Г. А. Вдовина, Н. В. Дорохова.....	63
<b>ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....</b>	<b>64</b>
С. С. Брагин .....	64
Д. С. Будкина .....	65
И. С. Гирник .....	66
М. Б. Гончикжапов.....	67
А. А. Дмитриев .....	68
А. М. Дмитриев .....	69
И. Ю. Дроздюк .....	70
В. А. Егоров .....	71
Е. А. Зеленцова, П. С. Шерин, О. А. Снытникова, Ю. П. Центалович.....	72
М. Ю. Иванов .....	73
А. Ю. Комаровских .....	74
Е. А. Лукина.....	75
Д. Е. Машканцев .....	76
Н. В.Нагирный, М. Н.Хомяков, С. Ю.Чепкасов .....	77
Е. А. Насибулов .....	78

П. Д. Парунин.....	79
А. С. Петрова, Р. Р. Алиева .....	80
А. Г. Попов .....	81
А. Н. Правдивцев .....	82
А. Г. Селютин, Д. В. Красников .....	83
Д. В. Сосновский.....	84
К. С. Талецкий.....	85
<b>АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ .....</b>	<b>86</b>
<b>ОГЛАВЛЕНИЕ.....</b>	<b>88</b>

МАТЕРИАЛЫ  
51-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ  
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

«Студент и научно-технический прогресс»

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

*Материалы конференции публикуются в авторской редакции*

---

Подписано в печать 27.03.2013 г.

Офсетная печать

Заказ № \_\_\_\_\_

Формат 60x84/16

Уч.-изд. л. 4,4. Усл. печ. л. 5,75.

Тираж 110 экз.

---

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