

**НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
ПРАВИТЕЛЬСТВО НОВОСИБИРСКОЙ ОБЛАСТИ**

**МАТЕРИАЛЫ
52-й МЕЖДУНАРОДНОЙ
НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

МНСК–2014

11–18 апреля 2014 г.

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

**Новосибирск
2014**

УДК 53
ББК 22.3

*Конференция проводится при поддержке
Сибирского отделения Российской Академии наук,
Российского фонда фундаментальных исследований,
Правительства Новосибирской области,
инновационных компаний России и мира,
Фонда «Эндаумент НГУ».*

Материалы 52-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2014: Физические методы в естественных науках / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2014. 93 с.
ISBN 978-5-4437-0252-0

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

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:

д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер,
д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан, канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев,
канд. физ.-мат. наук Д. А. Князьков,
канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева,

А. С. Андреев, А. П. Пыряева, д-р физ.-мат. наук, доцент Н. В. Суровцев.

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, д-р биол. наук, проф. Л. В. Омелянчук,
канд. физ.-мат. наук А. В. Чернышев, канд. физ.-мат. наук В. В. Яньшолё,
канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин.

**УДК 53
ББК 22.3**

ISBN 978-5-4437-0252-0

© Новосибирский государственный университет, 2014

**NOVOSIBIRSK NATIONAL RESEARCH STATE UNIVERSITY
SIBERIAN BRANCH OF RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
GOVERNMENT OF THE NOVOSIBIRSK REGION**

**PROCEEDINGS
OF THE 52nd INTERNATIONAL STUDENTS
SCIENTIFIC CONFERENCE**

ISSC-2014

April, 11–18, 2014

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

**Novosibirsk, Russian Federation
2014**

*The conference is held with the significant support of
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,
Russian Foundation for Basic Research,
Novosibirsk Region Government.*

Proceedings of the 52nd International Students Scientific Conference. Physical methods in natural sciences / Novosibirsk State University. Novosibirsk, Russian Federation. 2014. 93 pp.

ISBN 978-5-4437-0252-0

Section scientific supervisor – Dr. Phys. Math., Prof. S. A. Dzuba

Section head – Dr. Phys. Math., Prof. S. V. Tsybulya

Responsible secretary – V. V. Nikulin

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

Dr. Phys. Math. S. A. Gromilov,
Cand. Chem. V. A. Drebuschak, Cand. Phys. Math. V. V. Kaichev,
Cand. Phys. Math. D. F. Khabibulin, Dr. Phys. Math., Prof. L. A. Boyarsky,
Dr. Phys. Math., Prof. S. V. Tsybulya, Cand. Phys. Math. S. N. Trukhan,
Cand. Phys. Math. A. N. Shmakov, V. V. Nikulin

Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:

Dr. Chem., Prof. A. V. Baklanov, Cand. Phys. Math. S. L. Weber,
Dr. Chem., Prof. N. P. Gritsan, Cand. Phys. Math. V. G. Kiselev,
Cand. Phys. Math. D. A. Knyazkov, Cand. Phys. Math. O. A. Krumkacheva,
A. S. Andreev, Dr. Phys. Math., Assoc. Prof. N. V. Surovtsev, A.P. Pyryaeva

Section scientific committee «Biomedical Physics»:

Cand. Phys. Math. A. V. Chernyshev, Cand. Phys. Math. Yu. I. Glazachev,
Dr. Biol., Prof. A. D. Gruzdev, Cand. Biol., Assoc. Prof. V. A. Gusev,
Dr. Biol., Prof. L. V. Omelyanchuk, Cand. Phys. Math. A. A. Lomzov,
Dr. Phys. Math., Prof. V. P. Maltsev, Cand. Phys. Math. D. I. Strokov,
Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole,
Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin

ISBN 978-5-4437-0252-0

© Novosibirsk State University, 2014

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 544.022

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4 - Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$

Н. А. Авдеев

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

Новосибирский государственный университет

В данной работе с помощью рентгенофазового анализа проводилось исследование твердых растворов системы $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4 - Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$. В настоящее время синтезированы многочисленные двойные молибдаты, среди которых $AR(MoO_4)_2$ ($A = Li - Cs$, $R = Ln$, Y , Bi), которые имеют большое значение как люминофоры, сегнетоэлектрики и другие, технически важные материалы. Другие, не менее важные двойные молибдаты щелочных и двухвалентных металлов, такие как $A_2Pb(MoO_4)_2$ ($A = K$, Rb , Cs) и $A_4Zn(MoO_4)_3$ ($A = K$, Rb), обладают свойствами сегнетоэластиков.

Целью данной работы является рентгенографическое исследование системы $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4 - Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$, посредством получения зависимости параметров элементарной ячейки (ПЭЯ) от молярного соотношения долей компонент. Снимались дифрактограммы твердых растворов $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4$ и $Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$ в различных соотношениях с шагом 10 мол. %. Рентгенофазовый анализ поликристаллов проводился на дифрактометре Shimadzu XRD-7000. В качестве внешнего эталона использовался Si. Образцы получены к.х.н. Золотовой Е.С. (лаборатория синтеза и роста монокристаллов и соединений редкоземельных элементов Института неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН.).

Соединения $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4$ и $Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$ изоструктурны, пространственная группа (I-43d), поэтому они могут образовывать твердые растворы во всем диапазоне составов. Установлено, что все образцы диапазона являются однофазными, что подтверждает это предположение. В данном случае образуются твердые растворы замещения. По правилу Вегарда, при постоянной температуре между параметрами кристаллической решетки (ПЭЯ) твердого раствора и его составом существует линейная зависимость. В результате работы мы установили непрерывность ряда твердых растворов между $Cs_3LiZn_2(MoO_4)_4$ и $Cs_6Zn_5(MoO_4)_2$ и нашли линейную зависимость изменения его ПЭЯ в соответствии с правилом Вегарда.

Научные руководители – канд. хим. наук И. В. Корольков,
д-р хим. наук С. Ф. Солодовников

ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЕ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ $(Si_2)_{1-x}(ZnSe)_x$

К. А. Амонов

Физико-Технический институт НПО “Физика-Солнце“ АН РУз,
г. Ташкент

В данной работе приведены результаты рентгеноструктурного исследования эпитаксиальных слоев твердого раствора $(Si_2)_{0,99}(ZnSe)_{0,01}$. Эпитаксиальные слои выращивались на Si подложках с кристаллографической ориентацией (111) методом жидкофазные эпитаксии. Структурные исследования пленки были выполнены при 300 К на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М (CuK α -излучения, $\lambda=0,15418$ нм) по схеме $\omega-2\theta$ с монохроматором из совершенного кристалла Si (отражение (111), FWHM=6,2"). На рис. 1 представлена рентгенограмма эпитаксиальных слоев твердого раствора $(Si_2)_{1-x}(ZnSe)_x$ ($0 < x < 0,01$). Видно, что в дифракционной картине

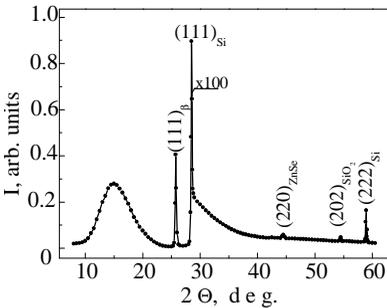


Рис. 1. Рентгенограммы твердого раствора $(Si_2)_{0,99}(ZnSe)_{0,01}$

пленки присутствуют несколько селективных структурных рефлексов с различной по величине интенсивностью (рис.1). Анализ показал, что поверхность подложки соответствует кристаллографической плоскости (111). Размер субкристаллитов (блоков) пленки, оцененный по ширине данного пика, составляет около ~ 52 нм. В пленке примесная фаза SiO₂ с ориентацией кристаллитов (202). В рентгенограмме еще присутствует другой селективный рефлекс (220) от фазы ZnSe с $d/n = 0.2002$ нм.

По рефлексу (220) был определен параметр решетки фазы ZnSe он составила $a_{ZnSe} = 0,5692$ нм, что несколько больше, чем табличный (0,5661 нм). Размер субкристаллитов оцененный по ширине пика, составляет 32 нм. Молекулы ZnSe частично заменяют молекулы Si в дефектоспособных областях матричной решетки – на границах и приграничных областях фаз и раздела с последующим сегрегацией ионов кремния с образованием нанокристаллов в этих местах. Следовательно, полученная пленка имеет формулу $(Si)_{1-x}(ZnSe)_x$.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. А. С. Саидов,
канд. физ.-мат. наук Ш. Н. Усмонов

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ТВЕРДОГО РАСТВОРА ЗАМЕЩЕНИЯ $(\text{Si}_2)_{1-x}(\text{GaN})_x$

З. К. Аллаярова

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

Методом жидкофазной эпитаксии из оловянного раствора-расплава были выращены твердые растворы замещения $(\text{Si}_2)_{1-x}(\text{GaN})_x$ электронного типа проводимости на монокристаллических рSi подложках.

Снимался спектр фотолюминесценции (ФЛ) выращенного эпитаксиального слоя твердого раствора показан на рисунке. Возбуждение ФЛ производилось лазерным излучением со стороны эпитаксиального слоя при температуре жидкого азота (77 К). Спектр

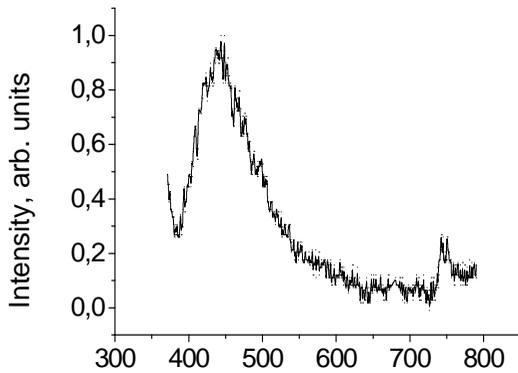


Рис. 1. Спектр фотолюминесценции эпитаксиального слоя твердого раствора $(\text{Si}_2)_{1-x}(\text{GaN})_x$ при температуре 77 К.

ФЛ твердого раствора имеет широкую полосу, охватывающую видимый диапазон спектра излучения от 400 до 650 нм с максимумом излучения

при $\lambda_{max} = 438$ нм, что соответствует энергии фотонов $E_{ph} = 2.83$ эВ. Этот пик максимума обусловлен твердым раствором замещения $(\text{Si}_2)_{1-x}(\text{GaN})_x$, запрещенная зона (E_g) которого меньше, чем E_g галлия нитрида – $E_{g,\text{GaN}} = 3.43$ эВ и больше, чем E_g кремния – $E_{g,\text{Si}} = 1.12$ эВ. На спектре ФЛ в длинноволновой области выделяется небольшой пик излучения при энергиях фотонов $\text{Si}_2 = 1.66$ эВ. Присутствие такого пика на фоне широкого спектра излучения, по-видимому, свидетельствует о возникновении размытой полосы энергетических уровней примесей (Si_2), расположенной в запрещенной зоне твердого раствора $(\text{Si}_2)_{1-x}(\text{GaN})_x$.

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

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СОПОЛИМЕРОВ ПОЛИЭТИЛЕНА С 1-ГЕКСЕНОМ

К. И. Баскакова

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН

Новосибирский государственный университет

Сополимеры полиэтилена с α -олефинами (СЭО) характеризуются улучшенными технологическими и физико-механическими свойствами (особенно стойкостью к ударным нагрузкам и устойчивостью к разрастанию трещин) по сравнению с линейным полиэтиленом благодаря присутствию в структуре макромолекул короткоцепных разветвлений (КЦР). Длина, концентрация и гомогенность распределения КЦР оказывают влияние на формирование аморфно-кристаллической структуры полиэтилена и его макроскопические свойства. Важной фундаментальной задачей является поиск взаимосвязи между составом используемого при синтезе катализатора и гомогенностью распределения КЦР в структуре макромолекул и свойствами СЭО.

Сополимеры полиэтилена с 1-гексеном были синтезированы М. А. Мацько, М. П. Ваниной, Л. Г. Ечевской и В. А. Захаровым в Институте катализа СО РАН им. Г. К. Борескова. Сополимеры с гомогенным распределением КЦР получены на катализаторах $VCl_4/MgCl_2$ и $Me_2Si(Ind)_2ZrCl_2/SiO_2$, с гетерогенным распределением КЦР — на катализаторе $TiCl_4/MgCl_2$.

Исследования структуры и свойств СЭО проводились с применением термических методов анализа: дифференциальной сканирующей калориметрии, термогравиметрии и динамического механического анализа.

Получены корреляции между числом, однородностью распределения КЦР в СЭО и их степенью кристалличности, температурой плавления кристаллической фазы, температурой начала окисления, температурами релаксационных переходов, значениями модуля упругости, тангенса угла механических потерь ($tg\delta$) и энергией активации α -релаксационного перехода. Установлено, что при одинаковом числе КЦР наилучшим комплексом физико-механических свойств обладают СЭО с гомогенным распределением КЦР, полученные на катализаторе $VCl_4/MgCl_2$.

Научный руководитель – канд. хим. наук И. К. Шундрин

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДЫ НЕРЕЗОНАНСНОГО И ФМР ПОГЛОЩЕНИЙ В КОМПЛЕКСНОМ СОЕДИНЕНИИ БРОМИДА МЕДИ(II) С 3-АМИНО-4-ЭТОКСИКАРБОНИЛПИРАЗОЛОМ.

А. С. Берёзин

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

Новосибирский государственный университет

В последнее время большое внимание уделяется изучению соединений с магнитно-активной структурой. Синтез и исследование такого класса соединений представляет как фундаментальный, так и практический интерес в электронике, медицине и т.д.

В работе представлены результаты исследования причин появления нерезонансного и ферромагнитного поглощений для комплексного соединения меди CuL_2Br_2 , где L – 3-амино-4-этоксикарбонилпиразол.

Спектр ЭПР поликристаллического образца представляет собой одиночную линию с g-фактором $g=2,155$ и полушириной линии $\Delta H=830\text{Гс}$. При понижении температуры образца до $T=77\text{К}$ происходит обратимое изменение цвета и уменьшение полуширины линии до $\Delta H=720\text{Гс}$. При многократной термической тренировке образца ($300\leftrightarrow 77\text{К}$) в спектре ЭПР появляются и увеличиваются по интенсивности сигналы НП и ФМР, а интенсивность парамагнитной линии уменьшается. В РФА спектре тренированного образца отсутствует часть пиков, что указывает на его структурные изменения. Однако диспергирование образца приводит к восстановлению исходной структуры. Термическая тренировка исходного образца в вакууме не приводит к появлению сигналов НП и ФМР.

В спектре КР после тренировки образца исчезают линии колебаний от пиразольных групп, что связывается с изменением структуры: фиксацией пиразольных групп бромид-ионами соседней цепочки.

В спектрах ЭПР ($-6 \leftrightarrow +6 \text{ кГс}$) тренированного образца наблюдается гистерезис, указывая на наличие магнитной доменной структуры. Интенсивность НП растет при повышении температуры ($130\rightarrow 420\text{К}$) и не подчиняется закону Кюри – Вейсса. Особо следует отметить, что тренированный образец притягиваться магнитом, т.е. часть вещества приобретает явно выраженные ферромагнитные свойства.

Таким образом, было обнаружено, что при термической тренировке координационного соединения CuL_2Br_2 происходит частичная самоорганизация в новую структуру, которая проявляет ферромагнитные свойства и свойство нерезонансного поглощения СВЧ излучения.

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

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ Ge И ZnSe В ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ $(\text{GaAs})_{1-x-y}(\text{Ge}_2)_x(\text{ZnSe})_y$

А. Й. Бобоев, Р. Н. Хамраева, В. М. Рустамова

Институт ядерной физики Академии Наук Республики Узбекистан, г. Ташкент
Андижанской государственной университет им. З. М. Бабура, г. Андижан

В настоящей работе приводятся результаты структурных исследований эпитаксиальной пленки $(\text{GaAs})_{1-x-y}(\text{Ge}_2)_x(\text{ZnSe})_y$ полученным методом жидкофазной эпитаксии на подложке GaAs. Структурные исследования были выполнены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М с излучением $\lambda_{\text{CuK}\alpha} = 0,154178$ nm в ИЯФ АН РУз. На рентгенограмме подложки присутствовали лишь узкие структурные рефлексы типа $\{H00\}$, которые свидетельствовали о совершенстве ее кристаллической решетки. На дифракционном спектре пленки над уровнем фона выделяются ряд селективных рефлексов с различной интенсивностью (рис.1). Анализ спектра показал, что выращенная пленка является кубическая, монокристаллическая с ориентацией (100). Параметр решетки пленки, определенное по рефлексам $\{H00\}$ с помощью экстраполяционной функции Нельсона–Рейли составлял $a = 0,56568$ nm. Размер субкристаллитов пленки, оцененный по пику (400), составлял около 52 nm. Микроскажение решетки и несколько большее значение интенсивности пиков $\{H00\}$, чем интенсивности этих же линий подложки, свидетельствовали о частичном замещении

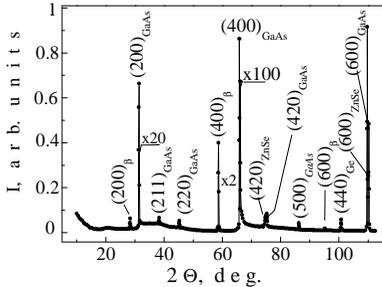


Рис. 1. Рентгенограмма эпитаксиальной пленки– $(\text{GaAs})_{1-x-y}(\text{Ge}_2)_x(\text{ZnSe})_y$.

молекул арсенида галлия на молекулы селенида цинка и германия в узлах пленки с высоким потенциалом. Максимум (440) с $d/n = 0.1001$ nm соответствовал кристаллической решетке нанокристаллитов Ge с размером ~ 44 nm. Параметр решетки нанокристаллитов Ge составил $a_{\text{Ge}} = 0,56625$ nm, а селенида цинка $a_{\text{ZnSe}} = 0,56697$ nm. Оценка размера нанокристаллитов ZnSe составлял около 59 nm.

Таким образом, выращенная пленка $(\text{Ge}_2)_{1-x-y}(\text{GaAs})_x(\text{ZnSe})_y$ имеют кубическую сфалеритную структуру, молекулы ZnSe и Ge частично заменяют молекулы GaAs в дефектоспособных областях матричной решетки, на границах и приграничных областях раздела с последующей сегрегацией ионов германия и молекул селенида цинка с образованием их нанокристаллитов в этих местах.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. С. З. Зайнабидинов

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВА $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$ МЕТОДАМИ ЛОРЕНЦЕВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

М. Н. Волочаев

Сибирский государственный аэрокосмический университет
им. ак. М. Ф. Решетнева, г. Красноярск

$\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$ – антиферромагнитный сплав, представляющий определенный научный интерес в связи с его уникальными механическими, электрическими и магнитными свойствами. В частности это появление локальной намагниченности материала при пластической деформации.

В работе исследуются тонкие пленки сплава $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$, в которых появляется намагниченность при их криомеханической обработке. Исследование магнитной структуры проводили методами Лоренцевой электронной микроскопии на просвечивающем электронном микроскопе. Для наблюдения магнитного контраста используется режим выключенной объективной линзы микроскопа [1]. На рис. 1, а приведен пример Лоренцева магнитного контраста, полученного от пленки SmCo_5 . На рис. 1,б в том же режиме получен магнитный контраст от пленки $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$, обработанной жидким азотом. Наблюдаются отдельные магнитные домены в виде островков темного цвета, окруженные светлым кольцом. С таких пленок получены линейчатые спектры оптического поглощения в ИК диапазоне.

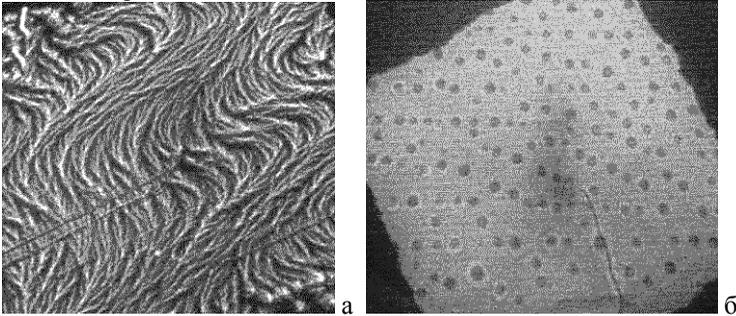


Рис. 1. Магнитный контраст от пленки SmCo_5 (а) и $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$ (б).

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, проф. Л. И. Квеглис

МОРФОЛОГИЯ И ЗАРЯДОВОЕ СОСТОЯНИЕ РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

А. А. Горковенко

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

В современной технологии большинства приборов важную роль играет состояние поверхности. Морфология поверхности, дефекты и их зарядовое состояние во многом определяют предельные параметры многих приборов и, в частности, фотокатодов на основе полупроводникового соединения арсенида галлия. Целью данной работы является изучение морфологии и зарядового состояния поверхностей GaAs(001) методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) [1].

В работе исследовались поверхности полупроводника GaAs(001), приготовленные различными методами химической обработки поверхности и прогрева в вакууме. Для исследования распределения поверхностного потенциала (контактной разности потенциалов) использовался метод Кельвина в сканирующей зондовой микроскопии (КСЗМ). Данная методика позволяет получить информацию о потенциале поверхности, а, следовательно, о локальном зарядовом состоянии изучаемых поверхностей.

Методом АСМ изучены особенности морфологии поверхности GaAs(001) фотокатодов. Показано, что в зависимости от условий химической обработки среднеквадратичная шероховатость поверхности фотокатодов изменялась в пределах 0.2-2.2 нм. Определены температурные условия прогрева фотокатодов, при которых АСМ выявляет линейные дислокации, являющиеся причиной темнового тока. Высоты дислокационных ступеней составили от 0.1 нм до 0.4 нм. Измерение контактной разности потенциалов методом Кельвина выявило наличие заряженных дислокационных ступеней. Образование заряда на ступенях связано с наличием обрыванных связей у атомов, встроенных в ступень. Полученные методом АСМ данные о морфологии поверхности и распределении поверхностного потенциала позволяют оптимизировать технологию изготовления фотокатодов на основе GaAs(001).

1. G. Binnig, C. F. Quate and Ch. Gerber. Atomic force microscope.// Phys. Rev. Lett. 1986, 56 (9), с. 930 – 933.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук О. Е. Терещенко,
А. С. Кожухов

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ПАРАЦЕТАМОЛА, АЦЕТОТОЛУИДИНА И МЕТАЦЕТИНА

Д. А. Дружбин

Новосибирский государственный университет

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, г. Новосибирск

Парацетамол (*p*-гидроксиацетанилид), ацетотолуидин (*p*-метилацетанилид) и метацетин (*p*-метоксиацетанилид) содержат ацетамидную группу, которая входит в состав молекулярных фрагментов, играющих важную роль в большинстве белков и лекарственных препаратов. Все эти соединения являются производными ацетанилида, обладающего болеутоляющими и противовоспалительными свойствами. Благодаря наличию амидной связи, анализ распределения их электронной плотности имеет большое значение как для фармацевтики, так и для понимания процессов связывания в молекулярной биологии. С другой стороны, этот ряд соединений имеет метильную группу, степень разупорядочения которой пока остается неразрешенной.

В данной работе мы постарались осветить эти вопросы с помощью методов прецизионной рентгеновской дифракции при 100 К с последующим топологическим анализом электронной плотности. Все уточнения электронной плотности были основаны на мультипольной модели Хансена и Коппенса. Были проанализированы топологические характеристики внутри- и межмолекулярных взаимодействий. Топологические характеристики критической точки, соответствующей связи $\text{NH}\cdots\text{O}$, для парацетамола, ацетотолуидина и метацетина представлены в таблице ниже.

	$\rho, e\text{\AA}^{-3}$	$\Delta\rho, e\text{\AA}^{-5}$	$R(\text{O}\cdots\text{H}), \text{\AA}$	Порядок связи	Энергия (а.е.)
<i>парацетамол</i>	0.133	2.20	1.97	0.046	0.0035
<i>ацетотолуидин</i>	0.185	1.85	1.89	0.083	-0.0007
<i>метацетин</i>	0.195	2.58	1.84	0.063	0.0011

В отличие от $\text{NH}\cdots\text{O}$ связей, схожих между собой для всех изучаемых соединений, межмолекулярные взаимодействия между атомом кислорода, с двойной связью, и водородом метильной группы соседней молекулы заметно различаются. В ацетотолуидине и метацетине между этими атомами были обнаружены критические точки (3, -1) со схожими топологическими характеристиками. Для парацетамола, обладающего разупорядочением метильной группы, подобной точки не было обнаружено. Это можно соотнести с возможным отсутствием разупорядочения метильной группы у ацетотолуидина и метацетина.

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

IN SITU ИССЛЕДОВАНИЯ АВТОКОЛЕБАНИЙ В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНА НА НИКЕЛЕ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

С. П. Иванова

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

Автоколебания – периодическое, самопроизвольное изменение скорости каталитической реакции, не связанное с изменением внешних условий проведения реакции. В гетерогенном катализе автоколебания были обнаружены в начале 70-х годов. На сегодняшний день известно более 40 реакций, протекающих на различных катализаторах в режиме автоколебаний. Наиболее изученными являются автоколебания в реакциях каталитического окисления СО, водорода, и метанола. С одной стороны, протекание реакции в осциллирующем режиме представляет потенциальную опасность для химических предприятий. С другой стороны, такие реакции могут обеспечить более высокую эффективность каталитических превращений. С научной точки зрения, изучение автоколебаний может предоставить дополнительную информацию о детальном механизме данных реакций. В связи с этим изучение автоколебаний представляет собой актуальную задачу.

В данной работе для определения причин возникновения автоколебаний в реакции каталитического окисления метана на никеле было проведено *in situ* исследование с применением методов рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии. Установлено, что автоколебания возникают в диапазоне температур 750-880°C в условиях дефицита кислорода. Обнаружено, что при протекании реакции система большую часть времени находится в неактивном состоянии и периодически самопроизвольно переходит в активное состояние. Распределение продуктов реакции указывает на то, что в режиме автоколебаний протекает как полное, так и парциальное окисление метана. При проведении экспериментов наблюдались периодические изменения интенсивностей рентгеновских рефлексов, отвечающих металлическому никелю и оксиду никеля. При этом в активном состоянии на поверхности никель находится в металлическом состоянии, а в неактивном – поверхность покрыта оксидом никеля. На основании полученных данных предложена модель, объясняющая возникновение автоколебаний в данной реакции, которая основана на периодическом окислении-восстановлении никеля.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук В. В. Каичев

ИЗМЕРЕНИЕ КОНСТАНТ РЕЛАКСАЦИИ В СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ ДЛЯ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

А. Ю. Карсеев, В. В. Давыдов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

В настоящее время в нашей стране, в условиях непрекращающегося экономического кризиса существует устойчивая тенденция по снижению затрат на производство продукции, что мгновенно отражается на её качестве, а также структурном составе. Для подробного анализа требуется множество приборов и химических компонентов, особенно если исследуется жидкая среда (например, бензин, молоко или пиво). Так как для каждой жидкой среды требуются свои химические тесты, отслеживать такую продукцию очень сложно по причине огромной стоимости мобильных лабораторий.

Кроме того, наблюдается постоянное загрязнение водных объектов продуктами человеческой деятельности, вследствие чего необходим постоянный контроль состояния водной поверхности и побережья.

Наиболее эффективным решением этих проблем является экспресс-контроль жидких сред на месте. Оборудование для полного анализа взятых проб (рентгеновские и оптические спектрометры) находится, в основном, в стационарных лабораториях на значительном расстоянии от мест забора проб.

Малогабаритный ядерно – магнитный спектрометр позволяет провести предварительный анализ жидкой среды, определив её времена продольной T_1 и поперечной T_2 релаксации и установить опасность загрязнения.

Для этого была разработана новая схема регистрации сигнала ЯМР в слабом магнитном поле ($B = 67$ мТл). Чтобы обеспечить измерения констант релаксации в таком поле была также изготовлена «нейтраль», в которой расположены магниты, что обеспечило неоднородность поля 10^4 см⁻¹. Получение сигнала ЯМР производится посредством генератора слабых колебаний (автодина) на основе дифференциального усилительного каскада на полевых транзисторах со стоковым детектированием сигнала ЯМР. Для обеспечения оптимальных условий регистрации сигнала ЯМР был разработан блок обработки и управления на базе микроконтроллера STM32, включающий схему накопления сигнала ЯМР, что позволило проводить измерения при отношении сигнал/шум порядка 1.2.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент В. В. Давыдов

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНОГО АВТОЭМИССИОННОГО КАТОДА

М. В. Клименко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

В Институте ядерной физики СО РАН начаты работы по поиску и исследованию материалов для создания полевых (автоэлектронных) эмиттеров электронов. К полевым эмиттерам относят источники электронов, основанные на принципе автоэлектронной эмиссии, которая представляет собой туннелирование электронов через потенциальный барьер на границе раздела твердое тело-вакуум под действием внешнего электрического поля.

Преимуществом данных катодов является отсутствие накала, что позволяет снизить потребляемую мощность. Применение автокатодов возможно в целом ряде систем вакуумной нано- и микроэлектроники: низковольтных автоэмиссионных дисплеях и источниках света, устройствах СВЧ, точечных источниках электронов для электронной микроскопии. В частности, большой интерес представляет применение автоэмиссионных катодов в источниках ионов и генераторах нейтронов на их основе.

В работе исследовались автоэмиссионные свойства наноструктурированного углерода, получаемого в процессе терморасширения графита при 200°C. В эксперименте обнаружено появление автоэлектронной эмиссии при напряженностях электрического поля выше 10^4 В/см. Зависимость тока эмиссии от напряженности электрического поля соответствует закону Фаулера-Нордгейма: $\mathbf{J}=\mathbf{A}\mathbf{E}^2\exp(-\mathbf{B}\varphi^{3/2}/\mathbf{E})$, где φ -это работа выхода, А и В функции, зависящие от геометрии системы. Максимальная плотность тока на катоде, соответствующая напряженности $3\cdot 10^4$ В/см, составляет 0.01 А/см².

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

СИНТЕЗ ГРАФЕНА МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОГО ГАЗОФАЗНОГО ОСАЖДЕНИЯ НА МЕДИ

И. А. Костоград

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Графен – один слой графита. Атомы углерода в графене соединены sp^2 гибридованными связями в гексагональную двумерную решетку. Наряду с однослойным графеном интерес привлекают двуслойный и многослойный графен (до 10 слоев).

Актуальность развития методов получения графена обусловлена его уникальными свойствами. Графен имеет высокую электро- и теплопроводность, прозрачность и механическую прочность, это делает его интересным материалом для многих приложений. Прежде всего, это применения в опто- и наноэлектронике, фотонике, композитные материалы, краски и покрытия. Атомы углерода в графене могут взаимодействовать с атомами других элементов, таких как азот, фтор, водород и др. Данные структуры имеют широкие перспективы применения в таких областях как катализ и водородная энергетика.

Данная работа посвящена синтезу графена методом химического газофазного осаждения. Целью работы было получить образцы однослойного и несколькослойного графена для дальнейшей их функционализации водородом и азотом.

Синтез графена осуществлен в термическом реакторе при атмосферном давлении на медных подложках. В качестве газа прекурсора использовался метан (99,9%), в качестве подложек использовалась медная фольга C110 Corper (99,9% Cu) и AlfaAesar (99,8% Cu) толщиной 30 и 25 мкм. Эксперименты проведены при различных температурах, составах газовой смеси ($Ar+H_2+CH_4$), временах экспозиции, различных скоростях охлаждения образцов. Анализ синтезированных пленок проводился методами оптической микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния, сканирующей электронной микроскопии.

В экспериментах получены образцы однослойного и многослойного графена. Показано, что определяющими параметрами синтеза являются динамика охлаждения образцов и качество поверхности медных подложек.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Д. В. Смовж

ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ ЛАЗЕРА НА СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МНОГОСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ

И. И. Куркина

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

Спектр комбинационного рассеяния света (КРС) является индивидуальной оптической характеристикой молекулы вещества, благодаря чему метод КРС дает надежную идентификацию рассеивающих молекул. В спектрах КРС графена и графеновых материалов обнаруживаются две основные комбинационные линии G ($\sim 1582 \text{ см}^{-1}$) и G' ($\sim 2700 \text{ см}^{-1}$). При разупорядочении решетки или на краю графеновой пленки появляется D линия (1350 см^{-1}) [1].

В настоящей работе исследовались многослойные графеновые пленки, полученные механическим расслоением высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) с помощью скотча и креппа (малярный скотч), а также электростатическим расслоением ВОПГ. Толщины многослойного графена получились в интервале от 2 до 10 нм, а латеральные размеры – десятки микрон.

Спектры КРС исследованного многослойного графена получали при помощи трех лазеров со значениями энергий 1,96 эВ, 2,33 эВ и 2,62 эВ. Для всех образцов при всех энергиях лазера спектры КРС имели G и G' комбинационные линии. Для многослойного графена, полученного механическим методом, в спектрах КРС наблюдалась D линия.

В ходе работы было установлено, что положение линии G колеблется в зависимости от температуры участка многослойного графена под лазером. Линии D и G' обладают дисперсией, которая зависит (для D линии) от способа получения многослойной графеновой пленки. Сделана оценка расстояния между дефектами в многослойных графеновых пленках при помощи определения отношения интенсивностей линий D к G. Сделано предположение, что дефекты многослойного графена влияют на ширину линии G.

1. Malard L. M. et al. Raman spectroscopy in graphene // Physics Reports, vol. 473, 2009, P. 51-87

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

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ МАНТИЙНЫХ МИНЕРАЛОВ ИЗ КСЕНОЛИТОВ КИМБЕРЛИТОВОЙ ТРУБКИ “УДАЧНАЯ” (ЯКУТИЯ)

Э. Ю. Матхонова

Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

В настоящее время Кольская скважина — самая глубокая скважина в мире, максимальная глубина 12262 метров. Для изучения глубоких недр этого недостаточно и поэтому методами познания глубинных пород Земли является в основном решение обратных задач. Как известно, из исследований в физике твердого тела и в материаловедении, существует взаимосвязь между условиями образования кристаллов, параметрами последующих физико-химических воздействий и их дефектной структурой. Поэтому изучение дефектной структуры кристаллической решетки дает возможность восстановить некоторые метаморфические процессы [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, оснащенный EDX спектрометром OXFORD). При подготовке образцов для исследования с помощью просвечивающей электронной микроскопии использовалась система ионной полировки PIPS.

В работе изучались верхнемантийные минералы (магнезиальный оливин, пироп, магнезиальный ортопироксен (энстатит) и клинопироксен), полученные из ксенолитов кимберлитовой трубки «Удачная». Оптически образцы характеризуются структурами течения, двойникованием и перекристаллизацией крупных кристаллов оливина. Эти глубинные процессы (около 190-250 км) происходят 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). По электронным дифрактограммам и снимкам высокого разрешения был определен фазовый состав вторичных минералов, появившихся в результате разложения первичных.

1. Общая геология: учебник / Короновский Н. В. / Москва 2006.

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

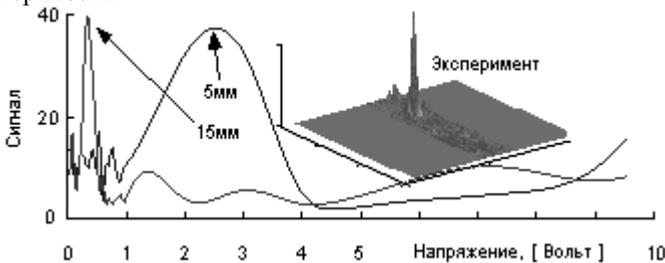
ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРА И ПОВЕРХНОСТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ КВАРЦЕВОГО РЕЗОНАТОРА В СДВИГОВОЙ МОДЕ

И. А. Мик

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

Кварцевый резонатор в сдвиговой моде был применен для определения химической природы поверхности аэрозольных наночастиц, образующихся при фотонуклеации в парах альдегидов. Кварцевый резонатор был помещен в УФ-облучаемый проточный кварцевый реактор, через который пропускали пары салицилового альдегида или фурфурала. С увеличением амплитуды колебаний поверхности резонатора при достижении некоторого порогового значения частица отрывается от поверхности. Химическое модифицирование поверхности позволило определять поверхностные функциональные группы наночастиц. При отрыве наночастицы от поверхности кварцевого резонатора за счёт ускорения наблюдаются искажения на амплитудно-частотной зависимости. С помощью мат. обработки эти искажения были преобразованы в сигнал (S-сигнал), который пропорционален массе частицы и силе связывания, зависящей от природы взаимодействия между наночастицей и поверхностью.

Показано, что этот метод является перспективным для изучения поверхностных функциональных групп наночастиц как в газовой фазе, так и в жидкости, а также для исследования различных химических процессов на поверхности.



Зависимость размера аэрозольных частиц от времени облучения паров фурфурала в проточном реакторе. Вставка – трехмерный S-сигнал после математической обработки.

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

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ХРОМА-МЕДИ

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

Соединения на основе дисульфидов хрома-меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0-0.4$) обладают рядом физических свойств, перспективных для практического применения, таких как колоссальное магнетосопротивление, термоэлектрические эффекты, а также переход металл-диэлектрик. Этими свойствами можно управлять, варьируя количество вводимых атомов ванадия. Благодаря данным эффектам эти вещества могут быть использованы для создания новых многофункциональных материалов для нужд современной электроники.

Несмотря на значительный интерес к данному классу соединений, электронная структура этих соединений изучена недостаточно. В этой связи использование рентгеновской эмиссионной спектроскопии позволяет восполнить пробел в информации об электронной структуре данных соединений.

Для этого были получены $K_{\alpha 1,2}$ -спектры и мягкие рентгеновские $L_{\alpha 1,2}$ -спектры металлов и $K_{\beta 2,5}$ -спектры серы в исследуемых соединениях с различной степенью катионного замещения. Затем была построена зависимость химического сдвига $K_{\alpha 1,2}$ -линий от степени катионного замещения. Также были проведены расчеты спутной структуры $K_{\alpha 1,2}$ -спектров на основе модели переноса заряда.

Построение $K_{\alpha 1,2}$ - и $2p_{3/2,1/2}$ -фотоэлектронных спектров в единой энергетической шкале позволило выявить особенности спутной структуры $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0-0.4$) в зависимости от степени катионного замещения.

Исследования проводились как на поликристаллических, так и на монокристаллических образцах.

Для проведения исследований на рентгеновский спектрометр «УРС-2И» был установлен позиционно-чувствительный полупроводниковый детектор БЛПП-369, а также специально изготовленная приставка для получения флуоресцентных спектров.

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

**ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ $n/Si - p/C_{алмаз}$
ГЕТЕРОСТРУКТУР, ПОЛУЧЕННЫХ CVD-МЕТОДОМ НА
КРЕМНИЕВЫХ ПОДЛОЖКАХ С ОРИЕНТАЦИЕЙ (100) И (111)**

Н. Т. Муталов, Т. М. Салиев

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

В последнее время в производстве полупроводниковых светодиодов уделяют особое внимание структурам, излучающим белое свечение без применения люминофора. Авторами работы [1] показана возможность получения алмазных пленок на Si подложках и формирования на их основе $n/Si - p/C_{алмаз}$ гетероструктур с белым свечением.

Настоящая работа посвящена исследованиям вольтамперных характеристик (ВАХ) $n/Si - p/C_{алмаз}$ гетероструктур, полученных методом химического пароголового осаждения (ХПГО – CVD-метод) на кремниевых подложках с кристаллографическими направлениями (100) и (111).

Исследования показали, что формы ВАХ образцов, полученных как на подложках с направлением (100) так и (111) имеют симметричный вид, что соответствует двум встречно включенным диодным структурам. Исследования образцов однозондовым методом показали, что в области гетерограницы между пленкой и кремниевой подложкой имеется тонкий ($\sim 0,1 \div 0,2$ мкм) высокоомный переходный слой, который, по-видимому, и создает симметричный барьер для носителей тока и излучение исходит именно из этого слоя. При этом, из-за малой толщины переходного слоя, инжектированные неравновесные носители тока пролетают, не успевая рекомбинировать в этом слое, снижая при этом КПД излучения.

Разность в значениях напряжений пробоя гетероструктур, полученных на подложках с направлениями (100) и (111), объясняется тем, что на подложках с направлением (111) получаются пленки алмаза с относительно совершенным кристаллическим строением и с малым количеством дефектов в переходной области. Этот факт подтверждается и формой ВАХ таких структур.

1. Салиев Т. М., Саидов М. С. Белое излучение при пробое $nSi - pC_{алмаз}$ гетероперехода и о предельной эффективности кремниевого солнечного элемента. //Гелиотехника, 2010, №3, -С.1-3.

Работа выполнена в рамках гранта ГНТП (А-3-ФА-0-20256) РУз
Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А. С. Саидов.

О ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ АЛМАЗНЫХ ПЛЕНОК НА САПФИРОВЫХ ПОДЛОЖКАХ CVD-МЕТОДОМ

Н. Т. Муталов, Т. М. Салиев

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

Алмазные пленки на сапфире были получены методом газофазной эпитаксии (ГФЭ) [1]. В качестве подложек были применены сапфировые пластины толщиной 400 мкм. с размерами 10 мм. ×10 мм. Подложки обезжиривались в четыреххлористом углероде, а затем в проточной дистиллированной воде и высушивались. Непосредственно перед ростом эпитаксиального алмазного слоя подложку отжигали при температуре 1400°C в течение $T_{отж} > 30-35$ мин для удаления с их поверхности остаточного загрязнения.

Наличие алмазных пленок на сапфировых подложках определялось измерением спектров Рамановского рассеяния в области энергий, соответствующих пикам алмаза, а также измерением микротвердости пленки.

Таким образом, нами показана возможность получения алмазных пленок CVD-методом на сапфировых подложках.

1. Павлов Д. А., Шиляев П. А., Пирогов А. В. и др. // ФТП, 2013, том 47, выпуск 6. –С.854-858.

Работа выполнена в рамках гранта ФПФИ № Ф-4-14. АН РУз.

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

МОРФОЛОГИЯ И ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИКРОТРУБОК ДИФЕНИЛАЛАНИНА

А. С. Нураева, Д. С. Петухова, С. Г. Васильев, М. М. Нерадовский
Уральский федеральный университет им. первого
Президента Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург

Пептиды (греч. *пелтос* – питательный) – семейство веществ, молекулы которых построены из остатков α -аминокислот, соединённых в цепь пептидными (амидными) связями —C(O)NH—. [1]

Пептидные структуры обладают пьезоэлектрическими, пироэлектрическими и нелинейно-оптическими свойствами, а также являются биосовместимыми, что делает их привлекательными для биомедицинских приложений. Данный класс материалов можно использовать в качестве биосенсоров [2], биосовместимых покрытий, элементов медицинской техники и биоэлектроники [3], пьезонаноустройств на основе трубчатых наноструктур потенциально совместимых с человеческими тканями [4]. В частности в пептидных микротрубках был обнаружен пьезоэлектрический отклик, величина которого соизмерима с пьезо-откликом сегнетоэлектрика ниобата лития.

В докладе представлены результаты исследования зависимости морфологии пептида – дифенилаланина и пьезоэлектрических характеристик пептидных микротрубок от условий формирования.

Показано, что уменьшение концентрации метанола в водном растворе, из которого выращивались структуры, приводит к существенному изменению морфологии, а именно к уменьшению диаметра и количества плоских структур, а также к увеличению длины и количества микротрубок, демонстрирующих высокие значения пьезоэлектрического отклика.

1. Гринштейн Дж., Виниц М. Химия аминокислот и пептидов – М.: Мир, 1966 – 832 с.

2. Braun H.-G., Cardoso A. Z. Self-assembly of Fmoc-diphenylalanine inside liquid marbles // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* – 2012. – V.97 – P.43-50

3. Кудрявцев А. В и др. Биосегнетоэлектричество и биопьезоэлектричество // *ФТТ* – 2012. – Т. 54, вып. 6 – С. 1180-1185

4. Kholkin A. et al. Strong Piezoelectricity in Bioinspired Peptide Nanotubes – *ACS Nano* – 2010 – V. 4, № 2 – P. 610–614

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В. Я. Шур

ИЗУЧЕНИЕ ИЗОТОПИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В СПЕКТРАХ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ ИЗОТОПНО-ЧИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ ТЕЛЛУРА

О. С. Окишева

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

Изотопно-чистые кристаллы теллура представляют большой интерес и для фундаментальных исследований, и для практического применения. В последнее время теллур и его соединения теллуриды нашли широкое применение в полупроводниковой промышленности и электронике при изготовлении полупроводниковых термоэлементов, фотоэлементов, датчиков Холла и других устройств для автоматики и радиоэлектроники.

Использование изотопно-чистых халькогенов и халькогенидов (в том числе теллура и теллуридов) позволит освоить новые спектральные диапазоны, будет способствовать появлению новых источников когерентного излучения, а также увеличению чувствительности современных полупроводниковых устройств.

Настоящая работа посвящена измерению КР-спектров высокого разрешения ($0.3\text{--}0.7\text{ см}^{-1}$) изотопно-чистого кристалла теллура в интервале температур $4\text{--}300\text{ К}$ с шагом в 10 К . Измерения проводились на спектрометре LabRAM HR фирмы Horiba-Jobin Yvon с возбуждением линией 488 нм Ar^+ лазера. Целью этих измерений является получение необходимой информации о свойствах соединений в зависимости от их изотопного состава. Работа относится к сравнительно малоизученным областям физики и химии твердого тела.

Анализ и обработка полученных КР-спектров были проведены с помощью программных обеспечений Origin и Wolfram Mathematica.

Сравнение полученных зависимостей спектральных параметров колебательных мод (положения максимума, полуширины и интенсивности) от температуры для разных изотопов позволяет определить область, где нулевые колебания вносят эффективный вклад в колебательный спектр.

В работе показана зависимость частоты колебаний и полуширины линии от температуры. Параметр асимметрии линии показывает резкий скачок при температурах $\sim 200\text{ К}$ для ^{126}Te и $\sim 260\text{ К}$ для ^{130}Te . Такой скачок указывает на наличие структурного фазового перехода в кристалле. Различия в температурах наблюдаемого скачка параметра асимметрии для ^{126}Te и ^{130}Te обусловлено различием в среднеквадратичной амплитуде нулевых колебаний атомов, пропорциональной $m^{-1/2}$.

Научный руководитель – д-р хим. наук Б. А. Колесов

РАЗВИТИЕ МЕТОДА ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕСОВЕРШЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ

А. В. Панченко

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

Новосибирский государственный университет

Работа направлена на решение проблемы изучения несовершенных кристаллов с размерами до 0,7 мм, то есть образцов, для которых нельзя применить стандартные рентгенографические методики исследования моно- и поликристаллов. Для этого предлагается использовать современный четырехкружный гониометр, который позволяет с точностью 5 мкм удерживать центр образца при поворотах вокруг трех осей ω , χ и φ . Такие гониометры, например, установлены на дифрактометрах Bruker APEX X8 и APEX DUO, оснащенных двухкоординатными детекторами. Стандартная процедура позволяет проводить съемку образца при двух заданных углах (ω и χ) и полном обороте вокруг оси φ . Таким образом, прибор используется в режиме рентгеновской камеры Дебая-Шеррера. Но в случае несовершенного монокристалла одной дебаеграммы недостаточно.

Для проведения качественного и количественного рентгенофазового анализа (РФА) для многофазных образцов предлагается получать серию снимков при разных положениях образца относительно первичного пучка, а после проводить их суммирование. В настоящей работе такая стратегия съемки апробирована на ряде эталонов: совершенный монокристалл Si, керамика α -Al₂O₃ + поликристаллический Si и др.

Для получения прецизионных значений параметров элементарной ячейки (ПЭЯ), даже при больших коэффициентах поглощения и размерах образца больших размера первичного пучка, предложено получать дифракционной картины «на отражение», а на поверхность образца, наносить тонкий слой поликристаллического эталона. Исследуемые частицы природных сплавов Ir-Os-Ru заливали эпоксидной смолой, шлифовали до появления металла и на полученную плоскость наносили порошок Si. В работе проведен РФА и определены ПЭЯ ряда образцов, отличающихся по составу.

Автор благодарит д. г.-м. н. Н. Д. Толстых за любезно предоставленные образцы.

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

СПИНОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДЫШАЩИХ КРИСТАЛЛАХ: КОМПРЕССИОННАЯ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛОВ $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Me}}$

А. В. Полушкин

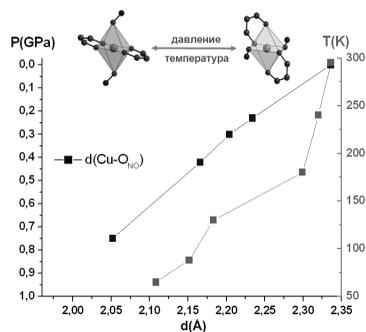
Институт "Международный томографический центр" СО РАН,
г. Новосибирск

На сегодняшний день дышащие кристаллы – гетероспиновые комплексы на основе гексафторацетилацетоната меди(II) $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ со стабильными нитронилнитроксильными радикалами L^{R} – привлекают все больше внимание исследователей своими необычными свойствами. Кристаллы таких соединений могут претерпевать разнообразные структурные перестройки, которые, в свою очередь, вызывают изменения величины эффективного магнитного момента. Понимание механизмов проявления тех или иных свойств требует детального изучения структурных перестроек при различном внешнем воздействии и выявления взаимосвязи *структура-свойство*.

Традиционный подход к исследованию таких соединений заключается в изучении магнитных свойств и температурной динамики структуры методом РСА, что позволяет выявить магнитно-структурные корреляции. Лишь не так давно начаты работы по исследованию дышащих кристаллов спектроскопическими методами (ЭПР, ИК). В данной работе представлен принципиально новый способ воздействия – *внешнее гидростатическое давление*.

Цель настоящей работы – изучение динамики кристаллической структуры гетероспинового комплекса гексафторацетилацетоната меди(II) $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ с метилпиразоллил-замещенным нитронилнитроксильным радикалом L^{Me} при изменении давления.

В ходе работы было показано, что изменение давления оказывает на структуру действие, подобное изменению температуры (рис. 1), поэтому также способно провоцировать появление магнитных аномалий на кривой $\mu_{\text{эфф}}(T)$.



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

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОТЕРМОВОЛЬТАИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В $pSi-n(Si_2)_{1-x-y}(ZnSe)_x(GaP)_y$ ($0 \leq x \leq 0.88$, $0 \leq y \leq 0.09$) СТРУКТУРЕ

У. Х. Рахмонов

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

В работе представлены результаты исследования фототермовольтаического эффекта в $pSi-n(Si_2)_{1-x-y}(ZnSe)_x(GaP)_y$ структуре.

Напряжение (V) и сила тока (I), генерированные $pSi-n(Si_2)_{1-x-y}(ZnSe)_x(GaP)_y$ ($0 \leq x \leq 0.88$, $0 \leq y \leq 0.09$) гетероструктурой, при освещении ее концентрированным солнечным излучением и без освещения, снимались при различных значениях температур (рис. 1 и 2).

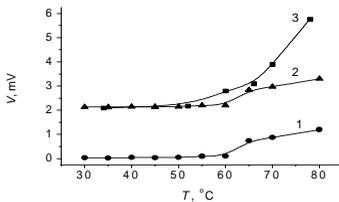


Рис.1.

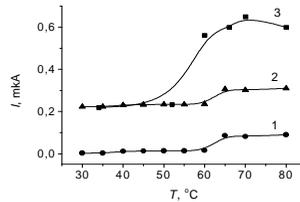


Рис.2.

Рис. 1. Зависимости напряжения, генерированного $pSi-n(Si_2)_{1-x-y}(ZnSe)_x(GaP)_y$ гетероструктурой от температуры: 1 – без освещения; 2 – сумма чистого термо- и фотонапряжения; 3 – при освещении концентрированным солнечным светом с постоянной интенсивностью. Рис. 2. Зависимости тока, генерированного $pSi-n(Si_2)_{1-x-y}(ZnSe)_x(GaP)_y$ гетероструктурой от температуры: 1 – без освещения; 2 – сумма чистого термо- и фототока; 3 – при освещении концентрированным солнечным светом с постоянной интенсивностью.

Как видно из рис. 1 и рис. 2 при освещении исследованной структуры концентрированным солнечным светом, возникающие в ней напряжение и сила тока при комнатной температуре составляют 2.1 мВ и 0.22 мкА, соответственно. При повышении температуры до 55 °С напряжение и сила тока практически не меняются, а при дальнейшем росте температуры, при неизменном значении интенсивности светового потока, наблюдается увеличение их величин.

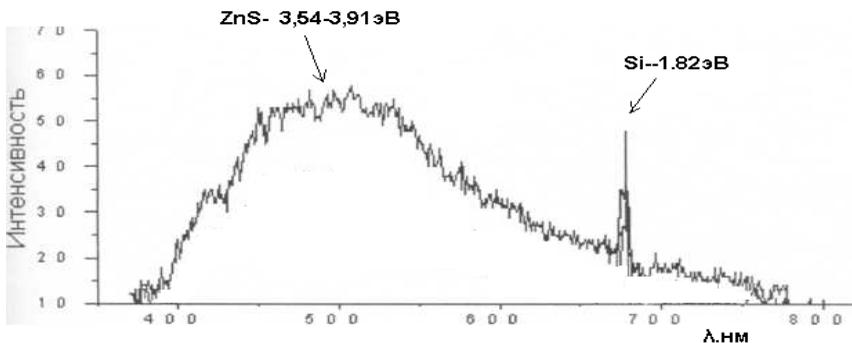
Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. А. С. Саидов

СПЕКТР ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ (Si₂)_{1-x}(ZnS)_x (0.08≤X≤0.92), ВЫРАЩЕННОЙ НА КРЕМНИЕВУЮ ПОДЛОЖКУ

Д. В. Сапаров

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

Для получения качественных, но недорогих полупроводниковых приборов необходимо разработать технологии выращивания эпитаксиальных пленок дорогих полупроводниковых соединений A^2B^6 , в частности ZnS на дешевые Si подложки. Из-за большого различия коэффициентов термического расширения, а также параметров решеток подложки и выращиваемой эпитаксиальной пленки, такое гетероэпитаксиальное выращивание пленок сопряжено большими техническими трудностями. При выращивании эпитаксиальных пленок ZnS непосредственно на Si подложки, в пленке образуются множество дефектов, которые делают эти пленки непригодными для технического применения. Для устранения этого недостатка, мы решили выращивать эпитаксиальные пленки непрерывного твердого раствора замещения $(Si_2)_{1-x}(ZnS)_x$ на кремниевую подложку. Концентрация ZnS в пленке постепенно увеличивается по направлению роста и достигает 92% на поверхности пленки. На рис.1 приведен спектр фотолюминесценции эпитаксиальной пленки $(Si_2)_{1-x}(ZnS)_x$. На спектре фотолюминесценции наблюдается пик соответствующий энергии 1,82 эВ. Появление этого пика, по-видимому, обусловлено молекулой кремния (Si₂), расположенной в кристаллической решетке ZnS, в окружении атомов Zn и S.



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

КИНЕТИКА ТОКА РЕЛАКСАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СИЛЕНИТА ВИСМУТА $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$

М. П. Севрюгина, Н. С. Пшелко

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

Кристаллы со структурой $\text{Bi}_{12}\text{MO}_{20}$ (ВМО) относятся к пентагонитетраэдрическому классу I23 кубической сингонии и обладают стереохимически активными электронными одиночными парами $6s^2$ иона Bi^{3+} , наличие которых оказывает существенное влияние на формирование спектра локальных состояний. Исследование релаксационных электронных процессов является одним из основных методов получения информации о механизмах зарядообразования и установления природы деградации полупроводниковых материалов и приборов на их основе под действием внешнего электрического поля.

Целью настоящей работы явилось изучение поляризационных явлений в монокристаллах $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ методом временной токовой спектроскопии.

На рис. 1 представлены результаты исследования временной зависимости изотермического тока поляризации $I(t)$ в монокристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ для различных уровней напряженности электрического поля. При всех значениях приложенного напряжения имеет место спадающая релаксация тока с последующим установлением его стационарного уровня, позволяющая выделить быструю и медленную фазы релаксационного процесса. Увеличение U приводит к снижению высоты потенциального барьера на контакте металл-полупроводник, в результате чего реализуется ситуация, когда из электрода в полупроводниковый слой инжектируются НЗ в количестве достаточном, чтобы восполнить их уход из слоя в контакт.

Обнаруженный длинновременной характер кинетики тока релаксации интерпретируется формированием пространственного заряда за счет захвата носителей заряда на локальные уровни и последующим термическим опустошением все более глубоких ловушек, приводящих к замедлению процесса.

Научный руководитель – д-р тех. наук Н. С. Пшелко

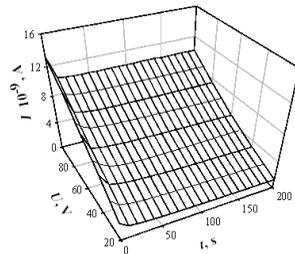


Рис. 1. Полевая зависимость кинетики тока поляризации в монокристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$.

КР-СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ CuCrS_2 В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР 4-300 К

А. В. Селиванова

Институт неорганической химии им. А. Н. Николаева СО РАН,
г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Слоистые соединения со смешанной электрон-ионной проводимостью и магнитным упорядочением при низких температурах являются перспективными веществами для электроники будущего. Магнитные свойства таких соединений и их связь со структурой кристалла изучены слабо. Соединение CuCrS_2 относится к классу смешанных электрон-ионных проводников с быстрым ионным транспортом при высоких температурах и является антиферромагнетиком – при низких ($T_N = 40$ К). Особенностью структуры данных соединений является наличие тройных слоев CrS_2 , между которыми располагаются атомы меди. Последние обладают высокой подвижностью в межслоевых промежутках благодаря их слабой связи с халькогеном.

Цель данной работы состоит в изучении влияния структурных изменений, приводящих к магнитным переходам, на спектры комбинационного рассеяния.

КР-спектры CuCrS_2 в области 4 – 300 К получены на Раман-спектрометре LabRam HR фирмы Horiba Jobin Yvon. В качестве источника возбуждения использовалось излучение Ar^+ -лазера с длиной волны 488 нм.

Спектры обработаны с помощью программ Origin и Wolfram Mathematica и построены зависимости частот наблюдаемых колебаний и полуширин мод от температуры в области 4 – 300К.

На температурной зависимости колебания 260 см^{-1} наблюдается особенность при $T < 50\text{К}$. Предполагается, что эта особенность обусловлена существующим структурно-магнитным переходом.

Кроме того, линия 260 см^{-1} обнаруживает резонансное изменение интенсивности в зависимости от частоты возбуждающего излучения. По этой причине мода отнесена к колебаниям атомов меди в решетке. Возрастание частоты колебания этой моды при $T < 50$ К позволяет сделать выводы о характере структурных превращений, приводящих к магнитному упорядочению в кристалле.

Научный руководитель – д-р хим. наук Б. А. Колесов

ИССЛЕДОВАНИЕ УПРАВЛЯЕМОСТИ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ КОСМИЧЕСКОГО АППАРАТА

С. Н. Смайлханова

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

Целью данной работы было определение управляемости уравнений движения космического аппарата. Система называется *вполне управляемой*, если выбором управляющего воздействия $u(t)$ на интервале времени $[t_0, t_1]$ можно перевести систему из любого начального состояния $x(t_0)$ в произвольное заранее заданное конечное состояние $x(t_1)$ [1].

Движение космического аппарата в ньютоновском поле может быть описано уравнениями Эйлера-Пуассона (см., например, [2]).

Критерий управляемости [1]. Для того чтобы система $\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t)$, $x(t_0) = x_0$ (1) была управляемой, необходимо и достаточно, чтобы ранг матрицы управляемости $W = (B \ AB \ A^2B \ \dots \ A^{n-1}B)$ равнялся размерности вектора состояния: $\text{rang } W = n$. Здесь через x – обозначена n -мерный вектор состояния; u – r -мерный вектор управления; t – время, $t \in [t_0, t_1]$ – интервал функционирования системы; A – матрица размера $(n \times n)$, B – матрица размера $(n \times r)$, x_0 – начальное состояние.

Уравнения Эйлера-Пуассона [2] при помощи замены переменных была приведена к нормальному виду с явно выраженной линейной частью, после чего был предложен закон управления [3]. Управляемая система уравнений приняла вид (1). Была составлена матрица управляемости размерности 6 на 36, ранг которой был вычислен при помощи пакета аналитических вычислений Mathematica. Ранг матрицы оказался равен 6, что и доказывает управляемость системы.

1. Семенов В. В., Пантелеев А. В., Бортакровский. А. С. Математическая теория управления в примерах и задачах. – М.: Изд-во МАИ, 1997. – 261 с.

2. Белецкий В. В. Движение спутника относительно центра масс в гравитационном поле. – М.: Изд-во МГУ, 1975. – 308 с.

3. Z. Rakisheva. Motion stabilization of a solid body with fixed point.// Progress in analysis and its applications. Proceedings of the 7th International ISAAC Congress held at the Imperial College London, London, July 13-18, 2009. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2010. – pp. 630-636

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент З. Б. Ракишева

СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ РАСПАДЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ $\text{SrF}_2\text{-Zn}^{2+}$

Н. А. Смирнова

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

В данной работе исследовались спектры поглощения облученных кристаллов SrF_2 , активированных двухвалентными ионами цинка Zn^{2+} .

Необлученные кристаллы $\text{SrF}_2\text{-Zn}^{2+}$ не имеют полос поглощения в видимой области спектра. После рентгеновского окрашивания при комнатной температуре (295 К) мы наблюдали два вида спектров поглощения.

Первый тип спектра получался для кристаллов $\text{SrF}_2\text{-Zn}^{2+}$ с концентрацией Zn^{2+} приблизительно 0.002%. Это спектр с одной полосой поглощения с максимумом 4.30 eV, что указывает на восстановление примесного иона цинка до одновалентного состояния и образовании $\text{Zn}^+\text{-O}_h$ -центров

Второй тип спектра получался для кристаллов $\text{SrF}_2\text{-Zn}^{2+}$ с концентрацией цинка приблизительно 0.03%. Это спектр с полосой поглощения, расщепившейся на 3 пика с максимумами 3.50, 4.55 и 5.55 eV, что свидетельствует об образовании примесных центров с более низкой симметрией – C_{3v} . Понижение симметрии происходит за счет образования вакансий в анионной подрешетке кристалла.

Поскольку в щелочно-земельных фторидах как собственные радиационные (F^- , V_k^- и I -центры), так и примесные дефекты заряжены, естественно предположить, что электрические поля обоих типов дефектов взаимодействуют друг с другом. Для образования анионной вакансии в ближайшем окружении Zn^+ , нужно понизить энергетический барьер связи $a\text{-I}$ -пары. При малых концентрациях примеси эффективность формирования $\text{Zn}^+\text{-C}_{3v}$ - и $\text{Zn}^+\text{-C}_{2v}$ -центров, имеющих в своем составе одну или две анионные вакансии, низка и, в большинстве своем, создаются примесные O_h -центры. При более существенных концентрациях примеси, электрическое поле примесных центров уже способно запустить процесс разделения $a\text{-I}$ -пар и образования анионных вакансий вокруг примесного иона. Следовательно, эффективность формирования $\text{Zn}^+\text{-C}_{3v}$ - и $\text{Zn}^+\text{-C}_{2v}$ -центров при больших концентрациях увеличивается.

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

АКУСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ УПРУГИХ И НЕУПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

Э. Г. Соболева, А. Г. Ткачев

Юргинский технологический институт (филиал)
Томского политехнического университета

Акустические методы в исследованиях по физике твердого тела в настоящее время можно считать классическими. Из современных акустических методов исследования упругих и неупругих свойств кристаллов целесообразно выделить резонансный. Основным достоинством резонансного метода является его высокая точность, так как существующие радиотехнические приборы позволяют весьма четко измерять как само значение резонансной частоты, так и разность частот.

В основу импульсных методов положены идеи радиолокационной техники, позволившие использовать достижения радиоэлектроники для измерения скоростей распространения коротких высокочастотных импульсов в упругой среде. Интерес к измерениям упругих характеристик твердых веществ послужил толчком к созданию различных экспериментальных установок, многие из которых являются уникальными. Анализ возможных решений поставленной задачи при наших исходных предположениях показал, что более простым, достаточно точным и сравнительно легко реализуемым вариантом может быть экспериментальная установка на базе прибора типа УЗИС.

Проведенный анализ существующих методов измерений скоростей распространения упругих волн и определения упругих характеристик кристаллов позволил выбрать такие методики, с помощью которых удалось сравнительно просто решить задачи экспериментального исследования. На импульсной ультразвуковой установке изучена зависимость скорости ультразвука от пористости прессованных образцов исследованных соединений при комнатной температуре и проведены измерения скоростей v_L и v_T в монокристаллах галогенатов и галогенидов натрия вблизи комнатной температуры. Установка с резонансным методом измерения позволила провести прецизионные исследования температурных изменений скорости в моно – и поликристаллах галогенатов и галогенидов натрия, а также выявить особенности в спектре акустических колебаний этих соединений по температурному изменению внутреннего трения. Возможность дублирования некоторых результатов измерений по двум методикам повысила их надежность.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Э. Г. Соболева

**ИЗУЧЕНИЕ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ СЛОИСТЫХ
МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ
ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ, ПОЛУЧЕННЫХ ПО МЕТОДУ
ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ФОТОВЫХОДА**

М. М. Сыроквашин, Е. В. Коротаев
Новосибирский государственный университет
Институт неорганической химии им. А. Н. Николаева СО РАН,
г. Новосибирск

Рентгеновская абсорбционная спектроскопия – мощнейший инструмент для получения информации об электронном строении химических соединений: о зонной структуре кристаллов, об электронной структуре твердых тел, о степени участия в химической связи тех или иных орбиталей атомов, входящих в состав многокомпонентных соединений, об эффективных зарядах атомов в твердых телах.

Особый интерес представляют слоистые дихалькогениды хрома-меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0-0.4$), которые являются перспективными материалами для современной электроники в связи с широким спектром проявляемых ими физических эффектов: переход металл-диэлектрик, колоссальное магнетосопротивление, ионная проводимость, термоэлектрический эффект. Традиционно данные соединения синтезируются в виде порошков, для которых стандартная методика получения спектров «на пропускание» хорошо отработана. В случае кристаллических образцов целесообразным становится неразрушающее исследование данных материалов, что невозможно при использовании методики «на пропускание» для образцов большой толщины (несколько мм). В связи с этим, оптическая схема рентгеновского спектрометра «УРС-2И» была модернизирована для регистрации рентгеновских спектров поглощения по выходу флуоресценции.

Были получены спектры поглощения реперных соединений (Cu , CuO , CuS , CuCrS_2), а также спектры дисульфидов хрома-меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0-0.4$) монокристаллических и поликристаллических образцов с применением модернизированной оптической схемы. Затем полученные спектры сравнивались с абсорбционными спектрами, полученными с помощью традиционной методики «на пропускание» и с теоретическими спектрами, вычисленными с помощью программного пакета FDMNES.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ КВАДРУПОЛЬНЫХ ЭФФЕКТОВ В СОЕДИНЕНИЯХ ВАНАДИЯ МЕТОДОМ ЯМР

К. Ю. Ткачев

Институт неорганической химии им. А. Н. Николаева СО РАН,
г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Квадрупольные взаимодействия ядер в твердых телах являются наиболее чувствительными взаимодействиями, позволяющими исследовать симметрию и структуру кристаллов, характер химической связи, явления упорядочения атомов и молекул в кристаллах и фазовые превращения, подвижность отдельных атомных группировок, присутствие примесей и внутренних напряжений. Для изучения квадрупольных взаимодействий можно использовать методы ЯКР (*ядерный квадрупольный резонанс*), ЯГР (*ядерный гамма-резонанс*) и ЯМР (*ядерный магнитный резонанс*). В настоящее время для исследования квадрупольных взаимодействий наиболее широко используется метод ЯМР из-за его аппаратурной универсальности по применению практически ко всем квадрупольным ядрам. Модификация метода – привлечение релаксационных измерений – позволяет включать в круг изучаемых объектов также жидкофазные системы.

В данной работе метод ЯМР был использован для исследования квадрупольных взаимодействий ядер в широко используемых на практике, а также впервые синтезированных соединениях ванадия. Особенностью атома ванадия является его способность проявлять различную степень окисления от 2 до 6, а также переменную валентность (например, $V_{10}O_{28}$). Отметим, что для синтеза новых соединений необходимо точно представлять, в какой степени окисления находятся атомы ванадия в соединениях реагентов. Были изучены квадрупольные взаимодействия в соединениях NH_4VO_3 , V_2O_5 , $V_{10}O_{28}$ и др., используемых для синтеза новых координационных ванадийсодержащих соединений. Спектры ЯМР ^{51}V были зарегистрированы на импульсном спектрометре Bruker AVANCE 500. Проведена обработка спектров, получены параметры квадрупольных взаимодействий – констант квадрупольной связи и параметров асимметрии. На основе полученных параметров проведен анализ химических взаимодействий атомов ванадия в изученных соединениях.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Н. К. Мороз

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПИРОФОСФАТОВ $\text{Li}_2\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{P}_2\text{O}_7$ – КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

А. М. Цапина

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Катодные материалы на основе железа для литий-ионных аккумуляторов широко исследуются вследствие их высокого рабочего напряжения, низкой стоимости и малой токсичности. Пирофосфаты $\text{Li}_2\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{P}_2\text{O}_7$ ($0 \leq y \leq 1$) имеют рабочее напряжение (3,5 В–3,9 В) и характеризуются двумерной диффузией ионов Li. Интеркаляция-деинтеркаляция лития происходит по однофазному механизму твердых растворов.

Целью работы было исследование фазового состава, кристаллической и локальной структуры и электрохимических свойств твердых растворов $\text{Li}_2\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{P}_2\text{O}_7$ ($0 \leq y \leq 1$).

Синтез $\text{Li}_2\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{P}_2\text{O}_7$ ($0 \leq y \leq 1$) осуществляли из оксалатов Fe и Mn в смеси с Li_2CO_3 и $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ с предварительной механической активацией на планетарной мельнице АГО-2 и последующим отжигом при температуре 600°C. Кристаллическую и локальную структуру полученных образцов изучали методом РФА и ЯГРС, электрохимические свойства – методом гальваностатического циклирования в полуячейках с Li анодом. Уточнение структуры проводили по методу Ритвельда с использованием пакета программ GSAS. Коэффициенты диффузии ионов Li^+ вычисляли на основе данных, полученных с помощью метода гальваностатического прерывистого тирования (GITТ).

По данным РФА полученные образцы кристаллизуются в моноклинной сингонии с пр. гр. $P2_1/c$. Наблюдается нелинейность изменения параметров ячейки в области $0 \leq y \leq 0,25$. Известно, что незамещенный $\text{Li}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$ характеризуется наличием Li-Fe антиструктурных дефектов. Методом ЯГРС установлено, что при частичном замещении железа марганцем количество Li-Fe антиструктурных дефектов значительно уменьшается. В процессах циклирования в интервале 2,0–4,3 В пара $\text{Mn}^{2+}/\text{Mn}^{3+}$ остается электрохимически неактивной, однако присутствие Mn приводит к сдвигу окислительно-восстановительного пика $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ в сторону более высоких напряжений. Рассчитано изменение коэффициента диффузии Li в процессе циклирования чистого и замещенного $\text{Li}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$.

Научный руководитель – канд. хим. наук Н. В. Косова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ТОНКИХ ПЛЁНОК nc-Si МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

И. В. Ческовская, А. О. Замчий

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Двухфазный кремний, состоящий из нанокристаллов кремния в аморфной матрице по некоторым своим свойствам может превосходить аморфный кремний и успешно применяется в солнечных элементах.

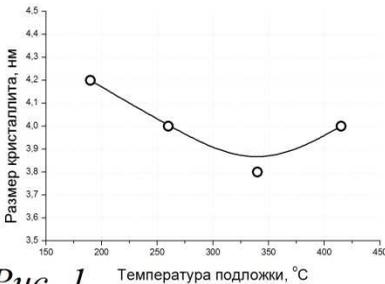


Рис. 1. Температура подложки, °C

Работа посвящена исследованию пленок нанокристаллического кремния, полученного путем термического отжига тонких пленок аморфного гидрогенизированного кремния, синтезированного методом газоструйного плазмохимического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой при различных температурах подложки методом

спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Для определения степени кристалличности используется формула: $\chi = \frac{I_{cr} + I_{int}}{I_{cr} + I_{int} + \gamma \cdot I_{am}}$, где

$\gamma(L) = 0,1 + \frac{L}{L_0}$, а L характерный размер кристаллитов в ангстремах. Определить характерный размер кристаллитов (см. Рис. 1) можно с помощью полной ширины на полувысоте поперечной

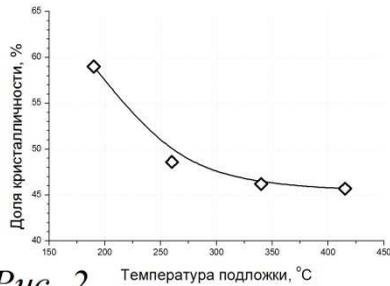


Рис. 2. Температура подложки, °C

оптической моды (TO_{cr}). Знание размера позволяет вычислить долю кристалличности в тонкой пленке (рис. 2).

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

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

ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ ПОЛНОГО ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ НА АЛЮМОПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДОМ *IN SITU* РФЭС

И. А. Четырин

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

Одной из фундаментальных задач науки о поверхности в катализе является изучение поверхности работающего катализатора. Для этого необходимо получить спектральную информацию о поверхности образца, осуществить управление параметрами протекания реакции (температура, парциальное давление реагентов). Практическая реализация такого подхода имеет ряд методологических трудностей, таких как проблема “разрыва давлений” и проблема “размерного эффекта”, которые возникают в ходе изучения причин каталитической активности. Известно, что под воздействием реакционной среды может меняться зарядовое состояние активного компонента, что влияет на каталитические свойства изучаемого образца, размер частиц также может повлиять на каталитическую активность.

В данной работе изучалась серия образцов палладиевых катализаторов на оксиде алюминия ($1\%Pd/Al_2O_3$) с размером частиц в диапазоне от 3 до 10 нм, являющихся одними из наиболее активных и термически стабильных каталитических систем для реакции полного окисления углеводородов.

Исследования проводились на фотоэлектронном спектрометре VG ESCALAB “High pressure”, с применением методов РФЭС и масс-спектрометрии в режиме *in situ* (непосредственно в реакционной смеси), оснащенный ячейкой высокого давления, квадрупольным масс-спектрометром и регуляторами расхода газов. Измерения проводились при различных температурах образцов (30 – 450°C) и соотношениях реагентов в реакционной смеси над поверхностью катализатора.

Было показано, что воздействие реакционной смеси приводит к изменению зарядового состояния палладия независимо от исходного (металл или оксид). В ходе реакции формируется новое металл-оксидное состояние, соотношение компонент в котором (Pd^0 и Pd^{2+}) зависит как от размера частиц и соотношения реагентов в реакционной смеси, так и от температуры протекания реакции.

Научный руководитель – канд. хим. наук И. П. Просвирин

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УСКОРЕННЫХ ГАЗОВЫХ КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЁРДОГО ТЕЛА

А. А. Шмаков

Новосибирский государственный университет

Взаимодействие ускоренных газовых кластеров с поверхностью изучается уже более 25 лет, что свидетельствует об актуальности этой проблемы и подтверждается многочисленными попытками создать высокоэффективную технологию модификации материалов [1].

В настоящей работе изучено влияние параметров ионного потока на шероховатость поверхности образца. На экспериментальном стенде ЛЭМПУС отдела прикладной физики НИЧ НГУ [2] выполнены исследования по доставке и фокусировке кластерно-ионных потоков к поверхности образца. При этом использовалась модификация ионно-оптической системы с конечной энергией пучка 25 кэВ. Изучен массовый состав сформированных пучков при различных энергиях ионизации и различных давлениях в форкамере сопла. Проведена первичная модификация поверхности мишени кластерно-ионным пучком и сравнение с атомно-ионной полировкой, проведенной на оборудовании фирмы Gatan-PIPS 691. Установлены зависимости между энергией кластерного пучка, дозой и среднеквадратичной шероховатостью поверхности (R_q). В результате установлена связь между дозой облучения, энергией кластерных ионов и рельефом (шероховатостью) обработанных образцов.

Исследования структуры поверхности проводились на сканирующем зондовом микроскопе NT-MDT IntegraHD. На основании полученных данных установлено, что необходимо выполнять фильтрацию кластерно-ионного пучка по массе для исключения мономерной составляющей. Это позволит уменьшить значение R_q в области нанометровых неровностей в несколько раз и устранил прямое влияние ионов мономеров на подповерхностный слой. Также необходимо проводить нейтрализацию ионного потока, что позволит обрабатывать непроводящие образцы и может повысить качество обработанной поверхности.

1. N. Toyoda, T. Hirota et al // IEEE Transactions on magnetics, Vol. 45, No. 10

2. A. E. Zarvin, N. G. Korobeishchikov et al. // Eur. Phys. J. D, 2008. Vol. 49, P. 101.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАГЕНТОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ДЕЭМУЛЬГАТОРОВ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

С. В. Штыков

Тюменский государственный университет

В настоящее время средняя обводненность нефти по России превышает 80%. Без применения специальных реагентов, деэмульгаторов, получение товарной обезвоженной нефти на большинстве месторождений невозможно. Существующая в данный момент мировая практика эмпирического подбора составов деэмульгаторов для нефти конкретного химического состава устарела и не может обеспечить стабильной безаварийной подготовки тяжелых нефтей. Необходимо внедрение в практику разработки композиционных реагентов новых экспериментальных методов. В данной работе обосновывается перспективность использования для этой цели метода оптической спектроскопии, который позволяет получить представление о химическом составе реагента и проследить взаимосвязь между его деэмульгирующей эффективностью и наличием в составе его молекулы тех или иных функциональных групп.

Проведенные данным методом исследования показали, что деэмульгаторы по их спектрам в видимой области можно условно разделить на 2 группы: имеющие пик поглощения ароматических групп и не имеющие такового. Молекулы входящих в состав нефти природных эмульгаторов сильно взаимодействуют с ароматическими растворителями, поэтому включение в товарную форму деэмульгаторов реагентов, имеющих ароматические группы в составе молекулы, увеличивает его эффективность. Наличие в реагентах связанных О-Н групп, указывает на способность реагента образовывать водородные связи, что будет способствовать повышению его эффективности за счет более высокой поверхностной активности на границе раздела нефть-вода. Наличие большого количества карбонильных групп у некоторых реагентов, в составе которых присутствуют свободные радикалы, также повышающие энергию взаимодействия реагентов с компонентами водонефтяной эмульсии, а, следовательно, и его активность.

Таким образом метод оптической спектроскопии позволяет направленно отбирать для композиционных деэмульгаторов реагенты с необходимыми группами.

Научный руководитель – д-р физ.-мат.наук, проф. Л. П. Семихина

СИНТЕЗ ЛЮМИНОФОРОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ГРАНАТОВ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

А. А. Юсуф

Новосибирский государственный университет

В последние годы быстрыми темпами развиваются светодиодные приборы с люминофорным преобразованием, используемые в быту (светильники, LED дисплеи), в медицинских (противоопухолевая терапия и рентгеновская диагностика) и научных целях (лазеры, регистрационные датчики). Светоизлучающие диоды фиолетового и ультрафиолетового диапазонов излучения, используемые совместно с фотолюминофорами на основе редкоземельных гранатов, представляют значительный интерес для получения белого цвета, основных цветов телевизионных стандартов [1].

Светодиоды, используемые в современных LED дисплеях, имеют провал спектра в зеленой области, что негативно сказывается на качестве выдаваемого изображения. Чтобы восполнить этот провал, необходимо использовать люминофоры на основе редкоземельных гранатов. Использование таких люминофоров является важным условием для изготовления светодиодов с оптимальными световыми характеристиками. Однако синтез люминофоров проходит при высоких температурах в районе 1650 °С, приводящих к спеканию порошка, что осложняет технологию получения люминофора с зерном нужного размера, так как при этом нужны помол и сепарация.

Для достижения нужного результата проведены опыты при повышенном давлении смеси газов 95% азота и 5% водорода. В ходе работы собрана установка синтеза под давлением, на которой при заданной температуре и выдержке по времени получен люминофор без образования спека и провала в зелёной части спектра излучения.

Исследования качества полученных образцов проведены методом рентгенографического фазового анализа (РФА), количественный и элементный анализ – по методу энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDS). Синтезированные люминофоры охарактеризованы: определен их фазовый состав, распределение по размерам частиц в порошке. Описаны цветовые характеристики образцов.

1. Технология материалов и изделий электронной техники. Технология люминофоров и люминесцентных ламп, Москва РХТУ, 2005.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Е. Н. Галашов, А. Е. Зарвин

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 57.088.1

РАЗРАБОТКА БИОСЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ НА ОСНОВЕ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Н. С. Бажанова

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Потребность в простых в экспериментальном отношении, недорогих, чувствительных и селективных методах анализа, обеспечивающих быстрое выявление биомолекул в образце, обусловлена фундаментальными и практически задачами современной науки. Биосенсорные устройства – системы, сочетающие в себе перечисленные качества. В основе биосенсоров лежит процесс специфического распознавания анализируемых молекул. Распознающий элемент может реагировать непосредственно на присутствие анализируемого компонента или генерировать сигнал, функционально связанный с содержанием этого компонента.

Целью данной работы является разработка биосенсоров на основе пористых материалов с электрической и/или электрохимической детекцией специфического сигнала биополимеров.

В качестве пористого материала для биосенсорного элемента исследовали пористые полимерные пленки нейлона-6 двух типов: содержащие молекулярные отпечатки биополимеров, а так же без отпечатков. Молекулярные отпечатки образуются при добавлении белка в раствор полимера в 2,2,2-трифторэтанол, который после высушивания формирует пленки, выступающие в качестве сенсорного элемента.

В ходе работы оптимизирована методика воспроизводимого получения пленок с заданными характеристиками. Установлено, что доля пороформирующего агента не должна превышать 10% (оптимальная – 3%), а толщина пленки 30 мкм.

Проведено исследование молекулярно-импринтированных полимеров с помощью трех различных подходов: линейная (ЛВ), циклическая (ЦВ) и импульсная вольтамперометрия (ИВ). Установлено, что оптимальной для достоверного детектирования многократной сорбции/десорбции белка на поверхности является амплитуда напряжения ~10 В и длительность импульса 1500 мс.

Показана принципиальная возможность создания электрохимического биосенсора для детекции белка (на примере БСА) на основе молекулярного импринтинга с использованием импульсной вольтамперометрии.

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

ЭФФЕКТ ЗАХВАТА ТЕРМОНЕДОСТИЖИМОГО ВОЗБУЖДЕННОГО СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ В «ДЫШАЩИХ КРИСТАЛЛАХ», ВСТРОЕННЫХ В ПВХ МАТРИЦУ

И. Ю. Барская

Международный томографический центр СО РАН
Новосибирский государственный университет

Полимерно-цепочечные комплексы «дышащих кристаллов» состоят из последовательно чередующихся фрагментов гексафторацетиацетона меди(II) ($\text{Cu}(\text{hfac})_2$) и стабильных нитронилнитроксильных радикалов (L^{R}). Эти соединения обладают термо- и фотопереключаемыми свойствами во многих аспектах сходными с классическим спиновым кроссовером. В зависимости от внешних условий они могут находиться в двух различных спиновых состояниях: слабосвязанном (при высоких температурах) и сильносвязанном (при низких температурах). Недавно было обнаружено, что слабосвязанное состояние также может наблюдаться при гелиевых температурах при облучении образца светом; система в течение нескольких часов может оставаться в этом метастабильном слабосвязанном состоянии. Одним из главных препятствий на пути детального изучения «дышащих кристаллов» является крайне высокая оптическая плотность в УФ-видимом диапазоне, а также перекрывание полос поглощения основного и возбужденных состояний. Ранее эта проблема была частично решена при помощи специального способа приготовления образцов (замороженная смесь измельченных кристаллов и глицерина), однако образцы сохраняли свои свойства не более чем в течение дня. В данной работе мы предлагаем новый подход к приготовлению образцов: синтез кристаллов происходит в поливинилхлоридной матрице, что позволяет получить тонкую гибкую пленку, пригодную для эффективного облучения светом. Мы исследовали два представителя «дышащих кристаллов», встроенных в поливинилхлоридную матрицу, с температурой спинового перехода $\sim 90 \text{ K}$ и $> 300 \text{ K}$, провели сравнительный анализ их свойства со свойствами их кристаллическими аналогами. Также мы наблюдали LIESST эффект в образцах нового типа, выявили его особенности. Кроме того, мы рассмотрели влияние температуры спинового перехода на глубину конверсии светопереключения и скорости релаксации.

Эта работа выполнена при поддержке РФФИ (12-03-33010, 11-03-00158) и Гранта Президента РФ (МК- 1662.2012.3, МК- 1165.2012.3)

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

КИНЕТИКА ПИРОЛИЗА И МЕХАНИЗМ ГОРЕНИЯ БИОТОПЛИВ

Д. Д. Безматерных

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

На данный момент проблема распространения лесных стихийных пожаров является актуальной. Хвойные леса распространены на территории России, поэтому представляется важным вопрос о предсказании распространения и предотвращении пожара. Кроме того, изучение кинетики и механизма термического разложения древесины интересно в связи с возможным применением этих знаний для производства биотоплива.

Целью данной работы было получение экспериментальных параметров горения и термического разложения хвои, необходимых для разработки модели распространения пожара в лесу. В качестве объекта исследования был выбран высушенный опад хвои сосны.

В данной работе были изучены структура (профили концентраций и температуры) диффузионного пламени при горении слоя хвои при низкой и высокой скорости ветра, а также определены кинетические параметры 1-ой и 2-ой стадии реакции термического разложения хвои в инертной и окислительной атмосфере.

Для определения скорости пламени по слою хвои использовалась видеосъемка. Эксперименты проводились в специально разработанной камере сгорания. Методами микротермопар и масс-спектрометрии были получены зависимости температуры в слое хвои от времени и профили концентраций продуктов горения.

Исследование кинетики термического разложения проводилось методом динамического масс-спектрометрического термического анализа. Были рассчитаны значения энергии активации (E_a) и частотные факторы (k_0) продуктов, образующихся в результате пиролиза. Показано, что первая стадия пиролиза – стадия образования летучих продуктов разложения, в окислительной и инертной атмосфере происходит одинаково.

Полученные данные могут быть использованы при разработке модели низового пожара.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ЭВОЛЮЦИЮ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ СПИН-КОРРЕЛИРОВАННЫХ ИОН-РАДИКАЛЬНЫХ ПАР

А. О. Бессмертных

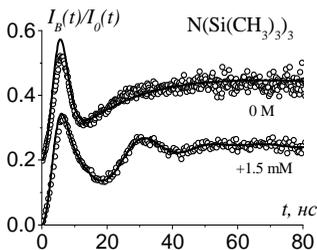
Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

При действии ионизирующего излучения на растворы создается ансамбль ион-радикальных пар (ИРП), электронные спины партнеров каждой из которых коррелированы. Переходы между синглетным и триплетным спиновыми состояниями ИРП отражаются на кинетике рекомбинационной флуоресценции раствора в виде осцилляций (квантовых биений). Химическая реакция одного из партнеров меняет магнитное окружение неспаренного электрона, что влияет на спиновую эволюцию ИРП. Таким образом, наблюдение за квантовыми биениями дает возможность измерения скорости такой реакции.

Этот подход к измерению скоростей ион-молекулярных реакций был реализован на примере реакции образования катион-радикала (КР) *трис*(триметилсилил)амин в облученных алкановых растворах. Для наблюдения за спиновой эволюцией ИРП применен метод времязрешенного магнитного эффекта (ВМЭ). Метод ВМЭ основан на анализе отношения кинетик рекомбинационной флуоресценции в ненулевом и нулевом магнитных полях, $I_B(t)/I_0(t)$. Флуоресценция регистрировалась с использованием наносекундного рентгеновского флуориметра, разработанного в ИХКГ СО РАН.

Для примера, на рисунке показано, как изменяется кривая ВМЭ раствора гептаметилнона в *n*-гексане (верхняя кривая) при добавлении *трис*(триметилсилил) амина (нижняя кривая). Согласие между экспериментальными (O) и расчетными (линия) кривыми достигается при значении константы скорости реакции образования КР амина около $1.5 \cdot 10^{10}$ л/(моль·с), что приблизительно соответствует константе скорости реакции, протекающей при первом же контакте реагентов.



Научный руководитель – д-р физ.-мат.

наук В. И. Боровков

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ГЛИЦИНА

С. С. Брагин

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

Согласно современным представлениям, протекание тех или иных биологических процессов во многом обусловлено взаимодействием воды с биологическими объектами, находящимися в ней. Молекулы воды вблизи растворённых молекул определяют функционирование последних, при этом свойства самих молекул воды (так называемых гидратирующих молекул) могут значительно отличаться от свойств молекул объёмной воды. Построение полной картины механизмов взаимодействия растворённых молекул с молекулами гидратирующей воды далеко от завершения, но без неё корректное описание механизмов биологических процессов представляется затруднительным.

В нашей работе мы исследовали водные растворы глицина. Глицин интересен не только как модельный объект, он также выполняет важную биологическую функцию: известно, что глицин стабилизирует структуру белка, при этом считается, что это происходит в результате изменения свойств воды, а не за счёт прямого взаимодействия с белком.

Исследования проводились методами комбинационного рассеяния света и рассеяния Мандельштама-Бриллюэна. Исследовался диапазон от ~ 0.1 ТГц до ~ 10 ТГц. В данном частотном диапазоне наблюдается релаксационный отклик, который в случае жидкости с водородными связями связан с перестройкой водородных связей, а также колебательный отклик сетки водородных связей, в частности, поперечные и продольные колебания водородных связей в воде (≈ 2 и ≈ 5 ТГц соответственно).

В работе были получены спектры растворов при комнатной температуре ($25\text{ }^{\circ}\text{C}$) и близкой к кипению воды ($85\text{ }^{\circ}\text{C}$). Для каждого значения температуры измерялись спектры растворов различной концентрации. На основании анализа полученных спектров определены особенности динамики молекул глицина и гидратирующей воды и её температурной и концентрационной зависимости.

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

ДИНАМИКА АДсорбЦИИ ВОДЫ СЛОЕМ СВОБОДНО ЛЕЖАЩИХ ГРАНУЛ АЛЮМОФОСФАТА FАM-Z02 И СИЛИКАГЕЛЯ FUJI RD

И. С. Гирник

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

Адсорбционные термотрансформаторы (АТТ) позволяют преобразовывать низкопотенциальную теплоту и использовать её для кондиционирования воздуха и обогрева помещений [1]. Целями данной работы являются: а) построение оптимальных циклов АТТ для адсорбентов FАM-Z02 и FUJI RD, б) исследование динамики адсорбции воды обоими материалами в условиях, близких к изобарическим стадиям цикла АТТ, и в) оценка удельной мощности преобразования в зависимости от размера гранул адсорбента R (0.2-0.25, 0.4-0.5 и 0.8-0.9 мм) и количества его слоев n (1, 2, 4 и 8) на поверхности адсорбера. Гранулы свободно лежали на металлической подложке, а адсорбцию инициировали ее быстрым охлаждением при почти постоянном давлении паров воды над слоем [2].

Полученные данные по равновесию адсорбции использовали для построения циклов адсорбционного кондиционирования. Установлено, что функция $1 - \exp(-t/\tau)$ хорошо описывает кинетические кривые поглощения воды для обоих адсорбентов. 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, практически совпадают кинетики для n слоев гранул 0.4-0.5 мм и $2n$ слоев гранул 0.2-0.25 мм ($n = 1, 2$ и 4).

Из начальной скорости адсорбции воды оценена максимальная удельная холодильная мощность W_{max} , которая может быть получена в испарителе АТТ. Для обоих адсорбентов эта мощность является линейной функцией отношения (S/m) и не зависит от размера гранул и толщины слоя. Наличие этой универсальной зависимости позволяет более осознанно подойти к процессу оптимизации цикла АТТ, оптимальному выбору адсорбента 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.

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

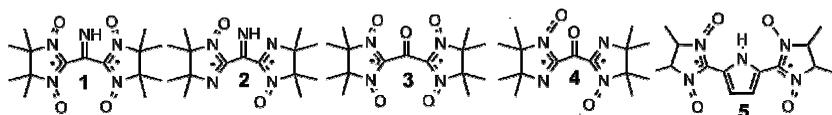
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ НИТРОНИЛ- И ИМИНО-НИТРОКСИЛЬНЫХ БИРАДИКАЛОВ

Д. Е Горбунов

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

Одной из наиболее актуальных задач современной химии является создание и исследование молекулярных магнитных материалов. В отличие от классических магнитных материалов, в основном представленных 3d-металлами и их оксидами, молекулярные магнетики (ММ) могут обладать принципиально новыми свойствами, что открывает широкие возможности для их применения в микроэлектронике и спинтронике.

Комплексы переходных металлов с радикалами и бирадикалами являются наиболее перспективными ММ. Особый интерес представляют бирадикалы с основным триплетным состоянием. В данной работе методами квантовой химии исследованы свойства пяти нитронил-нитроксильных (NN) и имино-нитроксильных (IN) бирадикалов, один из которых (**5**) уже синтезирован нашими коллегами из МТЦ СО РАН.



Структуры всех бирадикалов (**1** – **5**) в триплетном состоянии были оптимизированы методами теории функционала плотности, и для оптимальных геометрий рассчитаны параметры расщепления в нулевом поле (D и E), g -тензоры, изотропные и анизотропные константы сверхтонкого взаимодействия. Для соединения **2** были предсказаны две возможные конформации, ΔG^0 для которых отличается на ~ 1.2 ккал/моль. Для NN бирадикалов (**1**, **3**) предсказаны величины $D \sim 0.16$ см⁻¹ и $E/D \sim 0.1$, т.е. отклонение от аксиальной симметрии не велико. Для IN бирадикалов (**2**, **4**) величины D оказались немного ниже $0.11 - 0.15$ см⁻¹, а искажение аксиальной симметрии выше ($E/D \sim 0.18 - 0.24$). Бирадикал **5** отличается существенно большим расстоянием между радикальными центрами, поэтому величина D для него очень мала – 0.01 ($E/D = 0.04$).

Для бирадикала **5** предсказано наибольшее синглет-триплетное расщепление ($\Delta E_{ST} = -280$ см⁻¹) и основное синглетное состояние, для остальных предсказано триплетное основное состояние ($\Delta E_{ST} = 50-100$ см⁻¹).

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

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ТОМОГРАФИЯ ЭПР ИЗОЛИРОВАННОГО СЕРДЦА КРЫСЫ

А. А. Городецкий

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН

Новосибирский государственный университет

Ишемическая болезнь сердца является одной из основных причин смертности населения в развитых странах. Нарушение коронарного кровоснабжения приводит к недостатку притока кислорода и субстратов метаболизма к миокарду, вследствие чего происходят значительные изменения в микроокружении миокардиальной ткани, которые могут приводить к необратимому повреждению кардиомиоцитов.

Исследование микроокружения миокардиальной ткани необходимо для понимания механизмов повреждения и разработки новых терапевтических подходов в лечении ишемической болезни сердца. Метод ЭПР с использованием парамагнитных зондов позволяет производить функциональные измерения на живых биологических объектах неинвазивным способом, а применение томографических методов предоставляет уникальную возможность для визуализации параметров микроокружения исследуемого объекта.

Целью данной работы являлось визуализация кислотности и оксигенации сердца крысы при локальной ишемии методом томографии ЭПР. Изолированные сердца перфузировали в резонаторе спектрометра ЭПР L-диапазона. Локальную ишемию вызывали путем наложения лигатуры на нисходящую ветвь левой коронарной артерии. Для визуализации рН в качестве спинового зонда был применен разработанный в НИОХ СО РАН рН-чувствительный нитроксильный радикал.

В работе впервые была получена карта рН изолированного и перфузируемого сердца крысы при локальной ишемии, было выявлено значительное закисление ишемической области до значений рН 6.7-6.9. Данные ЭПР томограммы хорошо согласуются с известными из литературы данными, полученными с помощью рН-электродов и спектроскопии ^{31}P -ЯМР. Однако последние методы позволяют измерять лишь локальное значение рН в одной точке. Несомненным преимуществом метода функциональной томографии ЭПР, является возможность получения карты рН неинвазивным способом.

Научный руководитель – канд. хим. наук Д. А. Комаров

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СИНТЕТИЧЕСКИХ ФОСФОЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

А. А. Дмитриев

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

Фосфолипидные мембраны являются удобной модельной системой, исследование которой позволяет понять свойства, структуру и участие в клеточном метаболизме биологических мембран. Наиболее исследованным процессом, возникающим при изменении некоторых параметров системы (например, температуры или давления), является основной фазовый переход. Мембрана при этом переходе меняет одно из двух состояний (упорядоченное (gel-фаза) или неупорядоченное (fluid-фаза)) на другое. Фазовый переход считается переходом псевдо-первого рода. Несмотря на большое разнообразие работ, сделанных по его исследованию, многое еще остается не изученным. Например, одной из актуальных задач является исследование связи динамического перехода в мембранах с основным фазовым переходом.

Данная работа посвящена исследованию фазового перехода в 5-ти фосфолипидных мембранах DPPC, POPC, DOPC, DLPC и PC24. Исследование проводилось методом комбинационного рассеяния света (КРС). Были измерены спектры КРС для фосфолипидов, растворенных в воде, в нескольких спектральных диапазонах, соответствующих колебаниям различных групп атомов и колебаниям мембраны как целого. Были определены температурные зависимости отношения пиков антисимметричной С-Н моды к симметричной С-Н моде, зависимости отношения интегральных интенсивностей линий С-С trans колебаний и С-Н колебаний. Также были найдены температурные зависимости частот низкочастотных пиков, соответствующих колебаниям мембраны как целого.

В работе показано, что отношение интенсивности С-С trans моды к интенсивности С-Н моды практически не зависит от типа липида и может считаться универсальным параметром, определяющим переход. Поведение отношения антисимметричной С-Н моды к симметричной С-Н моде так же, как поведение 2-й колебательной моды, позволило описать систему при приближении к основному фазовому переходу.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛАМЕНИ МЕТАНА ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ДАВЛЕНИЯХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

А. М. Дмитриев

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

Сжигание углеводородных и альтернативных топлив остается ключевой технологией получения энергии в обозримом будущем, поэтому особое значение представляет знание физико-химических механизмов горения углеводородов и альтернативных топлив в условиях, приближенных к реальным процессам в печах, камерах сгорания двигателей и других аппаратах, в которых, как правило, давление выше атмосферного. Создание надежных механизмов химических реакций горения невозможно без соответствующих экспериментальных исследований, проведенных в условиях повышенных давлений. Таким образом, одной из важнейших проблем разработки химических механизмов горения является создание соответствующих экспериментальных методик.

Цель данной работы заключается в разработке методики изучения структуры углеводородных пламен при давлениях выше атмосферного.

В рамках этой работы создана система для стабилизации пламени горючей газовой смеси на плоской горелке при давлениях от 1 до 5 атм. В качестве тестового объекта изучено стехиометрическое пламя метана ($\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$), стабилизированное на плоской горелке при давлениях 3 и 5 атм. Методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МПМС) измерены профили мольных долей реагентов, основных продуктов и некоторых промежуточных соединений, в том числе радикалов Н и ОН. Измерен профиль температуры пламени с применением термопарной методики. Проведён сравнительный анализ полученных профилей мольной доли соединений с данными компьютерного моделирования на основе имеющегося механизма реакций горения для этой системы (GRI 3.0). Показана применимость метода МПМС для измерения структуры углеводородных пламен при давлениях до 5 атм.

Работа выполнена при поддержке РФФИ по гранту № 13-03-00823

Научные руководители: канд. физ.-мат. наук Д. А. Князьков,
канд. физ.-мат. наук Т. А. Большова

РАЗРАБОТКА ПОРОШКОВОГО ПОЛИЭТИЛЕНА ДЛЯ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ДАЛЬНОГО ДИАПАЗОНА

Л. А. Жукас

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Аналогично тому, как бромид калия (KBr) используется для изготовления таблеток с изучаемым образцом для исследований последнего в среднем ИК-диапазоне ($4000-400\text{ см}^{-1}$), полиэтиленовый (ПЭ) порошок используется с данной целью для дальнего ИК-диапазона ($400-40\text{ см}^{-1}$). Широкая применимость этого материала обусловлена его химической инертностью и отсутствием интенсивных линий поглощения во всей дальней ИК-области. Однако, несмотря на то, что ПЭ как материал прозрачен в данной области, пропускная способность таблетки, изготовленной из порошкового ПЭ, сильно зависит от длины волны зондирующего излучения: с уменьшением длины волны коэффициент пропускания ПЭ таблетки падает практически до нуля. Нагревание таблетки в процессе ее изготовления до температур, выше температуры плавления ПЭ, позволяет существенно увеличить коэффициент пропускания таблетки, но данный метод применим только к термически стойким соединениям.

В данной работе были синтезированы 8 типов порошкового полиэтилена, существенно отличающихся значением средних размеров частиц. Были измерены спектры данных образцов в дальней ИК-области, что позволило обнаружить обратную корреляцию между средним размером частиц и пропускной способностью соответствующих таблеток ПЭ. Мнимая часть эффективного показателя преломления исследуемых образцов описывается методом масштабной инвариантности, что указывает на рассеяние падающего излучения на гранулах ПЭ как на основной эффект, ограничивающий пропускную способность таблеток ПЭ. На основе полученных данных показано, что порошки ПЭ со средним размером частиц меньшим или равным 4 мкм, пригодны для формирования таблеток для дальнего ИК-диапазона без необходимости их плавления в процессе приготовления.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер

ФОТОИНДУЦИРОВАННЫЕ МОДИФИКАЦИИ БЕЛКОВ ХРУСТАЛИКА

Е. А. Зеленцова

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск

УФ-излучение может играть большое значение в процессах старения хрусталика и образования катаракты. Основными хромофорами хрусталика человека являются кинуренин и его производные, выполняющие роль молекулярных УФ-фильтров и защищающие ткани глаза от УФ-повреждений. Однако, данные соединения обладают небольшим выходом реакционно активных интермедиатов, которые могут реагировать с белками хрусталика, модифицируя их. С возрастом данные модификации могут накапливаться и приводить к необратимым изменениям в структуре белков, таким как окрашивание, потеря водорастворимости, образование высокомолекулярных агрегатов. Целью данной работы было установление модификаций белков хрусталика, образующихся в ходе реакций с фотовозбужденными УФ-фильтрами.

В работе был проведен анаэробный фотолиз основных структурных белков хрусталика (α -кристаллинов) в присутствии кинуреновой кислоты – продукта термического разложения кинуренина.

Биохимический анализ показал, что результатом взаимодействия кристаллинов с фотовозбужденной кинуреновой кислотой является уменьшение содержания исходных триптофановых и тирозиновых аминокислотных остатков по двум предполагаемым каналам: (1) отрыв концевого пептида (1-13) от α В-кристаллина в «шарнирной точке», а также (2) образование конечных продуктов окисления триптофана и/или тирозина, поглощающих в диапазоне 300-400нм.

Облучение данных образцов в присутствии основных антиоксидантов хрусталика, аскорбиновой кислоты или глутатиона, показало, что аскорбиновая кислота препятствует появлению фотоиндуцированных модификаций, являясь эффективным тушителем триплетного состояния, тогда как глутатион лишь несколько замедляет модификацию белков. Данное исследование показало, что реакции фотовозбужденных кинуренинов могут давать вклад в накопление необратимых пострасляционных модификаций белков хрусталика, а аскорбиновая кислота является эффективным антиоксидантом, препятствующим фотоиндуцированным модификациям кристаллинов.

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

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДИМЕРОВ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ВОДЕ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С ХОЛЕСТЕРИНОМ

М. В. Зеликман

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

Глицирризиновая кислота (ГК) широко используется в медицине. Считается, что она может способствовать транспорту слаборастворимых лекарственных молекул, образуя с ними ассоциаты по типу хозяин-гость. Однако, их структура, равно как и природа движущих сил образования ассоциатов, на сегодняшний день неизвестна.

Целью работы является исследование образования димеров ГК в водном растворе, и их агрегатов с молекулой холестерина.

Используя молекулярно-динамическое (МД) моделирование, мы исследовали агрегацию двух молекул ГК в воде и их дальнейшее поведение. Проведено несколько десятков независимых запусков (прогонок) длительностью 30 нс. Взаимодействие исследуемых молекул описывается параметрами, используемыми в работе [1]. Для воды взят потенциал TIP4P-Ew. Размер модельного бокса около 5 нм. Использован NPT-ансамбль с $T=300$ К и давлением 1 бар. Моделирование проводится с помощью пакета GROMACS.

Установлено, что существуют характерные структуры димеров, различающиеся взаимным положением молекул. Стабильность таких структур объясняется более выгодными гидрофобными контактами и появлением водородных связей между молекулами ГК.

Молекулы ГК всегда располагаются в димере компактно, т.е. между ними нет места, куда могла бы поместиться другая молекула, в том числе, молекула воды. Однако между гидрофобными терпеновыми остовами молекул ГК всегда имеется углубление, бороздка, которая может служить готовым местом для присоединения небольшой гидрофобной молекулы-гостя. Добавление молекулы холестерина в раствор показало, что образующиеся ассоциаты из двух молекул ГК и одной молекулы холестерина представляют собой димер ГК с присоединенной к нему молекулой холестерина.

-
1. Monika Höltje et. al., *Biochim. Biophys. Acta* **1511**, 156-167 (2001)

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

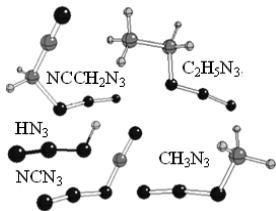
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ АЗИДОВ

С. Г. Зеневич

Кемеровский государственный университет

Органические азиды представляют собой богатые энергией молекулы, которые широко используются как взрывчатые вещества, компоненты ракетного топлива, пиротехнике и биомедицине. Азидная группа (N_3) является одной из самых энергетических функциональных групп. Экспериментальное исследование азидов представляет большие трудности, поэтому прямые квантово-химические вычисления молекулярных физико-химических свойств являются весьма актуальными.

В настоящей работе методами теории функционала плотности, с использованием гибридного функционала B3LYP в TZVP- базисе программного пакета CRYSTAL09_2.0.1 [1] выполнены расчеты геометрии, электронного, колебательного спектров, параметров химической связи, термодинамических функций, для малых молекул HN_3 , CH_3N_3 , NCN_3 , $C_2H_5N_3$, $NCCH_2N_3$, необходимые для понимания их реакционной способности.



**Рисунок 1. Структура
Азидов.**

Параметр/азид	HN_3	CH_3N_3	NCN_3	$C_2H_5N_3$	$NCCH_2N_3$
$R(N1-N2)$, Å	1.1462	1.1515	1.1386	1.1518	1.1464
$R(N2-N3)$, Å	1.2591	1.2496	1.2706	1.2487	1.2591
$R(N3-C)$, Å	1.0197(H)	1.4761	1.3448	1.4888	1.4783
$\angle N1-N2-N3$, °	171.4	173.0	170.2	173.8	172.3
$\angle N2-N3-C$, °	110.1(H)	115.6	117.6	114.9	114.7
$QN1$, e	+0.247	+0.259	+0.405	+0.258	+0.319
$QN2$, e	-0.268	-0.339	-0.329	-0.326	-0.334
$QN3$, e	-0.164	-0.232	-0.318	-0.261	-0.241
QC , e	+0.185(H)	+0.187	+0.573	+0.240	+0.170
ΔH_f , ккал/г	-2373	-1796	-2003	-1447	-1665

Таблица 1. Характеристики органических азидов: структурные, энергетические химической связи.

1. R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N. M. Harrison, I.J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell CRYSTAL09 2.0.1. User's Manual, 2013

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Ю. Н. Журавлев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЭПР С ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛ И СТАБИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

М. Ю. Иванов

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метод электронного парамагнитного резонанса с временным разрешением (ВР ЭПР) является мощным спектроскопическим методом, использующим прямое детектирование сигнала ЭПР парамагнитного образца без использования модуляции магнитного поля. В результате удается добиться высокой чувствительности и временного разрешения, которые ограничены лишь параметрами резонатора и длительностью лазерного импульса, облучающего образец. Таким образом, удается исследовать процессы, происходящие на временах от 100 нс после лазерной вспышки с наносекундным временным разрешением. Данный временной диапазон недоступен для исследования методом стационарного ЭПР, в котором модуляция магнитного поля ограничивает временное разрешение величиной порядка 40 μ s.

В рамках данной работы была модернизирована установка для проведения экспериментов ВР ЭПР. Принципиально изменена схема СВЧ моста. Переход от системы с «двойным детектированием» с помощью диода и миксера к упрощенной системе с одним диодом привел к решению проблемы низкой чувствительности, нестабильности работы и сложности настройки СВЧ моста. Для удобной работы пользователей с помощью пакета fsc2 было написано программное обеспечение. Помимо ВР ЭПР экспериментов, на данной установке возможно проведение стационарного ЭПР с применением синхронного фазового детектора.

Одной из интересных задач с применением ВР ЭПР является исследование формирования и релаксации поляризации триплетных молекул в ионных жидкостях (ИЖ).

Методом ЭПР спиновых зондов была исследована микровязкость двух ИЖ ($[bmim]PF_6$ и $[bmim]BF_4$) в температурном диапазоне 80-290 К. 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. Исследовано влияние неравномерного замерзания ИЖ на формирования спиновой поляризации триплетной молекулы.

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

ЭПР СПИН-МЕЧЕНОГО ХОЛЕСТЕРИНА В МЕМБРАННЫХ РАФТАХ

М. Э. Кардаш

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Мембранные, или липидные рафты – упорядоченные области липидного бислоя клеточной мембраны. Рафты образуются из смеси холестерина и липидов с различными температурами плавления. Таким образом, одни липиды находятся в жидкой фазе, а другие, агрегируясь с холестерином, в твердой фазе. В рафты встраиваются специализированные белки, которые выполняют такие функции клетки, как передача сигналов и транспорт. Таким образом, липидные рафты играют важную роль в жизни клетки. Однако их структура на молекулярном уровне до сих пор не известна. Чтобы приблизиться к пониманию этой структуры, представляется целесообразным исследовать концентрацию холестерина в рафтах.

Целью данной работы является нахождение локальной концентрации холестерина в смеси с дипальмитоил-фосфатидил-холином (ДПФХ, $T_{пл}$ 41°C) и диолеил-фосфатидил-холином (ДОФХ, $T_{пл}$ -17°C) методом спин-нового эха. Для этого в образец вводится спин-меченый холестерин 3β -ДОКСИЛ-5 α -холестан с молярной концентрацией 0.5%. Сделано несколько серий образцов с различными концентрациями липидов и холестерина. Для каждого образца измерена поперечная релаксация при 77К, и выделен вклад мгновенной диффузии, который пропорционален локальной концентрации спин-меченого холестерина. Из полученных данных можно узнать, при каком соотношении между компонентами тройной смеси рафты образуются и концентрацию холестерина в них.

Проведенные исследования показали:

- В тройных смесях локальная концентрация холестерина возрастает и насыщается при молярной концентрации холестерина ~20%;
- В двойной смеси ДПФХ и холестерина локальная концентрация насыщается до большего, чем в тройной смеси, значения. Этот факт говорит о том, что образование рафтов происходит и в двойных смесях.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Н. П. Исаев

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ АНТИМИКРОБНОГО ПЕПТИДА АЛАМЕТИЦИНА В ЛИПОСОМАЛЬНЫХ И МИЦЕЛЯРНЫХ СРЕДСТВАХ ДОСТАВКИ

М. С. Крестина

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

Антимикробные пептиды относятся к врожденной иммунной системе и распространены как в растительном царстве, так и в животном, где дополняют адаптивную иммунную систему. Они являются перспективными препаратами для практического применения в медицине, так как бактериям сложнее выработать к ним резистентность по сравнению с обычными антибиотиками.

Однако клиническое использование антимикробных пептидов наталкивается на ряд препятствий. Так при внутривенном введении антимикробные пептиды наводняют здоровые ткани, и места заражения достигает только некоторая их часть. Протеазы хозяина расщепляют антимикробные пептиды еще до того, как те достигают места назначения. Включение пептидов в защищенные полисахаридами липосомы и мицеллы значительно увеличивает пребывание пептидов в кровотоке.

Одним из представителей антимикробных пептидов является аламетицин. Данная работа посвящена исследованию растворимости аламетицина в заряженных и незаряженных детергентах и его концентрации в липосомальном растворе. Целью работы была проверка пригодности метода спектрофотометрии (СФМ) для проведения анализа раствора и установление возможности замены заряженного детергента лаурилсульфата натрия (ЛН) на незаряженный п-додецил-β-D-мальтозид (ДМ), ввиду меньшей биологической токсичности последнего.

Исследования проводились с применением методов СФМ и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). СФМ регистрирует как выпавший в осадок аламетицин так и находящийся в растворенном состоянии, поэтому сделать вывод о растворимости аламетицина из СФМ измерений было невозможно.

Из полученных данных следует, что аламетицин растворяется в незаряженном ДМ не хуже, чем в полярном ЛН. Найдена минимально возможная концентрация ДМ для полного растворения аламетицина.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Н. П. Исаев

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ САХАРОВ-КРИОПРОТЕКТОРОВ С МОДЕЛЬНЫМИ БИОЛОГИЧЕСКИМИ МЕМБРАНАМИ

Д. В. Леонов

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

На данный момент известно множество веществ, называемых криопротекторами, которые способствуют сохранению живой клетки в экстремальных условиях (низкая температура, условия дегидратации). Одним из природных криопротекторов является сахароза, которую выделяют некоторые живые организмы, находясь в неблагоприятной среде.

Целью работы является исследование глубины проникновения молекул сахарозы в глубь модельной биологической мембраны при различных концентрациях сахарозы в растворе. На данный момент в литературе происходит оживлённая дискуссия о молекулярном механизме взаимодействия сахаров с мембраной клетки. Согласно одним данным молекулы сахаров непосредственно взаимодействуют с мембраной, образуя водородные связи (гипотеза замещения воды), согласно другим – молекулы сахаров вытесняются с поверхности мембраны (гипотеза вытеснения).

В данной работе исследования велись с помощью ЭПР– спектроскопии методом модуляции стимулированного спинового эха (Electron Spin Echo Envelope Modulation или ESEEM). В работе использовались модельные биологические мембраны, составленные из молекул липида (Дипальмитоилфосфатидилхолин или DPPC) и молекул спин-меченного в различных положениях липида, также в работе использовался спиновый зонд Темпон для калибровочных экспериментов в растворе сахарозы, свободном от мембран. Для разделения взаимодействия спиновой метки с молекулами сахарозы от взаимодействия с остальными молекулами, использовалась дейтерированная сахароза $C_{12}H_3D_{11}(OH)_8O_3$. Концентрация сахарозы в растворах составляла 1Моль/литр, 0,4Моль/литр, 0,2Моль/литр и 0,07Моль/литр. Дейтерирование проводил К. Ю. Федотов. Из лаборатории механизмов реакции ИХКГ. Результаты показали, что молекулы сахарозы не проникают вглубь мембраны, а сконцентрированы вне мембраны, что соответствует гипотезе вытеснения.

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

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДОЛЮ ГЕМИНАЛЬНО РЕКОМБИНИРУЮЩИХ ПАР В РАДИАЦИОННОМ ТРЕКЕ

Г. А. Летягин

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

Изучением взаимодействия ионизирующего излучения с веществом занимаются уже давно. Установлено, что эффект радиации во многом связан со структурой трека ионизирующей частицы. В настоящее время удается надежно определять характерный размер всего трека и оценивать расстояние в геминальных парах (т. е. между ионизованной молекулой среды и выбитым электроном).

Однако интерес представляет и определение расстояния между соседними парами первичных ион-радикалов в области ионизации. Исследование влияния внешнего электрического поля на кинетику рекомбинации ион-радикалов (электрическое поле конкурирует с полем противоиона, вызывая разбегание ионов пары) не позволяет оценить это расстояние. Существование спиновой корреляции в геминальных парах ион-радикалов позволяет использовать магнитное поле для оценки их доли среди всех рекомбинаций. Эта доля связана с распределением ионных пар в области ионизации, но также неоднозначным образом.

В данной работе предложена и реализована идея комбинированного подхода: регистрация магнитного эффекта при наличии внешнего электрического поля. В достаточно плотном треке, по мере дрейфа ионов в электрическом поле должна уменьшаться и доля рекомбинаций геминальных пар.

Целью данной работы было проверить идею этого подхода на примере раствора дифенилацетилена в диглиме. Было обнаружено, что влияние электрического поля на магнитный эффект проявляется как увеличение доли перекрестных рекомбинаций. Этот результат дает возможность, с привлечением компьютерного моделирования, приблизиться к определению расстояния между соседними парами первичных ион-радикалов и изучению микроструктуры трека в органической среде.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОВОЗБУЖДЕНИЯ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРОВ И ФУЛЛЕРЕНОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОГО СПИНОВОГО ЭХА

Е. А. Лукина

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

Композиты проводящих полимеров и производных фуллерена используются в органической фотовольтаике в качестве активного слоя фотоэлементов. Под действием света в них происходит разделение зарядов, в ходе которого на границе раздела фаз донор-акцептор образуется промежуточное состояние – спин коррелированная радикальная пара, называемая состоянием с переносом заряда [1]. Такие состояния можно изучать методом электронного спинового эха вне фазы. Ранее этот метод применялся в основном для изучения реакций фотосинтеза. После импульса лазера, генерирующего радикальные пары, последовательность СВЧ импульсов $\pi/4$ - τ - π формирует сигнал эха вне фазы. Фурье преобразование спада сигнала эха вне фазы по времени позволяет определить величины дипольного и обменного взаимодействия. Из величины дипольного взаимодействия D можно вычислить среднее расстояние между радикалами в паре r по формуле $D = -3g_1g_2\beta^2/2r^3$, где g_1 , g_2 – g -факторы радикалов пары, β – магнетон Бора [2].

Удалось измерить сигналы эха вне фазы в композитах донорно-акцепторного проводящего полимера PCDTBT и производных фуллерена PC₆₀BM и PC₇₀BM при температуре 80 К. Были измерены спады сигнала эха вне фазы при увеличении задержки между СВЧ импульсами и выполнено преобразование Фурье. В предположении равно нулю обменного взаимодействия определены величины дипольного взаимодействия и рассчитаны средние расстояния между радикалами в паре для композитов PCDTBT/PC₆₀BM и PCDTBT/PC₇₀BM: 4,6 нм и 6,7 нм соответственно. Для композита PCDTBT/PC₇₀BM была измерена зависимость сигнала эха вне фазы от задержки между импульсом лазера и последовательностью СВЧ импульсов, откуда было оценено время жизни спиновой корреляции в радикальной паре 15,3 мкс.

-
1. M.N. Uvarov, L.V. Kulik, *Appl. Magn. Res.*, 2013, 44, 97-106
 2. A.J. Hoff, P. Gast et al., *Spectrochim. Acta*, 1998, 54, 2283-2293
- Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Л. В. Кулик

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПАДА АНИОН-РАДИКАЛОВ
ФТОРБЕНЗОЛОВ В ПОЛЯРНЫХ СРЕДАХ**

Д. Е. Машканцев

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН

Новосибирский государственный университет

Анион-радикалы (АР) фтораренов – это интермедиаты важных с синтетической точки зрения реакций нуклеофильного замещения по типу $S_{RN}1$ и восстановительного дегалогидирования, ключевой стадией которых является мономолекулярный распад АР с отщеплением фторид-иона. Поэтому особенности электронного и пространственного строения АР фтораренов представляют большой интерес.



Основной задачей данной работы является теоретическое исследование механизма и кинетики мономолекулярного распада АР ряда фторбензолов (Схема 1) в полярных средах на основе исследования поверхностей потенциальной энергии (ППЭ):



В рамках поставленной задачи нами проведены расчеты АР и их нейтральных предшественников в газовой фазе и с учетом растворителя (тетрагидрофуран). Использовали теорию функционала плотности (метод САМ-ВЗЛУР/6-31+G*) и континуальную модель растворителя РСМ.

Для нейтральных предшественников рассчитаны величины адиабатического сродства к электрону в газовой фазе и растворе, результаты сопоставлены с экспериментальными данными [1, 2] по захвату электрона. Учет растворителя улучшает согласие с экспериментом.

Изучены ППЭ АР моно-, 1,4- и 1,2-ди-, а также гексафторбензола, найдены пути и оценены величины барьеров их мономолекулярного распада АР. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными [1,2]. Показана важность анализа строения ППЭ для описания относительной способности рассмотренных АР к отщеплению фторид-иона и региоселективности процесса.

1. S. Higashino, A. Saeki, K. Okamoto, S. Tagawa and T. Kozawa // J. Phys. Chem. A, 2010, 114 (31), pp 8069–8074.

2. R. Koester, K. D. Asmus // J. Phys. Chem., 1973, 77 (6), pp 749–755.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук И. В. Береговая

СВЯЗЬ СТРУКТУРЫ ТОНКИХ ПЛЕНОК АМОРФНОГО УГЛЕРОДА С РЕЗУЛЬТАТАМИ ДИАГНОСТИКИ

Н. В. Нагирный, М. Н. Хомяков, С. Ю. Чепкасов
Новосибирский государственный университет
Институт лазерной физики СО РАН, г. Новосибирск

Тонкие пленки аморфного углерода (DLC, a-C, ta-C, a-C:H, ta-C:H) интересны благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая твердость, износостойкость, химическая инертность, хорошие трибологические характеристики, низкий коэффициент отражения света.

В работах Феррари и Робертсона исследованы спектры комбинационного рассеяния аморфного углерода, построена классификация пленок углерода включающая нанокристаллический графит(nc-G), аморфный углерод(a-C) и тетраэдрический аморфный углерод (ta-C), получены зависимости между параметрами КР-спектров и твердостью, модулем упругости, долей sp^3 гибридованных атомов углерода, долей водорода, плотностью пленок и т.д.. Однако для пленок аморфного углерода (a-C) полученные зависимости не позволяют найти однозначной зависимости между параметрами КР-спектров и другими свойствами пленок, что связано с большим количеством вариаций структуры пленки от одного метода синтеза к другому.

В данной работе нас интересует определение структуры пленок аморфного углерода (a-C:H), полученных методом плазмохимического синтеза, и построение зависимостей между параметрами КР-спектров (положение G-пика, ширина на полувысоте G-пика, отношение интенсивностей D и G пиков) и параметрами структуры и свойствами пленки (доля sp^3 гибридованных атомов углерода, твердость пленки, доля водорода в пленке). Что в идеале должно позволить с помощью одной методики спектроскопии комбинационного рассеяния определять все необходимые параметры структуры и свойства пленки.

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

Синтез пленок проводился на установке плазмохимического синтеза "Спутник" в лаборатории экспериментальной физики НГУ методом ионных пучков при давлениях 0,01-1 Па, и энергии ионов 10-500 эВ. Пленки подвергались температурной релаксации в вакуумной камере непосредственно после синтеза.

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

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНИМОСТИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИТИОФЕНА И ПРОИЗВОДНЫХ ДИЗАПЕРИЛЕНА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ФОТОВОЛЬТАИКИ

А. Г. Попов

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

В настоящий момент большой интерес представляют солнечные батареи, созданные на основе органических веществ. Активный слой фотовольтаической ячейки состоит из смеси донорного и акцепторного материалов. Под действием света происходит фотоиндуцированный перенос заряда с молекулы донора на акцептор, с образованием свободных зарядов, дающих вклад в фототок. Наибольшее распространение получили батареи на основе метанофуллеренов и политиофенов, эффективность фотопреобразования света для них составляет 6%. Между тем, активно развивается новый альтернативный подход, направленный на поиск более простых и дешевых акцепторных материалов с небольшим размером молекул.

В данной работе в качестве акцептора для замены фуллерена были синтезированы бензо[*de*]изохино[1,8-*gh*]хинолины, 1,7-диазааналоги перилена. В качестве донора использовался проводящий полимер поли(3-гексилтиофен-2,5-диил), РЗНТ.

Для исследования пленок была сконструирована установка по нанесению тонких пленок методом центрифугирования с различными режимами нанесения образцов.

Были получены микрофотографии пленок, полученных при разных условиях приготовления образцов.

Производные диазоперилена имеет высокую оптическую плотность в видимом диапазоне спектра. Из данных спектров оптического поглощения было определено значение разницы энергий НВМО и ВЗМО, которое составило 2.2 эВ.

Для наблюдений явлений переноса заряда с донора на акцептор были получены спектры ЭПР. Светоиндуцированная линия в ЭПР спектре имеет ширину около 3 Гс и *g*-фактор $g = 2.0023 \pm 0.0001$, поэтому её можно интерпретировать как линию от катион-радикала РЗНТ⁺. Сигнал ЭПР анион-радикала диазоперилена имеет гораздо меньшую интенсивность, вероятно вследствие сверхтонкого расщепления на ядрах азота и водорода.

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

АНТИПЕРЕСЕЧЕНИЯ УРОВНЕЙ – КЛЮЧЕВОЙ ФАКТОР ДЛЯ ПОНИМАНИЯ ПЕРЕНОСА ПОЛЯРИЗАЦИИ В МЕТОДИКЕ SABRE

А. Н. Правдивцев

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Перспективным подходом для повышения чувствительности спектроскопии ЯМР на несколько порядков и для создания непрерывного источника ядерной гиперполяризации является обратимый обмен пара-водорода с комплексом, содержащим катализатор и поляризуемый субстрат (Signal Amplification By Reversible Exchange – SABRE) [1]. Поляризация ядер субстрата в SABRE создается без его химической модификации, поэтому этот процесс, в отличие от каталитического гидрирования пара-водородом, может быть многократно повторен. До настоящего времени не существовало объяснения механизма переноса поляризации с пара-водорода на субстрат. Нами было впервые показано, что перенос поляризации в SABRE обусловлен антипересечениями уровней (АПУ) в скалярно связанных спиновых системах, что позволило полностью объяснить как положения экстремумов, так и знаки поляризации для ранее полученных зависимостей SABRE от напряженности магнитного поля. Кроме того, на созданной нами установке быстрого переключения магнитного поля была изучена зависимость интегральной и мультиплетной поляризации от магнитного поля для целого ряда субстратов и катализаторов. Экспериментально полученные в данной работе полевые зависимости SABRE так же хорошо согласуются с расчетами, выполненными нами в рамках разработанной теоретической модели [2].

Предложенная общая концепция антипересечения уровней позволяет полностью объяснить сложную спиновую динамику многоспиновых систем [2-4], поэтому они являются ключевым фактором при создании гиперполяризации в ЯМР спектроскопии и томографии.

-
1. R. W. Adams et al. *Science* 323 (5922), 1708 (2009).
 2. A. N. Pravdivtsev et al. *ChemPhysChem* 14 (14), 3327 (2013).
 3. A. N. Pravdivtsev et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (35), 14660 (2013).
 4. A. N. Pravdivtsev et al. *Appl. Magn. Reson.* 44 (1-2), 23 (2013).
 5. Финансовая поддержка: РФФИ (грант 14-03-00397), грант Президента РФ МД-3279.2014.2.

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

ИЗУЧЕНИЕ ИЗОТОПИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ $^1\text{H}/^2\text{D}$ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ЛУТИДИНА

К. С. Редькина

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

Роль примеси тяжелого изотопа водорода – дейтерона ^2D , в биологических системах изучена в настоящее время достаточно хорошо. Экстраполяция полученных данных к сильному разбавлению тяжелой воды не позволяет ожидать ощутимых эффектов при снижении концентраций тяжелых изотопов ниже природного уровня. Тем не менее, в последнее десятилетие показано, что природная вода, обедненная тяжелыми изотопами водорода и кислорода, обладает стимулирующим действием на различные биологические объекты и даже лечебными свойствами. Однако физический механизм влияния малых примесей тяжелого изотопа водорода на биологические системы остается неясным. Данная работа исходит из гипотезы о том, что в основе такого влияния могут быть сингулярные свойства веществ в области фазовых переходов второго рода и возникновения критического состояния. Критическое состояние имеет важное практическое значение для технологических процессов, которые в ряде случаев протекают в условиях, близких к критическим параметрам системы.

В настоящей работе исследованы растворы лутидин-2,6/ D_2O и лутидин-2,6/ H_2O вблизи критической точки $\text{T}_{\text{C}1}$ с помощью ЯМР спектроскопии. Для этих систем фазовый переход характеризуется изотопическим эффектом, который проявляется в смещении температуры фазового перехода от $28,35^\circ\text{C}$ до $33,8^\circ\text{C}$, соответственно, однако остаются неизвестными механизмы, приводящие к изотопическому эффекту. Поскольку этот эффект связан с взаимодействиями молекул лутидина и молекул воды, то можно ожидать, что это должно приводить к изменениям химических сдвигов в спектрах ЯМР. Для системы лутидин -2,6 / H_2O расщепление можно оценить по спектральным линиям, относящимся к атомам водорода в позициях Н(В). Оно составляет < 0.05 м.д. Для раствора лутидин -2,6 / D_2O аналогичное расщепление составило 0.2 м.д. Таким образом, имеется изотопический эффект в химическом связывании молекул лутидина и молекул воды.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ДНК-ДУПЛЕКСА МЕТОДАМИ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Е. А. Свиридов

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН

Новосибирский государственный университет

Пространственное строение биологических молекул является краеугольным камнем современной структурной биологии. Различия в свойствах биополимеров определяются не только их первичной структурой, но и заложеной в ней информацией о пространственной форме молекулы (вторичной, третичной и четвертичной структурах). Пространственную структуру биомолекул наиболее часто изучают методами рентгеноструктурного анализа кристалла биополимера в прецизионных условиях или методами ЯМР совместно с методом молекулярной динамики, который проводится с использованием полученных экспериментальных ограничений на расстояния между магнитными ядрами атомов и величины диэдральных углов.

Для уточнения расстояний между удаленными участками биополимера (третичная и четвертичные структуры) используют метод спиновых меток. Нашими коллегами разрабатываются новые спиновые метки для ЭПР-метода PELDOR, которые в перспективе могут существенно расширить границы применимости и позволят проводить эксперимент в физиологических условиях. С целью проверки данных меток был выбран модельный ДНК-дуплекс d(CpApGpCpGpGpCpGpTpG), содержащий спиновые метки, присоединенные линкером к концам цепочек. Для верификации метода необходима информация о трехмерной структуре модифицированного дуплекса, которую необходимо получить альтернативным надежным методом.

Целью настоящей работы является установление пространственной структуры ДНК-дуплекса методами ЯМР, для верификации новых спиновых меток для метода PELDOR. Для этого необходимо изучить структуру не модифицированного дуплекса и сравнить ее со структурой спин-меченного соединения.

В работе проведено исследование температурной зависимости спектров, которое позволило установить оптимальные температурные диапазоны для их записи. Произведено отнесение сигналов нуклеотидных оснований и сахарных остатков в спектрах ЯМР ^1H и соответствующих кросс-пиков в NOESY спектрах для раствора в D_2O .

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

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНО-СПИНОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ХИРАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Д. В. Сосновский

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

Исследование хиральных систем представляет большой интерес. Это связано с тем, 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) и флуоресцентной спектроскопии. 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. Интересно, что в литературе имеется предположение о том, что имеется сильное воздействие хиральных центров на фотопроцессы, связанное с эксиплексом.

В результате проведенного теоретического исследования диады была найдена матрица Грина, описывающая диффузию радикальных центров, и соответствующий схеме химических превращений реакционный оператор. Построена модель движения радикальных центров вблизи стационарного состояния при наличии кулоновских сил. Были получены аналитические выражения для населенностных элементов матрицы плотности, вероятности образования продукта (в кинематическом приближении), вид кривой ХПЯ как функции диэлектрической проницаемости и внешнего магнитного поля. Теоретические зависимости концентрации эксиплекса от времени для двух энантиомеров были сопоставлены с экспериментальными кривыми. 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 ОКИСЛЕНИЯ КАРОТИНОИДОВ ЛУТЕИНА И ЗЕАКСАНТИНА В СОСТАВЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

И. Е. Апанасенко

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Каротиноиды лютеин и зеаксантин играют огромную роль в предотвращении развития глазных заболеваний таких как катаракта и макулярная дистрофия. Они локализируются в макуле сетчатки глаза и защищают ее от повреждающего действия ультрафиолета и активных форм кислорода. Главная проблема их применимости, это химическая нестабильность и абсолютная нерастворимость в воде, и как следствие плохая биодоступность.

В связи с этим были поставленные следующие задачи: (1) повышение растворимости каротиноидов, и (2) исследование их стабильности в реакции с активными формами кислорода и ионами металлов.

Поставленная задача была решена с помощью супрамолекулярных комплексов типа «*гость-хозяин*» – химических систем, связанных в единое целое посредством межмолекулярных (нековалентных) взаимодействий. В качестве гостя используются молекулы каротиноида, в качестве хозяина – молекулы *арабиногалактана* (АГ) или *глицирризиновой кислоты* (ГК). Данные комплексы были приготовлены двумя способами: механохимическим и жидкофазным. Различия их в том, что механохимический синтез позволяет получить комплекс в одну технологическую стадию без использования органических растворителей.

По изменению оптического поглощения растворов показано, что комплексообразование с ГК и АГ приводит к значительному увеличению растворимости каротиноидов.

Измерение кинетик гибели каротиноидов при непрерывном продувании озоном показано, что каротиноид находящийся в комплексе окисляется медленнее. Комплексы с АГ, приготовленные механохимическим способом, обладают большей стабильностью, чем жидкофазные. Стабильность комплексов с ГК не зависит от способа их приготовления.

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

РАЗРАБОТКА ЦИФРОВОГО СТЕТОФОНЕНДОСКОПА

А. Т. Газизов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Медицинский стетофонендоскоп – это устройство, предназначенное для выслушивания внутренних органов человека. Этот прибор, изобретенный два века назад, и в наше время используется при аускультации, являясь незаменим инструментом любого врача. Однако его усиление оставляет желать лучшего, кроме того, акустическому стетофонендоскопу присущи и другие недостатки. Результаты аускультации являются субъективными, так как зависят от опыта и умения врача. Звуки низкой частоты воспринимаются ухом человека тише, чем высокой, в связи с чем, они могут быть не услышаны вовсе, однако именно звуки нижних частот преобладают в сердечной жизнедеятельности и являются важными при аускультации.

Перечисленные недостатки обходит цифровой стетофонендоскоп. На данный момент существуют лишь дорогостоящие приборы зарубежного производства, более того, автору не известны русскоязычные статьи по заявленной проблеме. Таким образом, целью проекта стала разработка цифрового стетофонендоскопа, обладающего хорошими характеристиками и относительно низкой стоимостью.

Разработанный стетофонендоскоп предназначен для выявления звуковой составляющей жизнедеятельности сердца и легких с возможностью выделения интересующих частот. С помощью специального программного обеспечения звук на компьютере визуализируется. Таким образом, врач получает фонокардиограмму, что позволяет немедленно объективизировать данные, полученные при аускультации. В то же время разработанная программа позволяет врачу получить частотный спектр тонов и шумов сердца.

В ходе работы разработан и изготовлен лабораторный макет цифрового медицинского стетофонендоскопа. Проведены первые испытания, показавшие, что прибор надежно разделяет сердечные тоны, а программа работает отлажено. Ведутся работы по усовершенствованию и доработке разработанного макета цифрового стетофонендоскопа в связи с возможностью создания более дешевого аналога по сравнению с существующими устройствами.

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

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ СТЭКИНГ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕСТЕ ОДНОЦЕПОЧЕЧНОГО РАЗРЫВА ДНК-КОМПЛЕКСОВ ОЛИГОНУКЛЕОТИДОВ: МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И ЭКСПЕРИМЕНТ

В. В. Горелов

Институт химической биологии и фундаментальной медицины
СО РАН, г. Новосибирск

Возможность использования метода молекулярной динамики, для прогностического расчета физико-химических свойств нуклеиновых кислот (НК) является актуальной задачей как прикладных, так и фундаментальных исследований. В перспективе компьютерное моделирование позволит создавать новые аналоги и производные нуклеиновых кислот с заранее заданными свойствами. Кроме того, этим методом можно изучать структуру и энергию НК-комплексов, что, в ряде случаев, является нетривиальной экспериментальной задачей.

Ранее была установлена возможность расчета энергии формирования бимолекулярных комплексов олигонуклеотидов. В данной работе исследована применимость метода молекулярной динамики для расчета одного из типов взаимодействий, стабилизирующих двойную спираль ДНК – стэкинг-взаимодействия. Для этого были сконструированы комплексы олигонуклеотидов, со всеми возможными комбинациями нуклеотидов в месте одноцепочечного разрыва (16 пар нуклеотидов). Проведено их исследование методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала и методом молекулярной динамики. С использованием полученных данных определены величины энергий стэкинг-взаимодействия. Среднее значение величин энтальпии, определенные методами термической денатурации и молекулярной динамики составили -12.6 ккал/моль и -8.3 ккал/моль, соответственно. В то же время, определённые экспериментально величины в значительной мере зависят от нуклеотидов, находящихся на стыке дуплексных структур: стандартное отклонение составляет 5.9 ккал/моль. В случае компьютерного моделирования такая зависимость практически отсутствует (стандартное отклонение 1.0 ккал/моль).

Таким образом, метод молекулярной динамики позволяет вычислять энергию стэкинг-взаимодействия в ДНК-комплексах олигонуклеотидов с хорошей точностью. Однако необходимы дополнительные исследования, направленные на повышение точности такого прогностического расчета.

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

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛОСЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗОВАННОЙ (ТАЛОЙ) ВОДЫ

Е.В. Горностаева

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

В течение, по крайней мере, нескольких десятилетий в научной литературе (и особенно широко в средствах массовой информации) обсуждается вопрос о так называемой структуре талой воды – воды полученной из растаявшего льда.

Объединяющим моментом всех имеющихся работ по структуре талой воды является представление, что талая вода сохраняет структуру льда и поэтому её многочисленные физико-химические свойства отличны от свойств не замороженной воды. Однако конкретные экспериментальные данные по изучению структурных свойств талой и не замороженной вод, отсутствуют.

Данная работа посвящена исследованию изменения состояния водородных связей (Н-связей) при нагревании для образцов свежеперекристаллизованной (талой) и исходной воды. Состояние Н-связей (распределение Н-связей по энергиям) в воде является наиболее характерным параметром, который особо чувствителен к её структуре. Наиболее адекватным и однозначным методом, который позволяет получать информацию о состоянии Н-связей является колебательная спектроскопия и, в частности, абсорбционная.

Работа проводилась на стандартном спектрофотометре, а в качестве исследуемых спектральных параметров использовались величины первых моментов и интегральных интенсивностей полосы на длине волны 975 нм.

В результате было установлено, что нагревание образцов талой и исходной (контрольной) вод сопровождается одинаковым изменением спектральных параметров полосы. Это означает идентичность температурных изменений состояния Н-связей, что может быть проинтерпретировано как отсутствие различия структур талой и исходной воды.

Таким образом, в работе впервые получена сравнительная информация о температурных зависимостях состояния (энергии) Н-связей перекристаллизованной и исходной (контрольной) воды и показано, что в пределах экспериментальной погрешности ($\pm 0.5\%$) эти зависимости не различимы.

Научный руководитель – д-р хим. наук Н. Л. Лаврик

ПРИГОТОВЛЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК РАЗНОГО РАЗМЕРА И ИХ ПРОНИКНОВЕНИЕ В ТКАНИ *DROSOPHILA MELANOGASTER*

О. А. Гурова

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

Новосибирский государственный университет

Возможности применения углеродных нанотрубок (УНТ) в биологии и медицине во многом связаны с их наноразмерами, которые позволяют проникать через клеточную мембрану.

Цели данной работы – исследование термических свойств водных суспензий с УНТ и проникновение нанотрубок в биологическую ткань.

В данной работе использовались УНТ, синтезированные CVD методом. Полученные нанотрубки имели длину, превышающую размеры клетки. Укорочение и улучшение устойчивости водных суспензий получено с помощью окисления. УНТ были охарактеризованы методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), инфракрасной и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией (ИКС и РФС), сканирующей и просвечивающей электронной микроскопией (СЭМ и ПЭМ). Были изучены термические свойства структурных и морфологических особенностей водных суспензий.

Внедрение углеродных нанотрубок в ткани личинок дрозофилы особой генотипа *hs-Gal4; UAS-GFP.nls* осуществлялось через питательную среду. Далее личинок облучали ИК – лазером. Нагретые таким образом нанотрубки вызывали реакцию «теплового шока» (ответная реакция клетки на стресс). Через 4 часа наблюдалось свечение GFP-репортера – белка, синтезированного в ответ на «тепловой шок».

В результате окисления были получены УНТ длиной ~ 1.5 мкм, это приблизительно в 100 раз меньше длины исходных нанотрубок. Водные суспензии с укороченными УНТ нагреваются в 3 раза быстрее, чем с длинными (сравнивалась одинаковая массовая доля). При увеличении концентраций УНТ в водной суспензии, видно, что суспензия начинает нагреваться быстрее. Показано, что нанотрубки способны проникать в ткани личинок дрозофилы. При этом укороченные УНТ проникают лучше. Это видно по флуоресцентному сигналу GFP в имагинальных дисках личинок – его нет для длинных УНТ, но есть для коротких.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук А. В. Окотруб,
д-р биол. наук Л. В. Омелянчук

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРОДЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

С. А. Далматова

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

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой свёрнутые в цилиндр графитовые плоскости, то есть поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Благодаря высокой площади поверхности, химической инертности, физической устойчивости и другим уникальным свойствам УНТ используются в гетерогенном катализе, для изготовления конденсаторов с большой удельной мощностью, сенсоров и сверхпрочных и сверхпроводящих материалов.

Данная работа посвящена исследованию электрохимических свойств предварительно окисленных при различных температурах массивов ориентированных углеродных нанотрубок в кислотном и щелочном электролитах. Целью работы было исследование емкости и импеданса электродов, а также сравнение разных методик измерения.

Исследования проводились с применением методов циклической вольтамперометрии (ЦВА) и импедансометрии. Было показано, что после отжига площадь вольтамперограммы изменилась, а значит, изменилась и ёмкость массива УНТ. Это объясняется присоединением кислородосодержащих функциональных групп и уменьшением количества пиролитического углерода в результате отжига.

В работе была освоена методика изготовления суперконденсаторов. С помощью ЦВА и импедансометрии были определены ёмкостные характеристики суперконденсаторов и УНТ на кремниевой подложке в различных электролитах. Было показано, что увеличение температуры отжига приводит к увеличению удельной электрической ёмкости электрода.

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

ИЗМЕРЕНИЕ ИНТЕРФРАКЦИОННЫХ ТРАНСЛЯЦИОННЫХ ОШИБОК ПОЛОЖЕНИЯ МИШЕНИ ПРИ РАДИОТЕРАПИИ РАКА ЛЕГКИХ ПОД КОНТРОЛЕМ СИСТЕМЫ АВС

М. А. Ефремов

Новосибирский научно-исследовательский институт патологии кровообращения им. академика Е. Н. Мешалкина Министерства здравоохранения Российской Федерации

Новосибирский государственный университет

В настоящее время активно ведутся разработки адаптивных методик облучения подвижных мишеней с одновременной защитой окружающих здоровых тканей. Существуют способы контроля положения мишеней, такие как облучение под контролем рентгеновского изображения анатомических структур пациента и/или с использованием рентгенконтрастных внутритканевых маркеров в реальном времени. Кроме того, известны способы учета респираторного цикла по движению поверхности тела нерентгеновскими методами. Все они имеют существенные ограничения для применения в клинической практике – либо они имеют недостаточную разрешающую способность, либо приводят к значительной лучевой нагрузке на здоровые ткани. В конвенциональной радиотерапии объем переоблученной здоровой ткани может превышать объем мишени на порядок, что приводит к тяжелым лучевым реакциям и поздним осложнениям. Один из современных методов облучения подвижных мишеней – контроль задержки дыхания на вдохе, реализуемый системой Active Breath Control (ABC), позволяющий воспроизводить положение анатомических структур средостения и легких. Существует ряд работ, посвященных пространственным ошибкам данного метода, но все они либо определяют интрафракционные отклонения положения мишени, либо используют другие методы измерения.

Целью данной работы является измерение точности воспроизведения положения мишени при РТ немелкоклеточного рака легкого под контролем АВС. Смещения определены путем совмещения изображений референсных анатомических структур на уровне мишени.

Измерены систематические и случайные интерфракционные смещения мишени и на основании этого созданы рекомендации по выбору зоны облучения для применения в клинической практике.

1. О. Ю. Аникеева, Стереотаксическая конформная лучевая терапия с использованием активного контроля дыхания при лечении немелкоклеточного рака легкого, Сиб. онк. журнал, № 5 (53).

Научный руководитель – канд. мед. наук О. Ю. Аникеева

СОЗДАНИЕ ТРУБЧАТЫХ МИКРОЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ МЕМБРАННОГО ПОТЕНЦИАЛА КЛЕТОК

А. И. Иванов

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

Изучением электрической активности нервных клеток, занимаются достаточно давно, однако до сих пор не удалось разработать инструментарий получения электрических сигналов с живых клеток, полностью удовлетворяющий требованиям исследователей. В качестве альтернативы существующим инструментам, мы предлагаем использовать двумерный массив вертикальных микротрубок свернутых из полупроводниковых GaAs/InGaAs пленок. Основы метода изготовления разработаны в ИФП СО РАН [1, 2, 3].

В работе оптимизирован процесс формирования массива вертикальных полупроводниковых микротрубок диаметром 2 мкм и длиной 40 мкм, с каналом для жидкости и тонкой стенкой. Благодаря совместимости с полупроводниковыми технологиями достигается массовость изготовления. Малая толщина стенки трубки (5-15 нм) минимизирует механическое повреждение клетки, а поскольку трубка полая и имеет жидкостной канал – улучшается измерение внутри-клеточных электрических сигналов. Предложен и реализован способ подъема трубок с использованием выталкивающей силы, действующей на трубки, заполненные лёгкой жидкостью. Для обеспечения устойчивости и прочности массива трубок, нижняя половина трубок-электродов интегрирована в полимерную плёнку. Работа (свойства) сформированных трубок-электродов продемонстрирована при измерении мембранного потенциала клетки.

1. Prinz V. Ya. et al, Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays. // Physica E, 2000, v. 6, (1-4), p. 828-831;

2. Принц В. Я., Голод С. В, Принц А. В, Полая игла в интегральном исполнении и ее изготовления, Патент России №2341299, 2008;

3. Принц А. В. Метод формирования массива длинных вертикальных полупроводниковых микротрубок // Нано– и микросистемная техника, 2013, № 10.

Научный руководитель – А. В. Принц

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАЗДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ДНК И РНК ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЕ МЕТОДОМ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА

Л. Е. Кальнеус
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор»
Новосибирский государственный университет

Метод капиллярного электрофореза на сегодняшний день с успехом применяется для анализа разнообразных веществ, медицине, криминалистике, биохимии [1,2]. Данный метод имеет ряд преимуществ, в том числе экономичность, экспрессность анализа и высокую точность.

Целью данной работы являлась разработка, и оптимизация методики разделения фрагментов молекул ДНК размером от 50 до 3000 пар нуклеотидов с использованием системы капиллярного электрофореза «Капель 105М» российского производства. Данная методика является более экономичной, альтернативной используемых зарубежных систем капиллярного электрофореза, таких как Backman, Shimadzu, Experien.

За основу методики был взят протокол, описанный в [2]. В данной работе применялись кварцевые капилляры с эффективной длиной 50 см, диаметром 75 мкм. В ходе исследования был выбран коммерческий полимер для заполнения капилляра – POP7 (ABI), в качестве буферного раствора использовался ТАПС (ООО «Синтол», Москва). Экспериментально были получены данные по оптимальным значениям параметров разделения: концентрация полимера, температуры и времени ввода пробы, прилаемого напряжения. При детектировании были использованы интеркалирующие красители SYBR Green I, II.

Так же проводились исследования по разделению методом капиллярного электрофореза образцов РНК.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности использования данного метода для разделения молекул ДНК и РНК. Эффективность разделения молекул зависит от типа использования полимера и специально подобранных условий разделения.

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

2. Mitchelson K. R., Cheng J. Capillary Electrophoresis of Nucleic Acids. Humana Press. 2001.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ В ПРОТЕОМЕ АРХЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С. Г. Константинова

Институт цитологии и генетики СО РАН
Новосибирский государственный университет

Терагерцевое излучение (ТГц) интересно тем, что его воздействие на живые объекты все еще слабо изучено. Не смотря на это, уже в ближайшем будущем планируется массовое использование разнообразной медицинской и другой аппаратуры, работающей в этом диапазоне частот.

Влияние ТГц на такие экстремофильные культуры как археи изучается впервые. Данное исследование уникально тем, что позволяет выявить белки, уровень экспрессии которых изменяется в клетке под воздействием ТГц.

Узнавая, как данный тип излучения воздействует на приспособленные к неблагоприятным условиям организмы (археи), мы, в дальнейшем, сможем сравнить, какие системы задействованы в ответе археи *Halorubrum* на ТГц и у *E. coli* – стандартного объекта молекулярной биологии, для которого проведено аналогичное исследование.

Целью работы являлась идентификация белков, изменяющих уровень экспрессии под воздействием ТГц, методами протеомного анализа, включающими двумерный электрофорез с последующей MALDI-TOF масс-спектрометрией.

Облучение культуры *Halorubrum* sp. штамм НЗ из коллекции ИЦиГ СО РАН производилось на уникальной установке – лазере на свободных электронах. Образец в объеме 6 мл облучали 5 часов (плотность мощности $0,8 \text{ Вт/см}^2$, $\lambda = 130 \pm 2 \text{ мкм}$, температура $42 \pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$), доза облучения корректировалась временем облучения образца.

В ходе работы зафиксировано изменение содержания белка в электрофоретических фракциях, более чем в 1,5 раза.

Для идентификации белков использованы данные полногеномного секвенирования археи *Halorubrum* sp. штамм НЗ, проведенного в лаборатории.

Исследования проводились с применением таких методов, как: двумерный электрофорез, MALDI-TOF масс-спектрометрия, секвенирование генома и его аннотация, культивирование микроорганизмов.

Научный руководитель – канд. биол. наук, С. Е. Пельтек

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО ЭФФЕКТА НАНОЧАСТИЦ СЕРЫ

И. В. Кузнецова

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

В последние годы показано, что наночастицы благодаря таким своим свойствам, как высокое отношение поверхности к объему и способности легко проникать в клетку могут получить широкое применение в медицине. Сера является известным противомикробным средством и широко применяется в виде порошка в сельском хозяйстве и в медицине. По этой причине представляет интерес исследование антибактериального эффекта наночастиц серы.

Целью настоящей работы было исследовать антибактериальный эффект наночастиц серы.

Генерация наночастиц серы осуществлялась путем гетерогенной нуклеации пара серы на затравочных частицах хлорида натрия. Счетную концентрацию и распределения по размерам образующихся наночастиц серы определяли с помощью диффузионного спектрометра аэрозолей (ДСА). В качестве объекта исследований использовали культуры бактерий *S. Epi-dermidis*. Напыление наночастиц серы на культуры бактерий проводилось в специально разработанной для этого камере.

Были проведены исследования антибактериального эффекта в зависимости от размера наночастиц серы, размер которых варьировался от 40 до 120 нм с шагом 20 нм. Проведены сравнения антибактериального эффекта вызываемого применением наночастиц с эффектом вызываемым применением частиц серы микронного размера. В результате было установлено, что антибактериальная эффективность частиц серы возрастает с уменьшением их размера.

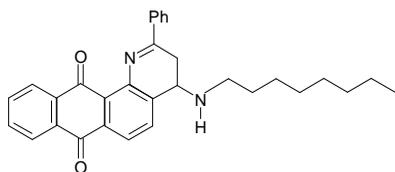
Научные руководители – д-р хим. наук А. А. Онищук, С. В. Валиулин

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ С УЧАСТИЕМ ПРОТИВОРАКОВОГО ХИНОНА – ХЕЛАТОРА В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ

И. Д. Маркова

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

В настоящее время актуальной научной проблемой является выяснение механизмов действия лекарственных соединений на молекулярном уровне и поиск путей повышения их активности. В настоящей работе исследовался хинон-хелатор, обладающий противораковой активностью, механизм действия которого предположительно связан с генерацией свободных радикалов внутри клетки. Целью представленной работы является исследование влияния хелатирования ионов металлов на эффективность генерации свободных радикалов в фотохимических окислительно-восстановительных процессах.



Первой частью работы являлось исследование комплексообразования хинона с ионами металлов (Ca^{2+} и Zn^{2+}) оптическими методами. Анализ зависимости изменения оптической плотности раствора от концентрации ионов металла позволил сделать вы-

вод об образовании комплексов хинон-металл со стехиометрией 2:1 и рассчитать константы стабильности комплексов.

Вторым этапом работы было исследование влияния комплексообразования с ионами металла на способность хинона образовывать свободные радикалы. Для изучения радикальных реакций был применен метод химической поляризации ядер (ХПЯ). В качестве донора электронов в эксперименте использовался замещенный дигидропиридин (ДНР). Анализ спектра ЯМР продуктов фотолиза показал, что в присутствии ионов металлов выход продуктов растет. Интенсивность ХПЯ, наблюдаемая на ДНР и продукте, также растет при добавлении ионов металла. Таким образом, образование комплекса хинона с ионом металла стимулирует реакцию переноса электрона и увеличивает выход свободных радикалов.

Научный руководитель — докт. хим. наук Н. Э. Поляков

УМЕНЬШЕНИЕ ОБЪЕМА ЯДРА КЛЕТКИ ПРИ АПОПТОЗЕ: АНАЛИЗ КОНФОКАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

И. М. Михаэлис

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

Выделяют два типа клеточной гибели: некроз и апоптоз. В отличие от некроза, апоптоз клетки происходит не случайно, а выполняется клеткой по определенной программе «самоуничтожения», которая запускается в ответ на поступающий от организма сигнал (в виде инициирующих апоптоз «сигнальных молекул»). Апоптоз служит организму методом безопасного (не вызывающего воспаление) удаления поврежденных клеток или клеток “не нужных” по программе онтогенеза. Исследования в области апоптоза открывают новые перспективные направления в иммунологии и микробиологии, в терапии онкологических, иммунодефицитных и аутоиммунных заболеваний, вирусных инфекций, а также заболеваний нервной системы.

Данная работа посвящена исследованию начальной стадии апоптоза, инициированного этопозидом в культуре опухолевых клеток печени НерG2. Целью работы является построение математической модели, описывающей динамику морфологических апоптотических изменений в ядре клетки на основе анализа конфокальных изображений флуоресцентно меченого хроматина в разные моменты времени. Оригинальной особенностью данной модели является описание динамики образования и эволюции наблюдаемого «апоптотического кольца» (apoptotic ring) конденсированного хроматина по краю ядра. Для анализа конфокальных изображений был развит новый метод учета движения и деформации микрообъекта произвольной формы в процессе измерения.

В результате работы было показано, что предложенная математическая модель позволяет объяснить и количественно описать наблюдаемое в эксперименте образование и эволюцию кольца конденсированного хроматина при одновременном уменьшении объема ядра. Теоретический анализ экспериментальных данных позволил определить с хорошей точностью численные значения основных динамических параметров данной модели для клеток НерG2.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СКЕЛЕТНУЮ МЫШЕЧНУЮ ТКАНЬ МЛЕКОПИТАЮЩИХ

А. Ф. Мунзарова, Т. В. Сажина, Е. Л. Зеленцов
Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный медицинский университет
МЦ Интегральная медицина, г. Новосибирск

В 2009-2013гг. в Сибирском центре фотохимических исследований СО РАН проводились исследования воздействия терагерцового лазерного излучения на образцы скелетных мышц млекопитающих (крыса, корова) на первой очереди лазера на свободных электронах (ЛСЭ). В экспериментах использовалось излучение с длиной волны 100-200мкм в виде 50-пикосекундных импульсов, следующих с частотой повторения 5,6 МГц, при средней плотности мощности 20Вт/см² и пиковой мощности 0,6МВт. 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 образцы для данных длин волн и данной мощности излучения значительно больше, чем характерная глубина проникновения ТГц импульсов в жидкие среды. Поэтому существует предположение, что воздействие вызвано прохождением механических, 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. Воздействие терагерцового лазерного излучения на агрегацию эритроцитов здоровой крови // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика. 2013. Т. 8. №2. С.117-123.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВИРУСА ГРИППА С КЛЕТОЧНЫМИ РЕЦЕПТОРАМИ МЕТОДОМ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА

Е. О. Папаева
ГНЦ ВБ «Вектор»
Новосибирский государственный университет

Изучение взаимодействия вирусов с клетками представляет интерес для современной вирусологии. Одним из методов исследования взаимодействия вируса и клеточного рецептора является метод капиллярного электрофореза (КЭ), который наряду с высокой чувствительностью, малым объемом используемых реагентов и образцов, отсутствием сложной пробоподготовки, обладает таким важным свойством, как возможность исследовать живые клетки. В настоящее время существуют примеры изучения вирусов с помощью КЭ [1]. Полученные данные позволяют сравнить эффективность взаимодействия различных штаммов вирусов с клетками.

Целью данной работы являлось определение оптимальных условий анализа живых клеток и вируса гриппа методом капиллярного электрофореза, исследование взаимодействия вируса с клетками и разработка способа его количественной оценки.

В данной работе в качестве объекта исследования были использованы различные культуры клеток и штаммы вируса гриппа, отличающиеся по вирулентности. Были проведены исследования по оптимизации условий анализа образцов: выбору молярной концентрации буфера, значения pH, а так же количества и способа введения пробы в капилляр.

В результате исследования получены электрофореграммы и калибровочные линии для образцов клеток и вирусных частиц.

Дополнительно было исследовано содержание иммуноглобулина (Ig) методом КЭ в сыворотках крови лабораторных мышей двух пород, выживших после заражения их природным патогеном – вирусом экстремелии (оспы мышей), и обнаружена корреляция между содержанием Ig в сыворотке крови и инфицирующей дозой вируса.

1. Okun V., Moser R., Ronacher B., Kenndler E., Blaas D. VLDL Receptor Fragments of Different Lengths Bind to Human Rhinovirus HRV2 with Different Stoichiometry.– The Journal of Biological Chemistry. 2001; 276(2): 1057-62.

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

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ЖИРОВЫХ ЧАСТИЦ МОЛОКА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА СКАНИРУЮЩЕЙ ПРОТОЧНОЙ ЦИТОМЕТРИИ

А. А. Родионов

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Физические и коллоидные свойства жировых частиц молока (ЖЧМ) изучаются с помощью различных физических методов. Эта активность вызвана влиянием характеристик ЖЧМ на здоровье человека. Кроме того, ЖЧМ ответственны за некоторые свойства и явления, наблюдаемые в молочных продуктах, и являются главным параметром для их производителей. Поверхность частиц окружена мембраной, состоящей преимущественно из биоактивных молекул, таких как протеины, фосфолипиды, триглицериды, энзимы и т.д., поэтому площадь поверхности может считаться самой важной характеристикой ЖЧМ.

Данная работа выполнена с помощью метода сканирующей проточной цитометрии, который позволил измерить светорассеяние отдельных ЖЧМ. Полагая в качестве оптической модели однородную сферу, была решена обратная задача светорассеяния и получены значения размера и показателя преломления для каждой ЖЧМ. Было изучено два образца промышленно полученного молока, приобретенных в местном супермаркете, и один образец натурального молока, который не подвергался какой-либо обработке. Температура образцов составляла 25 ± 1 °С.

Были получены распределения жировых частиц молока трех образцов по размеру и показателю преломления. Средний размер ЖЧМ натурального молока составил 1.6 мкм, а для молока, прошедшего обработку, 1 мкм. Два образца обработанного молока различались по показателю преломления, значения которого составили 1.506 и 1.493 соответственно. Медианная точность измерения размера и показателя преломления отдельных частиц составила около 15 нм в диаметре и 0.007 в показателе преломления.

Показано, что метод сканирующей проточной цитометрии может быть использован для анализа жировых частиц молока с высокой скоростью и точностью. Это может применяться производителями для контроля качества или конечной регулировки свойств молочных продуктов.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Д. И. Строкотов

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ И ГЕМОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МОЗГА ЧЕЛОВЕКА

А. С. Старостин, Е. Д. Петровский

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Современный уровень исследований головного мозга человека требует более высокого пространственного и временного разрешения чем то, которое могут предоставить традиционные методы изучения. Комплексное применение различных методов, таких как функциональная магнитно-резонансная томография (фМРТ) и электроэнцефалография (ЭЭГ), позволяет частично компенсировать нехватку разрешающей способности каждого из методов в отдельности.

Интеграция полученных одновременно потоков данных фМРТ и ЭЭГ во время моторной или когнитивной деятельности головного мозга человека дает более полную картину изменений. Пространственное разрешение используемого томографа порядка 4 мм, временное – 3,5 сек. Пространственное разрешение ЭЭГ порядка нескольких сантиметров, временное – 0,001 сек. Таким образом, при объединении этих двух методов можно получить результат с высоким пространственным и временным разрешением.

В настоящей работе исследуются корреляции между функцией гемодинамического отклика (ФГО) и такими характеристиками ЭЭГ, как спектральная мощность в диапазоне альфа, бета и тета ритмов головного мозга.

Целью работы является изучение генеза электрической активности различных участков мозга, локализация центров электрической активности, исследование с помощью фМРТ такого явления как нейробиоправление – сознательного управления различными физиологическими ритмами.

Для достижения поставленной цели проведена серия экспериментов с обратной связью в реальном времени, в ходе которой испытуемые должны были периодически расслабляться с закрытыми глазами, увеличивая тем самым активность альфа-ритма своего головного мозга. При превышении мощности альфа-ритма порогового значения, в наушниках у испытуемого раздавался звуковой сигнал. Задача испытуемого – добиться звучания сигнала и продержаться его как можно дольше.

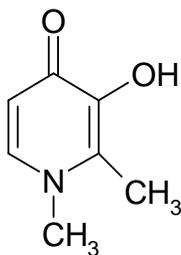
Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. А. Савелов

ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ ДЕФЕРИПРОНА И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С ИОНАМИ МЕТАЛЛОВ

В. А. Тимошников

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

Деферипрон является активным хелатором ионов металлов. Используется для лечения заболеваний, связанных с избытком железа в организме, таких как талассемия. Имеется много исследований фармакологических свойств деферипрона, однако до настоящего времени ничего не было известно о его фотохимической активности и структуре его радикальных интермедиатов.



Целью представленной работы является, во-первых, исследование комплексообразования деферипрона с ионами металлов Zn^{2+} и Ca^{2+} , и, во-вторых, установление механизма влияния ионов металлов на фотохимическую активность деферипрона, в частности в реакции с аминокислотой триптофаном и NADH.

Отмечено изменение спектра поглощения деферипрона в присутствии ионов Zn и Ca с появлением дополнительного поглощения в более длинноволновой области. Построено изменение оптической плотности раствора деферипрона в зависимости от концентрации ионов металла. В рамках модели ступенчатого образования комплексов с помощью численных методов были рассчитаны стехиометрии, константы стабильности и экстинкции различных комплексов. Измерены спектры ЯМР и химической поляризации ядер (ХПЯ) при фотолизе деферипрона в отсутствие, а также в присутствии ионов Zn и Ca . Наличие эффектов ХПЯ однозначно доказывает образование свободных радикалов деферипрона в ходе фотолиза. Показано, что в фотохимических процессах деферипрон может быть как донором, так и акцептором электронов. Обнаружено, что наличие ионов металлов увеличивает скорость фотодеградации деферипрона и интенсивность поляризации продуктов реакции.

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

ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ МИКРОЧАСТИЦ КРОВИ ПО СВЕТОРАССЕЯНИЮ С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕГО ПРОТОЧНОГО ЦИТОМЕТРА

Д. Н. Чернова

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

Микрочастицы крови – сферические фосфолипидные межклеточные везикулы, высвобождающиеся различными видами клеток в результате активации, апоптоза и ряда других процессов. Микрочастицы играют важную роль в патогенезе некоторых заболеваний, являются маркерами различных патологий, поэтому их изучение столь важно в наше время.

При всем разнообразии методов, используемых для изучения микрочастиц крови, большая часть исследований осуществляется методом проточной цитометрии, как наиболее пригодном для проведения клинических анализов. Однако для проточных цитометров стандартной конфигурации измерения микрочастиц крови в значительной степени усложнены. Из-за небольшого размера микрочастиц (0.1 – 1 мкм) уровень сигнала светорассеяния от микрочастиц находится вблизи границы разрешающей способности прибора, кроме того данные приборы не способны отличить микрочастицы в пробе от небольших тромбоцитов и клеточных фрагментов без использования соответствующих флуоресцентных меток и сложных процедур по выделению самих частиц из плазмы. Более того, проводимые на стандартных проточных цитометрах измерения не дают никакой информации о размерах и показателе преломления микрочастиц крови, которые, наряду с их относительной концентрацией и распределением по клеточному происхождению, являются важными параметрами характеристики.

Использование метода сканирующей проточной цитометрии (СПЦ), более чувствительного за счет возможности измерения угловой зависимости светорассеяния для отдельных частиц, позволяет разрешить эти проблемы. Используя теорию Ми для решения обратной задачи светорассеяния, по измеренным индикатрисам и боковому рассеянию, используемому в качестве дополнительной информации о рассеянии, можно не только отличить микрочастицы от других частиц плазмы, но и с высокой точностью охарактеризовать их по размеру и показателю преломления.

Научный руководитель – А. И. Конохова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭРИТРОЦИТОВ В ПРОЦЕССЕ ГЕМОЛИЗА МЕТОДОМ СВЕТОРАССЕЯНИЯ НА ОДИНОЧНЫХ ЧАСТИЦАХ

Е. С. Чернышова

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Эритроциты – основные клетки крови, главной функцией которых является транспорт кислорода от легких к тканям и перенос диоксида углерода обратно от тканей к легким. В норме эритроциты человека имеют осесимметричную дисковидную двояковогнутую форму. При заболеваниях возможно изменение формы и других характеристик эритроцитов. В настоящее время определение статических параметров эритроцитов, таких как объем, индекс сферичности, количество гемоглобина, является достаточно отработанной методикой. Однако методы определения динамических характеристик эритроцитов все еще несовершенны и требуют дальнейшего развития.

Данная работа посвящена развитию нового метода динамической диагностики эритроцитов на основе регистрации угловой зависимости (индикатрисы) светорассеяния от одиночных клеток в процессе реального времени изотонического гемолиза в водном растворе хлорида аммония. Эксперименты проводились при 22° С в течение трех часов после забора донорской периферической крови (в ЭДТА). Измерения эритроцитов проводились на сканирующем проточном цитометре, позволяющем регистрировать угловые зависимости (индикатрисы) светорассеяния от одиночных клеток, находящиеся в водном потоке, со скоростью до 1000 клеток в секунду.

Для анализа экспериментальных данных в работе была использована оптическая модель эритроцита, форма которого описывается четырьмя параметрами (две толщины, диаметр и спонтанная кривизна) и соответствует поверхности минимальной энергии изгиба мембраны. Применение развитой в данной работе математической модели изотонического гемолиза для обработки экспериментально измеренной динамики появления и распада сферических эритроцитов позволило провести динамическую диагностику нескольких доноров: с хорошей точностью определить численные значения таких динамических параметров эритроцитов, как количество белков полосы 3, а также отношение динамической прочности к упругости эритроцитарной мембраны.

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

ОГЛАВЛЕНИЕ

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ	5
Н. А. Авдеев	5
К. А. Амонов	6
З. К. Аллаярова	7
К. И. Баскакова	8
А. С. Берёзин	9
А. Й. Бобоев, Р. Н. Хамраева, В. М. Рустамова	10
М. Н. Волочаев	11
А. А. Горковенко	12
Д. А. Дружбин	13
С. П. Иванова	14
А. Ю. Карсеев, В. В. Давыдов	15
М. В. Клименко	16
И. А. Костогруд	17
И. И. Куркина	18
Э. Ю. Матхонова	19
И. А. Мик	20
Н. И. Морозов, Е. В. Кортаев	21
Н. Т. Муталов, Т. М. Салиев	22
Н. Т. Муталов, Т. М. Салиев	23
А. С. Нураева, Д. С. Петухова, С. Г. Васильев, М. М. Нерадовский	24
О. С. Окишева	25
А. В. Панченко	26
А. В. Полушкин	27
У. Х. Рахмонов	28
Д. В. Сапаров	29
М. П. Севрюгина, Н. С. Пщелко	30
А. В. Селиванова	31
С. Н. Смайлханова	32
Н. А. Смирнова	33
Э. Г. Соболева, А. Г. Ткачев	34
М. М. Сыроквашин, Е. В. Кортаев	35
К. Ю. Ткачев	36
А. М. Цапина	37
И. В. Ческовская, А. О. Замчий	38
И. А. Четырин	39
А. А. Шмаков	40
С. В. Штыков	41
А. А. Юсуф	42

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....	43
Н. С. Бажанова.....	43
И. Ю. Барская.....	44
Д. Д. Безматерных.....	45
А. О. Бессмертных.....	46
С. С. Брагин.....	47
И. С. Гирник.....	48
Д. Е. Горбунов.....	49
А. А. Городецкий.....	50
А. А. Дмитриев.....	51
А. М. Дмитриев.....	52
Л. А. Жукас.....	53
Е. А. Зеленцова.....	54
М. В. Зеликман.....	55
С. Г. Зеневич.....	56
М. Ю. Иванов.....	57
М. Э. Кардаш.....	58
М. С. Крестина.....	59
Д. В. Леонов.....	60
Г. А. Летягин.....	61
Е. А. Лукина.....	62
Д. Е. Машканцев.....	63
Н. В. Нагирный, М. Н. Хомяков, С. Ю. Чепкасов.....	64
А. Г. Попов.....	65
А. Н. Правдивцев.....	66
К. С. Редькина.....	67
Е. А. Свиридов.....	68
Д. В. Сосновский.....	69
БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА.....	70
И. Е. Апанасенко.....	70
А. Т. Газизов.....	71
В. В. Горелов.....	72
Е. В. Горностаева.....	73
О. А. Гурова.....	74
С. А. Далматова.....	75
М. А. Ефремов.....	76
А. И. Иванов.....	77
Л. Е. Кальнеус.....	78
С. Г. Константинова.....	79
И. В. Кузнецова.....	80
И. Д. Маркова.....	81
И. М. Михаэлис.....	82

А. Ф. Мунзарова, Т. В. Сажина, Е. Л. Зеленцов	83
Е. О. Папаева	84
А. А. Родионов.....	85
А. С. Старостин, Е. Д. Петровский	86
В. А. Тимошников	87
Д. Н. Чернова.....	88
Е. С. Чернышова.....	89

Научное издание

**МАТЕРИАЛЫ
52-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МНСК–2014**

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы конференции публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 02.04.2014 г.
Формат 60x84/16. Уч.-изд. л. 5,8. Усл. печ. л. 5,4.
Тираж 165 экз. Заказ №

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