

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

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

**МНСК–2015**

**11–17 апреля 2015 г.**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ**

**Новосибирск  
2015**

УДК 53  
ББК 22.3

Материалы 53-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2015: Физические методы в естественных науках / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2015. 94 с.

ISBN 978-5-4437-0372-5

Конференция проводится при поддержке Сибирского отделения Российской академии наук, Правительства Новосибирской области, инновационных компаний России и мира, Фонда «Эндаумент НГУ», Ассоциации выпускников «СОЮЗ НГУ».

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. Дребушак,

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, канд. физ.-мат. наук Д. А. Яценко

**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.

ISBN 978-5-4437-0372-5

© Новосибирский государственный университет, 2015

**NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY  
SIBERIAN BRANCH OF RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES  
NOVOSIBIRSK OBLAST GOVERNMENT**

**PROCEEDINGS  
OF THE 53rd INTERNATIONAL STUDENTS  
SCIENTIFIC CONFERENCE**

**ISSC-2015**

**April, 11–17, 2015**

**PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES**

**Novosibirsk, Russian Federation  
2015**

Proceedings of the 53<sup>rd</sup> International Students Scientific Conference.  
Physical methods in natural sciences / Novosibirsk State University.  
Novosibirsk, Russian Federation. 2015. 94 pp.

ISBN 978-5-4437-0372-5

The conference is held with the significant support of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk Oblast Government, innovative companies of Russia, Fund “Endowment NSU”, NSU Alumni Union.

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 materials and nanosystems »:** 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,  
Cand. Phys. Math. D. A. Yatsenko

**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. Strokotov,  
Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole,  
Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin

ISBN 978-5-4437-0372-5

© Novosibirsk State University, 2015

# ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 620.3

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООСМОТИЧЕСКИХ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ АГЛОМЕРАЦИИ КОЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА ЦИНКА В ВОДЕ

А. В. Альфимов

Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

Важным видом наноматериалов являются материалы, основной структурной единицей которых является наночастица: нанокolloиды, аэрозоли, нанокерамики и т.д. Физические и химические свойства таких материалов зависят не только от свойств отдельных наночастиц, но и от морфологии образуемых этими частицами агломератов.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию процесса агломерации коллоидных наночастиц, позволяющему описывать и предсказывать морфологию образующихся агломератов. Для этого в работе используется оригинальная математическая модель многочастичного электроосмотического взаимодействия коллоидных наночастиц амфотерных оксидов, предложенная автором в [1]. Данная модель разработана в рамках классической теории ДЛФО (Дерягина, Ландау, Фервея, Овербека) и основана на применении приближения линейной суперпозиции к уравнению Пуассона-Больцмана и использовании оригинальной линейной модели перераспределения заряда на поверхностях взаимодействующих наночастиц.

Полученное аналитическое выражение для потенциальной энергии многочастичного взаимодействия коллоидных наночастиц позволило исследовать зависимость величины потенциального барьера электроосмотического отталкивания от геометрии столкновения наночастицы и агломератов различной морфологии и размеров. Результаты такого исследования показали, что наиболее энергетически выгодным с точки зрения электроосмотического отталкивания оказывается образование линейных структур. После агломерации, однако, значительную роль начинают играть ван-дер-ваальсовы силы притяжения, стремящиеся компактировать агломерат. Таким образом, равновесная морфология агломерата определяется балансом этих процессов.

---

1. A. V. Alfimov, E. M. Aryslanova, S. A. Chivilikhin An analytical method for determining the interaction energy between multiple identical spherical colloidal zinc oxide nanoparticles // Journal of Physics: Conference Series, , 541 (1), 012063 (2014).

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

## ВОЛЬТАМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА $pSi-n(Si_2)_{1-x}(ZnSe)_x$ СТРУКТУР

К. А. Амонов

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

В данной работе приводятся экспериментальные результаты исследований вольт-амперной характеристики  $pSi-n(Si_2)_{1-x}(ZnSe)_x$  ( $0 \leq x \leq 0.01$ ), структур. На рис.1 представлены темновые ВАХ в полулוגарифмическом масштабе, при различных значениях температур. Из рис.1 видно, что на ВАХ на участке от 1,6 до 2,5 В при всех температурах появляется протяженный сублинейный участок, где ток слабо меняется с ростом приложенного напряжения. Этот участок вольт-амперных характеристик может быть хорошо описан в рамках теории эффекта инжекционного обеднения [1]. Согласно теории этот эффект наблюдается при встречных направлениях амбиполярных диффузии и дрейфа неравновесных носителей в не очень длинных диодных структурах при выполнении условия  $Jad > 2$ . В нашем случае при всех температурах это условие выполняется. ВАХ этого эффекта носит ярко выраженный сублинейный характер и описывается выражением:  $V = V_0 \exp(Jad)$  (1), где  $a = 1/(2kT\mu_p N_t)$  - параметр, зависящий от подвижности неосновных носителей  $\mu_p$  и концентрации глубоких центров  $N_t$ ,  $J$  - плотность тока,  $d$  - длина базы. Параметр « $a$ » легко рассчитать непосредственно из экспериментальных данных ВАХ по формуле:  $a = (\ln(V_2/V_1))/((J_2 - J_1) \cdot d)$  (3).

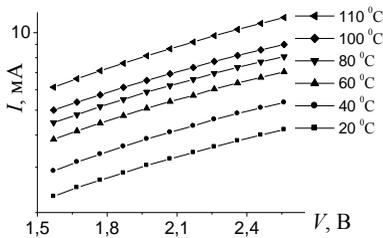


Рис.1. Вольтамперные характеристики  $pSi-n(Si_2)_{1-x}(ZnSe)_x$  структур в прямом направлении при различных температурах.

Определив  $a$ , мы можем найти произведение  $\mu_p \cdot N_t$ . Результаты расчета величин  $\mu_p \cdot N_t = 2.54 \cdot 10^{15} \text{ В}^{-1} \text{ см}^{-1} \text{ с}^{-1}$  почти не меняются по температуре, а значения параметра « $a$ » монотонно уменьшаются от  $4.76 \cdot 10^4$  до  $3.84 \cdot 10^4$  см/А при температуре от 20 °С до 120 °С. Такая ВАХ реализуется в полупроводниковых структурах, содержащих высокие концентрации глубоких примесей.

1. А. Ю. Leiderman, Р. М. Karageorgy-Alkalaev. Sol. St. Commun., 27, 339 (1976).

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

## ИЗМЕРЕНИЕ ТОЛЩИНЫ ПЛЕНКИ СУБОКСИДА КРЕМНИЯ ПО ПОВЕРХНОСТИ

М. А. Буйко

Новосибирский государственный университет

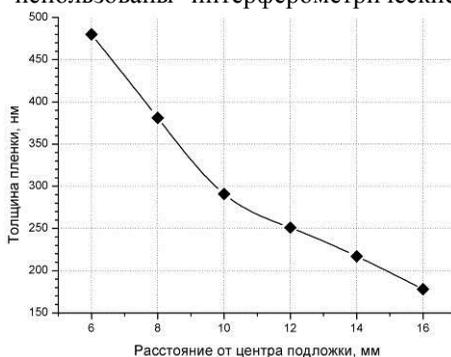
Спектрофотометрия широко используется для определения спектральных коэффициента поглощения, показателя преломления, оптической ширины запрещенной зоны пленок, а также для измерения толщины пленок кремния. В данной работе для определения толщин пленки субоксида кремния были использованы интерферометрические спектры пропускания. Для получения спектров пропускания синтезированной пленки был создан экспериментальный участок, основой которого является спектрограф ДФС 458С, оборудованный многоканальным анализатором эмиссионных спектров (МАЭС).

Исследовалась тонкая пленка субоксида кремния, полученная с помощью метода

газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмы [1]. Температура подложки во время синтеза была равна 330 С.

Для определения толщин полученной пленки субоксида кремния использовался программный пакет PUMA [2].

На рисунке приведены данные толщины пленки субоксида кремния в зависимости от расстояния от центра подложки. С увеличением расстояния толщина уменьшается нелинейно.



1. Gas-jet electron beam plasma chemical vapor deposition method for solar cell application / R.G. Sharafutdinov, S.Ya. Khmel, V.G. Shchukin, M.V. Ponomarev, E.A. Baranov, A.V. Volkov, O.I. Semenova, L.I. Fedina, P.P. Dobrovolsky, and B.A. Kolesov; Solar Energy Materials and Solar Cells, 89, 99-111 (2005).

2. E. G. Birgin, I. Chambouleyron, and J. M. Martínez, Estimation of optical constants of thin films using unconstrained optimization, Journal of Computational Physics 151, 862-880 (1999).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Е. А. Баранов

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ВОССТАНОВЛЕННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА

Е. К. Бурцева, М. В. Ноговицына  
Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова,  
г. Якутск.

Оксида графена (ОГ) представляет интерес для многих приложений, таких как прозрачные электроды, суперконденсаторы, сенсоры и т.д. Для повышения электропроводности ОГ используют восстановительные процессы. Одним из таких процессов является термообработка. При создании приборов первостепенное значение имеют электрофизические свойства материала.

Таким образом, целью данной работы было исследование температурной зависимости электропроводности термовосстановленного оксида графена. Для исследований был использован ОГ, полученный модифицированным методом Хаммерса [1]. Исходная толщина пленок ОГ на поверхности подложки SiO<sub>2</sub> составляла от 10 до 40 нм. Восстановление проводилось при температурах до 650 К длительностью до нескольких часов в атмосфере аргона. Для исследований привлечены методы атомно-силовой и электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния, электрофизических измерений в диапазоне температур 100 до 300 К.

Установлено, что восстановление при T=550 К длительностью 30 мин. приводит к уменьшению сопротивления ОГ от значений выше десятков МОм до нескольких кОм. Измерения температурной зависимости сопротивления показали, что при T>200 К и выше преобладает активационный механизм, обусловленный наличием запрещенной зоны. Ширина зоны меняется в диапазоне от 0,12 до 0,32 эВ в зависимости от степени восстановления. В области T<200 К преобладает прыжковый механизм переноса заряда между локализованными состояниями с переменной длиной прыжка. Размеры областей локализации находятся в диапазоне от 10 до 20 нм.

---

1. Александров Г. Н. и др. Тонкие частично восстановленные оксид-графеновые пленки: структурные, оптические и электрические свойства // Российские нанотехнологии, 2014. Т. 9. № 5-6. С. 18-22.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Е. П. Неустроев

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ И ПРИЧИН РАЗРУШЕНИЯ СТАЛИ, ПРИМЕНЯЕМОЙ В УСТРОЙСТВАХ, РАБОТАЮЩИХ В УСЛОВИЯХ С ПОВЫШЕННОЙ НАГРУЗКОЙ**

М. И. Воскобойник, Т. А. Чистикова  
Кемеровский государственный университет

В работе исследованы фрагменты тягово-цепного устройства (ТСУ) и регулирующей планки (РП) культиватора с целью установления причин их разрушения. Методика анализа причин разрушения деталей из сталей предусматривает два этапа: внешний осмотр и инструментальные методы исследования. Структура излома исследуемых фрагментов разлома свидетельствует о многоступенчатой термической обработке ТСУ и РП.

Металлографический анализ, исследование с использованием растрового электронного микроскопа и эмиссионного анализа позволяет заключить: для изготовления ТСУ и РП использовалась дозвтектоидная конструкционная сталь. Полученные данные по распределению твердости в объеме и поверхностном слое позволяют заключить, что материал ТСУ и РП прошли стадию упрочнения поверхностного слоя, возможно с использованием закалки с нагревом ТВЧ.

Анализ поверхности излома ТСУ и РП обнаруживает два разнородных по микрорельефу участка. Участок в приповерхностном слое, имеющий небольшую высоту микронеровностей и «заглаженность» поверхности, которая может иметь шлифованный вид – это типичная зона развития усталостной трещины. Участок в объеме, имеющий более грубый микрорельеф и волокнистую структуру. Это зона окончательного разрушения (долома). Таким образом, исследуемые разломы ТСУ и РП, следует отнести к усталостному разрушению.

На участках разлома исследованных изделий ТСУ и РП обнаружены риски, которые являются основными концентраторами напряжений в материалах, работающих в условиях воздействия ударных нагрузок, а также канавки, вследствие деформационных процессов на поверхности в сопрягающихся узлах конструкций. Отмеченные повреждения сопрягающихся поверхностей при эксплуатации ТСУ и РП могло произойти при длительной эксплуатации, или в условиях нагрузок превышающих нормы, т.е. разрушение по механизму усталостного разрушения.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук., проф. Л. В. Колесников, канд. хим. наук., доцент И. Л. Швайко

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ РАЗНОГО РАЗМЕРА И ИХ ПРОНИКНОВЕНИЕ В ТКАНИ *DROSOPHILA MELANOGASTER***

О. А. Гурова

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

Возможности применения углеродных наноматериалов в биологии и медицине во многом связаны с их наноразмерами, которые позволяют проникать через клеточную мембрану и выступать в роли переносчиков различных молекул, необходимых для лечения и диагностики онкологических заболеваний.

Цели данной работы – исследование термических свойств водных суспензий с углеродными материалами и их проникновение в биологическую ткань.

В данной работе использовались такие наноматериалы как терморасширенный графит (ТРГ), фуллереновая сажа, дуговые и CVD многослойные углеродные нанотрубки, имеющие различную длину. Для придания гидрофильных свойств наноматериалы были окислены. Наноматериалы были охарактеризованы методами инфракрасной (ИК), оптической спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), а также сканирующей электронной микроскопией (СЭМ). Были изучены термические свойства структурных и морфологических особенностей водных суспензий.

По результатам оптических спектров поглощения ИК-света показано, что наилучшее поглощение в этой области имеет сажа из-за ее наименьшего размера по сравнению с другими частицами. При увеличении концентраций наноматериалов в водной суспензии, видно, что суспензия начинает нагреваться быстрее.

Внедрение углеродных наноматериалов в ткани личинок дрозофилы особой генотипа *hs-Gal4; UAS-GFP.nls* осуществлялось через питательную среду. Далее личинок облучали ИК – лазером. Нагретые таким образом наноматериалы вызывали реакцию «теплового шока» (ответная реакция клетки на стресс). Через 4 часа наблюдалось свечение GFP-репортера - белка, синтезированного в ответ на «тепловой шок». Показано, что наноматериалы способны проникать в ткани личинок дрозофилы - это видно по флуоресцентному сигналу GFP в имагинальных дисках.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕКСТУРЫ ГОРЯЧЕКАТАНОГО АЛЮМИНИЯ МЕТОДОМ ОРИЕНТАЦИОННОЙ МИКРОСКОПИИ (EBSD)

С. В. Данилов, А. В. Лекомцев

Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Не текстурированных поликристаллических материалов не существует. Очень часто наблюдается многокомпонентная текстура, что воспринимается как ее отсутствие. Современные методы, в частности Electron backscatter diffraction (EBSD), дают возможность более детально проанализировать текстуру с точки зрения всех её компонент, как на микро, так и макро уровнях. Причем метод позволяет по одним и тем же данным о микро ориентировках в материале получить все возможные визуализации текстурного состояния: построить ориентационные карты; – различного рода прямые полюсные фигуры (ППФ); – обратные полюсные фигуры и функции распределения ориентировок.

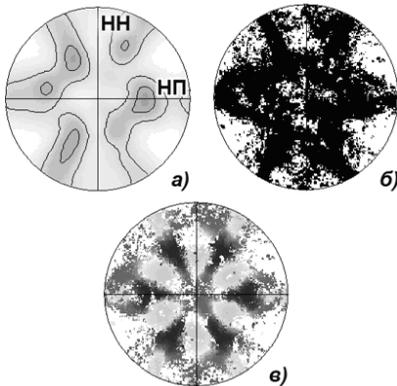


Рис.1. ППФ  $\{100\}$  горячекатаного алюминия.

текстура многокомпонентная, но данные являются достаточно сложными для расшифровки. Цветная ППФ (в) показывает, что деформационная текстура является многокомпонентной, состоящей из набора дискретных ориентировок, являющихся «устойчивыми» при прокатке ГЦК решетки:  $(100)[001]$ ,  $(110)[001]$ , две из  $\{110\}\langle 112\rangle$ , две из  $\{112\}\langle 111\rangle$ . При этом ППФ (б, в) не несут информации об интенсивности ориентировок.

Преимущество метода EBSD в том, что возможно получить не только ППФ полюсной плотности (а), но и полюсные фигуры в виде проекций полюсов от точных ориентировок (б), причем используя их цветовую дифференциацию (в).

Информативность различных вариантов ППФ можно продемонстрировать на примере расшифровки текстуры горячекатаного алюминия. ППФ (а) содержит информацию об основных (наиболее сильных) ориентировках:

Научный руководитель – д-р техн. наук, проф. М. Л. Лобанов

**МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТА  
ЗАМЕЩЕНИЯ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ СИСТЕМЕ  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$** 

А. Л. Зиннатуллин, Р. Н. Нурмехамитов  
Казанский (Поволжский) федеральный университет

Недавнее открытие сверхпроводимости в железосодержащих пниктидах  $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}]\text{FeAs}$  [1] с критической температурой  $T_c = 26$  К и наблюдение сверхпроводимости при  $T_c = 8$  К в халькогениде железа  $\text{FeSe}$  [2], обладающем достаточно простой кристаллической структурой, вызвало значительный интерес к исследованию природы высокотемпературной сверхпроводимости в родственных халькогенидных системах. Интерес к этим исследованиям обусловлен не только меньшей токсичностью халькогенидов по сравнению с пниктидами, но и возможностью исследования роли магнитных флуктуаций в формировании сверхпроводящих свойств этих материалов и изучения механизма повышения критической температуры при воздействии высоких давлений [3]. Замещение селена теллуром в  $\text{FeSe}$  может приводить из-за «chemical pressure» к таким же изменениям плотности электронных состояний в тройных соединениях  $\text{Fe}(\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x)$ , как и в случае наложения механического давления. Так, например, в  $\text{Fe}(\text{Se}_{0.5}\text{Te}_{0.5})$  критическая температура сверхпроводящего перехода повышается уже до 14 К.

В данной работе приведены результаты мессбауэровских исследований пластинчатых кристаллов  $\text{Fe}(\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x)$  состава  $x = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$  и бинарного соединения  $\text{Fe}_{1.052}\text{Te}$ , отражающие систематические изменения структурных, электронных и спиновых состояний ионов железа по мере замещения ионов селена теллуром. При комнатной температуре мессбауэровские спектры изученных образцов представляют асимметричный квадрупольный дублет, обусловленный наличием неэквивалентных позиций ионов железа в структуре. Мессбауэровские спектры сверхпроводящего состава с эквивалентным содержанием ионов селена и теллура,  $\text{Fe}(\text{Se}_{0.5}\text{Te}_{0.5})$ , показывают существенное уширение при низких температурах (15К), что может быть обусловлено начинающимся магнитным упорядочением ионов железа или фазовым расслоением.

- 
1. Y. Kamihara et. al.: J. Am. Chem. Soc. 130. 2008. P. 3296.
  2. F. C. Hsu et. al.: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 105. 2008. P. 14262.
  3. Y. Mizuguchi et. al.: Appl. Phys. Lett. 93. 2008. P. 152505.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Ф. Г. Вагизов

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И  
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭМИССИИ ЛЕТУЧИХ  
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ СТРОИТЕЛЬНЫХ И  
ОТДЕЛОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ В ВОЗДУХ ЗАМКНУТОГО  
ПОМЕЩЕНИЯ**

С. П. Иванова

Новосибирский государственный университет  
ООО «Академлаб», г. Новосибирск

В современном обществе растет актуальность проблем, связанных с чистотой окружающего нас воздуха. Установлено, что содержание вредных веществ в воздухе помещений, где человек проводит большую часть времени, в десятки раз превышает загрязнения атмосферного воздуха. Основными источниками загрязнений являются строительные и отделочные материалы. В последние годы по данным многих социологических исследований фактор «экологичности» входит в группу критериев при выборе потребителями продукции. Сегодня рынок перестает рассматривать производство исключительно в экономическом аспекте, опуская факторы воздействия на окружающую среду и здоровье человека. Еще одной особенностью современного рынка являются маркетинговые преимущества, которые получают компании, ориентированные на выпуск экологичных строительных и отделочных материалов. Определение эмиссии летучих органических соединений (ЛОС) позволяет оценить влияние стройматериала на качество воздуха замкнутого помещения и способствует производству высококачественной продукции. В 2010 году в Российской Федерации был принят национальный стандарт ГОСТ Р ИСО 16000-10-2009 «Воздух замкнутых помещений. Определение выделения летучих органических соединений строительными и отделочными материалами. Метод с использованием испытательной ячейки», в котором установлен список контролируемых веществ, выделяемых различными материалами, и допустимый уровень их эмиссии. Данная работа включает в себя внедрение методики определения эмиссии ЛОС в соответствии с ГОСТ, построение аналитических и численных моделей и исследование зависимости интенсивности эмиссии ЛОС от параметров окружающей среды (температура и относительная влажность) с применением методов термической десорбции, газового хроматографического анализа и масс-спектрометрии.

Научные руководители – канд. хим. наук Т. А. Трубицына, канд. физ.-мат. наук А. В. Зайцев

## ТЕПЛОЕМКОСТЬ ХЛОРИДА НАТРИЯ

А. Л. Игишева, В. В. Литвиненко  
Юргинский технологический институт (филиал) Томского  
политехнического университета

Среди большого класса кристаллических диэлектриков особый интерес представляет изучение ионных кристаллических диэлектриков и, в частности, монокристаллов галогенидов щелочных металлов. Многие экспериментальные и теоретические методики, отработанные на этих кристаллах, с успехом применялись при изучении физических свойства более сложных по структуре материалов. Этим и определяется неослабевающий интерес к изучению физических и термодинамических свойств монокристаллов галогенидов щелочных металлов [1].

Цель данной работы: получение экспериментальных значений теплоемкости хлорида натрия в температурном интервале 293–673 К с помощью прибора БИТ-400. Принцип измерения теплоемкости основан на методе монотонного охлаждения.

В ходе данной работы изучено влияние температуры на теплоемкость кристаллов NaCl: в интервале температур 293–673 К значения  $C_p$  закономерно увеличиваются, а на зависимости  $C_p(T)$  нет каких-либо экстремумов. Полученные данные в изученном интервале температур описаны следующим уравнением (в единицах Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>) [2]:

$$C_p = 45,94 + 16,32 \cdot 10^{-3} T. \quad (1)$$

На основании соотношения (1) рассчитаны термодинамические функции (изменение энтальпии  $H_T^0 - H_{293}^0$  и энтропии  $S_T^0 - S_{293}^0$ ). Для этого использованы известные уравнения, связывающие теплоемкость  $C_p$  с функциями энтальпии и энтропии

$$H_T - H_0 = \int C_p(T) dT, \quad (2)$$

$$S_T - S_0 = \int \frac{C_p(T)}{T} dT. \quad (3)$$

---

1. Беломестных В. Н., Похолков Ю. П., Ульянов В. Л., Хасанов О. Л. Упругие и акустические свойства ионных, керамических диэлектриков и высокотемпературных сверхпроводников. Томск, 2001.

2. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. К. П. Мищенко и А. А. Равделя. Л., 1974 г.

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

## ТЕРМО-ЭЛЕКТРОДВИЖУЩАЯ СИЛА АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Ti И Cu С ДОБАВЛЕНИЕМ МАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Ф. Э. Исмаилова, Г. Ф. Барноев

Самаркандский государственный университет, Узбекистан

В данной работе проводились измерения термо-электродвижущей силы сплавов 50Ti50Cu, 50Ti45Cu5Fe, 50Ti45Cu5Ni, 50Ti45Cu5Co в аморфном и кристаллическом состояниях в широком интервале температур 77 -1000 К. Измерения термо-э.д.с. проводились дифференциальным методом. Аморфное состояние сплавов были получены методом быстрой закалки расплава из жидкого состояния.

Для всех сплавов термо-э.д.с. в аморфном состоянии имеет положительный знак и увеличивается линейно с увеличением температуры. При низких температурах около 210 К наблюдается отклонение  $S(T)$  от линейности. При достижении температуры, называемой критической, значение термо-э.д.с. увеличивается скачкообразно и начинается переход сплава из аморфного состояния в кристаллическое. Добавление Ni, Fe и Co в состав сплава приводит к увеличению температуры кристаллизации и увеличению величины изменения  $S$  при фазовом переходе. Можно сказать, что наблюдаемый фазовый переход является кинетическим фазовым переходом нового типа и более детальное его изучение может дать ценные информации об электронных свойствах конденсированного состояния сплавов и изменении характеристик при упорядочении. Объяснение температурной зависимости термо-э.д.с. изученных аморфных сплавов может быть описана с помощью модели Мотта [1]. Для аморфных сплавов можно считать, что фоновое увлечение не играет решающую роль. Отклонение от линейности  $S(T)$  при фазовом переходе с помощью существующих теорий не удастся. Здесь, вероятно, нужно учесть изменения параметров управления, которые происходит в диссипативных структурах при необратимых процессах [2].

---

1. Коут П., Майзел Л. Электронные явления переноса в стеклообразных металлах // Металлические стекла. М., 1983.

2. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой. М., 2003.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Н. С. Хамраев

## **ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОРБЕНТА $\text{CO}_2$ НА ОСНОВЕ $\text{K}_2\text{CO}_3$ . СОЗДАНИЕ МОДУЛЯ ОЧИСТКИ ГАЗОВ ДЛЯ НАРКОЗНЫХ АППАРАТОВ**

О. Н. Казырицкая

Новосибирский государственный университет  
Технопарк Новосибирского Академгородка  
АО «ТИОН Умный Микроклимат», г. Новосибирск  
Институт катализа им. Г. К. Борескова, г. Новосибирск

В аппаратах для ингаляционной анестезии требуется постоянная очистка дыхательной смеси, содержащей газообразный анестетик, от углекислого газа. В настоящее время углекислый газ удаляется из контура наркозного аппарата при помощи одноразовых (нерегенерируемых) поглотителей, для которых свойственны проблемы с хранением на воздухе и утилизацией после использования. Необходимость постоянной закупки нового поглотителя  $\text{CO}_2$  повышает стоимость медицинских операций, проводимых с использованием ингаляционной анестезии.

Переход к многоразовым (регенерируемым) поглотителям углекислого газа позволит добиться значительной экономии средств медицинских учреждений. Перспективным материалом для данного практического приложения является композитный сорбент на основе карбоната калия и оксида алюминия, разработанный в ИК СО РАН, который после термической регенерации при  $300^\circ\text{C}$  полностью восстанавливает свои сорбционные свойства.

Целью данной работы является разработка модуля газонаркозного аппарата на основе вышеописанного сорбента. Для достижения данной цели необходимо, во-первых, экспериментально исследовать кинетику сорбции в проточном реакторе, во-вторых, на основе полученных экспериментальных данных создать компьютерную модель модуля и процессов, происходящих в нем.

В ходе работы был проведен ряд экспериментов, в результате которых была изучена зависимость скорости сорбции от влажности газа и начальной концентрации  $\text{CO}_2$ , а также оценена константа скорости процесса. Построена численная модель и написана программа для расчета профиля концентрации  $\text{CO}_2$  в слое и динамики концентрации углекислого газа на выходе из реактора.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук С. И. Еременко, канд. хим. наук Ж. В. Веселовская

## МЕТОДЫ ПОЛИРОВКИ КВАРЦЕВОГО АЭРОГЕЛЯ

П. С. Кириленко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск

Кварцевый аэрогель применяется в черенковских счетчиках при проведении экспериментов в области физики элементарных частиц. Оптические свойства аэрогеля определяют параметры детекторов и влияют на качество экспериментальных данных.

Кварцевый аэрогель – это наноматериал. Он представляет собой пористый диоксид кремния, характерные размеры пор менее 100 нанометров. Из-за специфики изготовления, практически невозможно получить достаточно ровные, оптически чистые поверхности блока аэрогеля. Таким образом возникает необходимость разработки технологии полировки образца.

Грубая полировка абразивом помогает легко скорректировать толщину блока аэрогеля и сгладить неровности поверхности. При этом до и после полировки измеряется зависимость оптического коэффициента пропускания образца от длины волны падающего света. Измерение проводится с помощью спектрофотометра. Данные обрабатываются при помощи компьютера с использованием программного пакета ROOT. Фитирование производится по модели рэлеевского рассеяния с искомыми коэффициентами – длиной рассеяния и прозрачностью. Эти значения и дают понять, как изменился блок при обработке.

В ходе работы было выявлено несоответствие рассеяния, наблюдаемого в обработанном блоке, модели рэлеевского рассеяния. При обработке поверхности сильно изменялась длина рассеяния, которая сама по себе является величиной, характеризующей внутреннее строение материала. По этой причине физическая модель была дополнена с учетом эффекта рассеяния в тонком слое кварцевой пыли на поверхности. Далее была поставлена цель минимизировать этот эффект с помощью дополнительной полировки образца различными материалами. Лучшие результаты показала шлифовка натуральным шелком, фактически позволившая получать в результате блок любого размера и толщины, с оптически ровными гранями и не пострадавшими оптическими свойствами.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Е. А. Кравченко

## ИССЛЕДОВАНИЕ АВТОЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ КАТОДОВ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО УГЛЕРОДА

М. В. Клименко

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

Одним из перспективных направлений вакуумной эмиссионной электроники является создание источников электронов, основанных на явлении автоэлектронной эмиссии. К автоэмиссионным эмиттерам относят источники электронов, основанные на принципе явления автоэлектронной эмиссии, которая представляет собой туннелирование электронов через потенциальный барьер на границе раздела твердое тело-вакуум под действием внешнего электрического поля.

Автоэлектронные катоды обладают рядом преимуществ перед термоэлектронными катодами. Главным отличительным свойством является отсутствие накала, что исключает дополнительные затраты энергии для получения свободных электронов. На базе авто эмиттерных катодов возможно создание целого ряда систем вакуумной нано- и микроэлектроники: активных элементов интегральных схем, низковольтных автоэмиссионных плоских дисплеев, устройств СВЧ, точечных источников электронов, электронно-лучевых приборов, в особенности, большой интерес представляет применение автоэмиссионных катодов в источниках ионов и генераторах нейтронов на их основе.

В Институте ядерной физики СО РАН ведутся работы по исследованию материалов для создания автоэлектронных эмиттеров. В работе представлены результаты исследования автоэмиссионных свойств наноструктурированного углерода, полученного в процессе терморасширения графита при 200°С. В ходе эксперимента была обнаружена эмиссия при напряженности электрического поле свыше  $10^4$  В/см, с плотностью тока до  $0.1 \text{ А/см}^2$  в вакууме прядка  $10^{-3}$  Па. Зависимость тока эмиссии от напряженности электрического поля соответствует уравнению плотности тока автоэлектронной эмиссии, закону Фаулера-Нордгейма:  $\mathbf{J}=\mathbf{A}\mathbf{E}^2\mathbf{exp}(-\mathbf{B}\phi^{3/2}/\mathbf{E})$ , где  $\phi$ -это работа выхода, А и В функции, зависящие от геометрии системы.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МЕТАЛЛА ПО ХАРАКТЕРУ РАЗРУШЕНИЯ И МЕХАНИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ

Н. С. Кобликова, О. А. Кречетова  
Кемеровский государственный университет

Методы физического металловедения часто привлекают для установления причин аварийного разрушения деталей и механизмов из металла. С этой целью проводятся исследования качественного или количественного состава используемых при этом металлов и сплавов, времени и условий их эксплуатации, выясняется соблюдение нормативной технологии изготовления, предъявляемым соответствующим ГОСТом. В настоящей работе, с целью установления причин разрушения тормозного диска (ТД) автомобиля и трех чугунных задвижек (ЧЗ) были использованы методы эмиссионного анализа (ЭА), растровой электронной микроскопии (РЭМ), металлографического анализа (МА), измерения твердости. Вырезанные образцы заливались в форму эпоксидной смолой, затем проводилась шлифовка и полировка. Исследование микроструктуры проводилось после травления образцов в 4% спиртовом растворе азотной кислоты.

Результаты МА и РЭМ свидетельствуют, что углерод в свободном состоянии находится в виде коротких пластинок с завихрением в перлитной матрице ТД. Для ЧЗ характерен пластинчатый графит разных размеров в перлитной матрице. Методом ЭА эмиссионного анализа показано, что основными элементами, входящими в состав исследуемых материалов являются кремний, марганец, фосфор и сера. Среднее значение твердости по измерениям находятся в пределах, характерных для чугунов, используемых в изделиях с высокой и средней степени нагруженности.

Внешний осмотр структуры излома позволил установить, что повреждение ТД и ЧЗ произошло в результате хрупкого разрушения материала. Линии разлома тормозного диска были ровные без задигов, глубоких трещин и сколов. Обычно хрупкие изломы деталей автомобиля возникают при столкновениях либо наездах на неподвижное препятствие, при опрокидывании автотранспортных средств и т.п. Подобные нагрузки на детали автомобиля не имеют место при штатной эксплуатации. Одновременное разрушение чугунных задвижек возможно только в условиях «гидравлического» удара.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук., проф. Л. В. Колесников, канд. хим. наук., доцент И. Л. Швайко

## СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ АНТИМОНИДА ИНДИЯ В МАТРИЦЕ АРСЕНИДА АЛЮМИНИЯ

Д. А. Колотовкина

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

Гетеросистема с квантовыми точками InSb в матрице AlAs согласно теоретическим расчетам характеризуется непрямозонной энергетической структурой первого рода, что позволяет проводить фундаментальные исследования спиновой релаксации экситона. Интерпретация экспериментальных результатов требует знания реальной кристаллической структуры этого материала. В настоящий момент такие данные в научной литературе отсутствуют. Поэтому целью работы является исследование с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии структурно-морфологических особенностей эпитаксиальных слоев InSb в широкозонной матрице AlAs, определяемых условиями эпитаксии.

Эпитаксиальные слои InSb были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Использовались два способа осаждения индия и мышьяка на поверхность (001) эпитаксиального слоя арсенида алюминия: одновременное осаждение элементов и метод атомно-слоевого осаждения. Во всех случаях эффективная ожидаемая толщина эпитаксиального слоя составляла 1.5 монослоя. Образцы препарировались в виде поперечных срезов по плоскости (110) и планарных фольг в плоскости (001). Исследования проводились на электронном микроскопе JEOL-4000EX при ускоряющем напряжении 400 кВ.

По данным ПЭМ при всех условиях роста гетероэпитаксиальная пленка в матрице AlAs имеет строение в виде сплошного (смачивающего) слоя с островками (когерентно сопряженными и/или релаксированными) на его поверхности. Выполнены измерения размеров островков и их плотности распределения. Средняя толщина встроенного слоя зависит от условий роста и варьируется в диапазоне 2.4-6.3 нм, т.е. экспериментальные значения превышают ожидаемую толщину слоя InSb на порядок величины. Из этого следует, что, как и для ранее исследованной нами серии образцов аналогичной системы, синтезированной при других условиях роста, в матрице формируется четверной твердый раствор  $In_xAl_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$  вместо бинарного соединения InSb. Анализируется возможный состав твердого раствора на сплошных и островковых участках пленки.

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

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСВЕЩЕННОСТИ В ПРОЗРАЧНОЙ СРЕДЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ

М. Г. Корж, М. П. Пидгирный

Кемеровский государственный университет

Институт углекислоты и химического материаловедения СО РАН,

г. Кемерово

Работа посвящена решению уравнения переноса излучения в слое рассеивающей среды с Френелевскими границами методом сферических гармоник, на примере распространения света в прозрачной среде, содержащей наночастицы металлов.

Для компьютерной реализации был написан специальный программный комплекс. В качестве входных параметров программы использовались радиус наночастиц металла, длина волны света, комплексный показатель преломления металла и показатель преломления прозрачной среды на этой длине волны, толщина слоя вещества, плотности металла и прозрачной среды и массовая доля наночастиц металла. Для апробации работы программы был выполнен тестовый расчет распределения поглощённой энергии излучения при распространении в среде с близким к единице альбедо однократного рассеяния. Рассчитанный линейный показатель поглощения совпадает с прогнозируемой диффузионной теорией распространения света в мутной среде.

Рассчитаны угловые распределения интенсивности на границах и в центре слоя в случае распространения света в прозрачной среде с параметрами пентаэритрита тетранитрата, содержащего наночастицы алюминия. В случае отраженного света распределение освещенности имеет пологий минимум в области  $\theta < 0,2\pi$  далее возрастание до практически стационарного значения. Для больших радиусов частиц далее наблюдается возрастание, с появлением максимума при  $\theta = \pi$ . Основным параметром, влияющим на угловое распределение освещенности на границе образца, является фактор анизотропии индикатрисы рассеяния. Поэтому экспериментальное определение угловой зависимости интенсивности разумно, если ожидается сильно анизотропное рассеяние.

*Работа выполнена при поддержке гранта президента РФ (МК-4331.2015.2).*

Научные руководители – канд. пед. наук, доцент О. Н. Булгакова, канд. физ.-мат. наук, доцент А. А. Звекон

## ГАЗОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ ОДНОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА НА МЕДНОЙ ПОДЛОЖКЕ

И. А. Костогруд

Новосибирский государственный университет

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск

В настоящее время известно несколько форм углерода: алмаз, графит, фуллерен, нанотрубки, графен. Графен – монослой графита был открыт сравнительно недавно нобелевскими лауреатами А. К. Геймом и К. С. Новоселовым. Пристальное внимание к себе графен привлек из-за своих уникальных свойств, таких как высокая электро- и теплопроводность, прозрачность и механическая прочность. Это делает его интересным материалом для применения в опто- и наноэлектронике, фотонике, и для создания композитных материалов, проводящих красок и покрытий. При функционализации графена атомами других элементов, таких как азот, фтор, водород и др., можно получить новые материалы, которые интересны в областях катализа и водородной энергетики.

В работе проведено экспериментальное исследование параметров определяющих кинетику синтеза графена, полученного методом газофазного осаждения. Синтез графена осуществлен в термическом реакторе, при атмосферном и пониженном ( $<1$  Торр) давлении, на медных подложках. В качестве газа прекурсора использовался метан, в качестве подложек использовалась медная фольга AlfaAesar толщиной 25 мкм. Эксперименты проведены при различных температурах (860 – 1070 °С), составах газовой смеси ( $\text{Ar}+\text{H}_2+\text{CH}_4$ ), временах экспозиции (5 – 30 мин.), различных скоростях охлаждения образцов. Анализ синтезированных пленок проводился методами оптической микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния и сканирующей электронной микроскопии.

Поверхность чистой меди при отжиге на воздухе интенсивно окисляется, вследствие чего изменяется цвет поверхности. Показано, что медная подложка, покрытая графеном, не окисляется. Данным методом можно определять сплошность графеновых покрытий, используя оптический микроскоп.

В экспериментальных исследованиях структуры поверхности меди, при предварительном отжиге в атмосфере  $\text{H}_2$ , показано увеличение зерна до 200 мкм. Получены образцы однослойного и многослойного графена. Показано, что определяющими параметрами синтеза являются динамика охлаждения образцов, температура синтеза и концентрация метана.

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

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИОНОВ АЛЮМИНИЯ НА ПРОЦЕСС  
ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОКСИДА КОБАЛЬТА МЕТОДОМ  
ПОРОШКОВОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ В РЕЖИМЕ  
IN SITU**

Е. Г. Коэмец

Новосибирский государственный университет

Процесс Фишера-Тропша – реакция синтеза углеводородов из CO и H<sub>2</sub> – протекает в присутствии катализатора. Промышленные катализаторы, в частности, кобальтовые, представляют собой наночастицы металла, нанесенные на пористый оксид, зачастую,  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Катализаторы активируются непосредственно в реакторе. При этом процесс восстановления протекает различным образом для модельных систем (массивных образцов Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) и промышленных катализаторов. Массивный Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> восстанавливается до металлического кобальта со структурой г.п.у. в один этап, при этом нанесенные системы Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> восстанавливаются в два этапа – образование CoO и последующее восстановление до металлического кобальта. Предполагается, что одним из факторов, вызывающих такое различие, является наличие ионов алюминия, которые модифицируют нанесенный Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

В настоящей работе было исследовано влияние ионов алюминия на процесс восстановления оксида кобальта в процессе нагрева в атмосфере водорода методом порошковой рентгеновской дифракции в режиме in situ. Был исследован ряд твердых растворов Co<sub>3-x</sub>Al<sub>x</sub>O<sub>4</sub> (0.05 ≤ x ≤ 1), которые были получены методом соосаждения из растворов азотнокислых солей с последующим прокаливанием при 500 °С. Вариация количества алюминия, содержащегося в твердом растворе, позволила получить приближение к состояниям, возможным на реальных катализаторах.

Было показано, что ионы алюминия замедляют процесс восстановления оксида кобальта. Также было показано, что размерный эффект оказывает меньшее влияние на процесс восстановления, нежели наличие ионов Al.

При малых содержаниях Al в образцах (Al:Co=0, 1:59, 1:29), образующийся CoO имеет структурный тип NaCl, при больших содержаниях (Al:Co=1:4, 1:3, 1:2) структура шпинелеподобна.

*Работа выполнена в рамках совместного Научно-образовательного центра энергоэффективного катализа Новосибирского государственного университета и Института катализа им. Г. К. Борескова.*

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

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ЗАТОПЛЕННОЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУЕ**

З. Д. Кравцов

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

Явление турбулентного массопереноса широко распространено в природе и технике. Однако развитие математических моделей, достаточно точно описывающих перенос в сложных системах, затруднено недостатком экспериментальных данных. Методы измерения постоянно совершенствуются, позволяя получать новую информацию об объектах исследования, такую как поле мгновенных скоростей и концентрации.

Целью данной работы являлось получение новых экспериментальных данных по распространению пассивной примеси в осесимметричной затопленной турбулентной струе. Для проведения измерений был применен современный бесконтактный метод, основанный на плоскостной лазерно-индуцированной флуоресценции. В качестве объекта измерения была выбрана осесимметричная затопленная турбулентная струя, так как она является хорошо изученным течением, удобным для сравнения с результатами численного моделирования.

В качестве примеси использовались пары ацетона концентрация которых, в поступающей из сопла струе, поддерживалась постоянной. Для регистрации локального сигнала флуоресценции паров при смешении струи с внешним воздухом использовалась цифровая камера с электронно-оптическим преобразователем, кварцевым объективом и оптическим фильтром. Для возбуждения флуоресценции паров ацетона использовался перестраиваемый лазер на красителях с длиной волны излучения 283 нм. Лазерный луч разворачивался в коллимированный световой нож, проходящий через ось струи.

В ходе работы получены распределения мгновенной концентрации ацетона в центральной плоскости турбулентной струи. Полученные данные полезны для верификации моделей турбулентного переноса в сдвиговых течениях.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук В. М. Дулин

## ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ MoS<sub>2</sub> НА МАССИВАХ УНТ

И. В. Кузнецова

Новосибирский государственный университет

В настоящее время проявляют интерес к композитным наноматериалам. Композиты на основе углерода обладают хорошей проводимостью и могут использоваться в новом поколении гибкой электроники, такой как сворачивающиеся дисплеи, носимая электроника и другие мобильные устройства. Однако использование чисто углеродных материалов не позволяет получить литий-ионные батареи с большой ёмкостью.

Дисульфид молибдена обладает полупроводниковыми свойствами, и, обладая слоистой структурой, способен интеркалировать различные вещества, выступать в качестве анода литий-ионных батарей, показывая высокие ёмкости. Однако является достаточно плохим проводником и быстро разрушается при интеркаляции-деинтеркаляции.

Поэтому целями настоящей работы является:

- 1) Подобрать оптимальные параметры, синтеза наночастиц MoS<sub>2</sub> на поверхности УНТ, такие как температура синтеза, соотношение Mo:S для проникновения наночастиц внутрь массива.
- 2) Провести интеркаляцию литием полученных структур.
- 3) Протестировать полученные материалы, как анод литий-ионной батарейки.

Получение частиц осуществлялось гидротермальным методом на массивах углеродных нанотрубок. В качестве исходных реагентов брали водные растворы тиомочивины и молибдата аммония. Синтез осуществлялся в автоклаве с тефлоновым вкладышем, который помещался в печь на 24 часа. После этого образцы исследовались при помощи сканирующей электронной микроскопией и спектроскопии комбинационного рассеяния. Показано, что КР-спектры изменяются в зависимости от температуры синтеза и наличия постобработки. С увеличением температуры и при отжиге появляются или становятся уже характерные для MoS<sub>2</sub> максимумы.

После синтеза наночастиц на подложке с ориентированными углеродными нанотрубками, полученный композитный материал может использоваться, как анодный материал литий-ионных батарей.

Научные руководители – д-р. физ.-мат. наук А. В. Окопуб, канд. хим. наук В. О. Коротеев

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПОИАНИЛИНА В НАНОПОРИСТОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ Cr-MIL-101

А. М. Мальцев

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

Свойства электропроводящих полимеров, и в частности полианилина, в настоящее время подробно исследованы. В моей работе исследована температурная зависимость электропроводности композита на основе полианилина в нанопористой диэлектрической матрице Cr-MIL-101. И полученные результаты сопоставлены с полианилином и механической смесью полианилина и материала диэлектрической матрицы Cr-MIL-101.

Композит на основе полианилина и диэлектрической матрицы Cr-MIL-101 интересен тем, что в диэлектрической матрице имеются полости, которые заполняются полианилином. Эти полости малого размера и поэтому поверхностные свойства полианилина могут быть выражены сильнее, чем в обычном состоянии.

В данной работе была исследована температурная зависимость электропроводности полианилина в нанопористой диэлектрической матрице Cr-MIL-101. Полученные результаты сравнены с электропроводностью полианилина вне диэлектрической матрицы и механической смеси полианилина и диэлектрической матрицы Cr-MIL-101. По данным результатам можно сказать, что наибольшей электропроводностью обладает полианилин вне диэлектрической матрицы, меньшей электропроводностью обладает механическая смесь полианилина и данной диэлектрической матрицы, и самой меньшей электропроводностью обладает композит.

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

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ АЛЮМИНОБОРАТОВ $RAI_3(BO_3)_4$ ( $R=Tb, Er, Ho$ ) ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

З. М. Муродова, Г. К. Туреункулова, Ж. М. Шодиев.  
Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Тугоплавкие редкоземельные (РЗ) оксидобораты с общей химической формулой  $RM_3(BO_3)_4$  (где R – лантаноиды, а M – алюминий, скандий, железо, или хром) относятся к перспективным материалам практического применения [1]. Парамагнитное состояние этих соединений к сегодняшнему дню экспериментально почти не изучено.

Целью настоящей работы – определение основных магнитных характеристик редкоземельных алюмоборатов  $RAI_3(BO_3)_4$  ( $R=Tb, Er, Ho$ ) методом измерения температурной зависимости их магнитной восприимчивости -  $\chi(T)$  в интервале высоких температур 300-1123°K.

Анализ экспериментальных зависимости  $\chi^{-1}(T)$  всех изученных боратов показало, что они имеют два излома и три линейных участка. Эти изломы для боратов  $TbAl_3(BO_3)_4$ ,  $ErAl_3(BO_3)_4$  и  $HoAl_3(BO_3)_4$ , соответственно, наблюдаются при 643 и 813K, при 683 и 813K и при 603 и 733K. Наблюдаемые изломы объясняется структурными фазовыми переходами, происходящихся при вышеуказанных температур. Следует отметить, что после первого излома наклон зависимости  $\chi^{-1}(T)$  уменьшается, а после второго – увеличивается. Зависимости  $\chi^{-1}(T)$  между изломами имеют линейный характер. Это свидетельствует о том, что эти зависимости между интервалами вышеуказанных температур подчиняются линейному закону Кюри-Вейсса.

Таким образом впервые нами изучены температурные зависимости парамагнитной восприимчивости редкоземельных алюмоборатов в интервале температур 20-850°С. По зависимости  $\chi^{-1}(T)$  определены основные магнитные характеристики этих боратов.

---

1. Леонюк Н. И. Кристаллические бораты – оптические материалы нового поколения // Природа. 2007. № 12. С. 52-60.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. О. К. Кувандиков, канд. физ.-мат. наук, доцент Х. О. Шакаров, канд. физ.-мат. наук, доцент З. М. Шодиев

## КИНЕТИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ СИСТЕМЫ $Ni_3(Fe_{25-x}Cr_x)$ И ПРИРОДА СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

М. О. Мустафоева, Н. И. Оллобердиев, М. К. Абдувохидов  
Самаркандский государственный университет, Узбекистан

В данной работе экспериментально найдена взаимосвязь магнитных и кинетических свойств сплавов системы  $Ni_3(Fe_{25-x}Cr_x)$  в ферромагнитном состоянии. Используя экспериментальных значений аномального коэффициента Холла  $R_S$ , и электрического сопротивления  $\rho$  вычислен эффективный параметр спин-орбитального взаимодействия. В этом заключается оригинальность нашего подхода по сравнению другими авторами, например [1]. Известно [2], что аномальный коэффициент Холла  $R_S$ , электрические сопротивления  $\rho$ , спин-орбитальным взаимодействием  $\lambda_{SO}$  связано следующим выражением:  $R_S = (2e^2 / \mu_B \mu_0 \hbar g) \rho^2 \lambda_{SO}$ ; где,  $\mu_B$  - магнетон Бора,  $\mu_0$  - магнитная постоянная,  $\hbar$  - постоянная Планка,  $e$  - заряд электрона,  $g$ -фактор Ланде.

Образцы.	$I_S$ , Гс	$R_S$ , $10^{-10}$ М <sup>3</sup> /Кл	$\rho$ , $10^{-8}$ , Ом*м	$\lambda_{SO}$ , $10^{-13}$ эрг
Ni <sub>75</sub> Fe <sub>24</sub> Cr <sub>01</sub>	833	15.8	38	-0.05
Ni <sub>75</sub> Fe <sub>22</sub> Cr <sub>03</sub>	733	32.6	65	-0.04
Ni <sub>75</sub> Fe <sub>20</sub> Cr <sub>05</sub>	616	38.9	80	-0.03
Ni <sub>75</sub> Fe <sub>18</sub> Cr <sub>07</sub>	533	35.1	92	-0.02
Ni <sub>75</sub> Fe <sub>15</sub> Cr <sub>10</sub>	366	23.9	98	-0.01

Как показали наши результаты, вычисления показывают, что в ферромагнитном состоянии эффективный параметр спин-орбитального взаимодействия несколько меньше чем в парамагнитном состоянии.

1. Ведяев А. В., Грановский А. Б., Котельникова О. А. Кинетические явления в неупорядоченных сплавах. М., 1992. С. 44-47.

2. Trudea M., Cochrane R. W. at all. Positive Hall effect in paramagnetic amorphous Zn-Fe. Phys. Rev., 37. 4499-4502 (1988).

3. Kuvandikov O. K. Estimation of the effective parameter of spinorbital interaction of electrons in intermetallic Er-In system compounds from the kinetic and magnetic properties. Russian Physics Journal. 54, Issue 12. 1384-1388 (2012).

Научные руководители – д-р физ-мат наук О. К. Кувандиков, канд. физ-мат. наук Р. М. Ражабов

**РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАРГАНЕЦ-ГАЛЛИЕВЫХ И МАРГАНЕЦ-ЖЕЛЕЗНЫХ ОКСИДНЫХ СИСТЕМ**

О. С. Никулина

Новосибирский государственный университет  
Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск  
Научно-образовательный центр энергоэффективного катализа,  
г. Новосибирск

Марганецсодержащие двойные оксиды со структурой шпинели привлекают внимание исследователей, поскольку они обладают магнитными свойствами и одновременно проявляют свойства катализаторов.

Способность марганца менять степень окисления приводит к тому, что марганецсодержащие шпинели достаточно легко присоединяют и теряют кислород при определенных условиях. Так как галлий с химической точки зрения является аналогом алюминия, предполагается, что поведение Mn-Ga оксидных катализаторов подобно хорошо изученным Mn-Al. Не меньший интерес в качестве перспективных катализаторов могут представлять Mn-Fe смешанные оксиды, так как в этой системе степень окисления, помимо марганца, может менять и железо.

Работа посвящена исследованию сложных марганецсодержащих оксидных систем (Mn-Ga-O, Mn-Fe-O) методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии. Изучены структурные особенности и фазовый состав в зависимости от условий приготовления и содержания Mn. В частности, рассмотрено поведение Mn-Ga оксидных систем при температурах прокаливания 600-1000°C в различных средах. Установлено образование фазы  $Mn_{3-x}Ga_xO_4$ , со структурой шпинели в инертной среде, начиная с 600°C, на воздухе, начиная с 700°C. Для Mn-Fe систем показаны условия образования твердых растворов различных структурных типов. Фаза шпинели  $Mn_{3-x}Fe_xO_4$  формируется на воздухе, начиная с температуры 1100°C, в виде примеси. Напротив, в инертной среде, способствующей восстановлению  $Mn^{3+}$  до  $Mn^{2+}$ , фаза шпинели образуется уже при 900°C, причем в качестве основной фазы. Однофазные стехиометрические шпинели  $Mn_{1,5}Fe_{1,5}O_4$  и  $Mn_1Fe_2O_4$  образуются в инертной среде, начиная с 1300°C.

*Работа подготовлена при финансовой поддержке Фонда "Сколково" (соглашение о предоставлении гранта № 3 от 25.12.2014).*

Научные руководители – канд. хим. наук О. А. Булавченко, канд. физ.-мат. наук Д. А. Яценко

## ЭЛЕКТРОКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ НИТЕВИДНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ НИКЕЛЯ

Д. А. Остапенко

Донской государственной технической университет, г. Ростов-на-Дону

Электролизом в двухслойной ванне были получены нитевидные наноразмерные порошки железа, сплава железо-кобальт, меди, серебра и др., однако, порошок никеля в двухслойной ванне не осаждался, а на катоде двухслойной ванны выделялся водород. Были проведены эксперименты по получению порошка из растворов солей никеля с различными добавками.

Никелевый порошок при добавлении в верхний слой двухслойной ванны скипидара получали при повышенном содержании в верхнем слое олеиновой кислоты (15 % против 10 %) и меньшем содержании соли никеля в нижнем слое (0,5 моль/л против 1 моль/л). Скипидар, растворимый в верхнем слое и нерастворимый в воде, влияет лишь на активность олеиновой кислоты, значительно уменьшая её. Механизмы электрокристаллизации и пассивации принципиально не изменяется. Это возможно по следующим причинам. Молекулы октана, как насыщенного углеводорода могут взаимодействовать с другими молекулами лишь за счёт дисперсионного взаимодействия, т.е. в верхнем слое они взаимодействуют только с углеводородными «хвостами» олеиновой кислоты, но не с её сильнополярными кислотными группами, и, соответственно, кислотные группы участвуют в взаимодействиях с другими компонентами. Кислотные группы могут взаимодействовать за счёт образования полярных связей (поверхность металла, друг с другом, с молекулами воды или за счёт водородных связей (молекулы воды)). Если полярность других молекул высока, эти связи относительно устойчивы. Молекулы скипидара могут образовывать связи не только за счёт дисперсионных сил, но и за счёт полярного взаимодействия, а также и водородных связей.

Таким образом, характерной особенностью роста одноосных нитевидных кристаллов никеля в двухслойной электролитической ванне является снижение адсорбции молекул олеиновой кислоты на осажденной поверхности растущего кристалла.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент Е. И. Бубликов

## **ЗАРЯЖЕННЫЕ ДОМЕННЫЕ СТЕНКИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ С НЕОДНОРОДНО МОДИФИЦИРОВАННОЙ ОБЪЕМНОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ**

И. С. Палицын, В. И. Пряхина

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург

Исследовалось формирование заряженных доменных стенок (ЗДС) в процессе переключения поляризации в монокристаллах ниобата лития с увеличенной объемной проводимостью, полученной в результате отжига в вакууме.

Исследуемые пластины ниобата лития были вырезаны перпендикулярно полярной оси. Объемная проводимость в приповерхностных слоях увеличивалась за счет аут-диффузии кислорода при отжиге в вакууме при температурах более 600 °С.

Проведенные исследования позволили установить, что наличие пространственно неоднородной объемной проводимости приводит к значительному уменьшению электрического поля в модифицированных слоях и к росту доменов в объеме кристалла.

Анализ последовательности *in situ* изображений позволил выделить основные стадии кинетики формирования доменной структуры, определить скорости бокового движения области с ЗДС и характерные времена переключения поляризации. Анализ серии статических изображений доменной структуры в объеме, полученных при помощи конфокальной микроскопии комбинационного рассеяния, позволил выявить механизмы формирования ЗДС вблизи разных полярных поверхностей.

Формирование и рост ЗДС объяснен в рамках кинетического подхода с учетом пространственно неоднородного распределения переключающего поля и неэффективного объемного экранирования.

*Работа выполнена с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ, при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение 14.594.21.0011).*

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. В. Я. Шур, канд. физ.-мат. наук Д. О. Аликин

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ SiO<sub>2</sub> АЭРОГЕЛЯ

И. А. Рубцов

Новосибирский государственный университет

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск

Аэрогель – легкий высокопористый материал, главной особенностью которого является низкая плотность. Основа материала – диоксид кремния с размером отдельных частиц 3-4 нанометра, из которых формируются разреженные кластеры с размером десятки нанометров. Кластеры формируют жесткий каркас, составляющий малую долю объема аэрогеля [1]. Большая пористость и наличие наноразмерных структур делают материал интересным для исследования ударно-волновых свойств и построения моделей поведения наноструктур при динамическом воздействии.

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование структуры аэрогеля. При этом использовался парный потенциал молекулярного взаимодействия Морзе, характерные размеры расчетной области составляли 200x200x200 нм. Сформированный образец подвергался ударно-волновому нагружению путем движения одной из стенок расчетной области. При этом наблюдалось разрушение структуры, а при больших интенсивностях нагружения и самих частиц аэрогеля.

Для проверки корректности разработанной модели в сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения с использованием ускорительного комплекса ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН были проведены исследования по измерению малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) образцов аэрогеля различной плотности (0.08, 0.14, 0.25 г/см<sup>3</sup>), как в статике, так и при ударно-волновом нагружении. При этом статически измеренный МУРР количественно совпадает с рассчитанным, а МУРР при моделировании прохождения ударной волны демонстрирует качественное совпадение с экспериментальными данными.

---

1. Мержиевский Л. А., Прууэл Э. Р., Лукьянчиков Л. А., Тен К. А., Титов В. М. Динамика фрактальной размерности аэрогеля при ударном нагружении XXII Международная конференция. Воздействие интенсивных потоков на вещество. Эльбрус, 2007. Сборник докладов. Физика экстремальных состояний вещества. С. 135-136.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Э. Р. Прууэл, канд. физ.-мат. наук К. А. Тен

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИКНОВЕНИЯ ПОЛИСТИРОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ДЫХАТЕЛЬНЫЕ ПУТИ МЕТОДОМ УСКОРИТЕЛЬНОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

А. В. Селиванова

Новосибирский государственный университет

ООО Академлаб, г. Новосибирск

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

В связи с ухудшением экологической обстановки, в первую очередь качества воздуха, все большую актуальность приобретают работы по изучению воздействия загрязнителей воздуха на организм человека. Что касается аэрозолей, их проникновение в живые организмы происходит в основном через дыхательные пути, а также через кожные покровы или с пищей, но в меньшей мере. Данное исследование проводилось на мышах, которые были помещены в специальные камеры, куда подавался поток воздуха, содержащий полистирольные частицы, диаметром 0.22мкм.

Установлено, что альвеолярные клетки в легких могут поглощать частицы такого размера, которые потом передаются из альвеол во внутрисосудистое пространство и далее в другие ткани, например, ткани печени [1]. Обычно исследования по проникновению аэрозолей в организм проводят с помощью электронного микроскопа и смотрят срезы легких, для чего используют большие концентрации аэрозолей, что не соответствует реальному содержанию частиц в воздухе. В данной работе используется метод: ускорительная масс-спектрометрия, который предназначен для сверхчувствительного анализа изотопного состава вещества, что позволяет использовать низкую концентрацию аэрозольных частиц, приближенных к реальным условиям. Для получения аэрозоля используется суспензия полистирольных шариков с метками радиоактивного изотопа углерода  $^{14}\text{C}$ . Изучены не только ткани легких, но и ткани других органов.

---

1. Tomoko Kato et al. Evidence that exogenous substances can be phagocytized by alveolar epithelial cells and transported into blood capillaries // Cell and Tissue Research. 311. 47-51 (2003).

Научный руководитель – канд. хим. наук Т. А. Трубицына,  
А. М. Бакланов

## **СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПЛЕНОК И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ**

А. И. Семерикова, Н. В. Нагирный  
Новосибирский государственный университет

Тонкие пленки алмазоподобного углерода (АППУ) рассматриваются как перспективные покрытия оптических систем. Такие пленки должны обладать достаточной твердостью, высокой адгезией, стойкостью к химическому воздействию и необходимой прозрачностью в соответствующем спектральном диапазоне. АППУ обладают наилучшими соответствующими свойствами в сравнении с другими известными покрытиями.

Преимущество использования кварцевых микровесов для определения толщины пленки и скорости ее напыления заключается в контроле этих параметров непосредственно в процессе осаждения. Поэтому исследование возможности применения кварцевого датчика при синтезе пленок методом магнетронного распыления представляется необходимым.

Цель данной работы – определение вольт-амперных характеристик (ВАХ) магнетронной распылительной системы (МРС) для напыления углерода с целью синтеза нанопленок и исследование их оптических свойств.

В работе определены скорости напыления и толщины пленок в зависимости от расстояния источник – детектор и параметров МРС. Получены ВАХ МРС. Выявлены особенности работы кварцевого датчика в зависимости от времени осаждения. Получены нанопленки толщинами порядка 10 – 100 нм на стекле и кремнии и определены спектры пропускания для покрытий и нанотвердость.

На основе полученных зависимостей скорости напыления углерода от времени и координаты датчика установлены режимы работы МРС и времена напыления пленок с заданной толщиной. Определено время стабильной работы кварцевого датчика, которое может ограничиваться в связи с его перегревом. Получены спектры пропускания пленок в диапазоне длин волн 190 нм – 3,3 мкм. По этим данным была установлена прозрачность нанопленок углерода в зависимости от времени напыления для определенных длин волн.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИКНОВЕНИЯ ПОТОКОВ ТВЕРДЫХ МИКРОЧАСТИЦ, С БОЛЬШИМИ СКОРОСТЯМИ, В ПОДЛОЖКУ

А. А. Сычев

Самарский государственный технический университет

Современные технологии обработки материалов потоком частиц ограничена 800 м/с. Актуально исследование механизмов взаимодействия частиц до 100 мкм и подложки на скоростях свыше 800 м/с и определение масштабных эффектов при ударе твердой частицы.

Основной измеряемой величиной, характеризующей удар, является глубина проникания. Теоретическая оценка влияния размеров ударника на глубину проникания выведена на основе законов классической механики. Конечная формула соотношения указывает, что эта величина не зависит от размеров.

Экспериментальные исследования проводились путем разгона частиц порошка (ПР-Х11Г4СР) взрывными устройствами. Исследовались результаты взаимодействия потоков частиц с мишенями из Al и стали.

Установлено, что глубины проникновения частиц соответствуют расчетными значениям, в которых основным фактором является отношение плотности материала частицы к твердости материала мишени.

Однако установлены некоторые характерные особенности:

Наличие напряженного состояния на границе твердого и жидкого металла, при определенных условиях, может привести к возникновению напряжений растяжения в поверхностном слое металла мишени, достаточных для разрыва последнего в окрестности оси движения частицы и последующему образованию канала, достаточного для проникания частицы.

Малые значения толщины слоя жидкого металла перед ударником приводит к большим значениям вязкого трения, что не позволяет рассматривать гидродинамический механизм в качестве определяющего.

Тем не менее, наличие слоя расплавленного металла может играть большую роль в процессе проникания, а именно жидкий металл в соответствии с законом Паскаля порождает изотропное поле напряжений. Тогда с учетом малого размера частиц и, следовательно, больших значений градиентов давления, металл может разрушаться за счет радиальных напряжений.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент. С. Ю. Ганигин

## ПОЛУЧЕНИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕДЬ-ЖЕЛЕЗО-ХРОМ СМЕШАННЫХ ОКСИДОВ СО СТРУКТУРОЙ ТИПА ШПИНЕЛИ

А. Н. Тафилевич

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

Одним из типов массивных катализаторов являются совместные оксидные катализаторы различных составов. В промышленности такие соединения получают механическим смешением оксидов с дальнейшим спеканием при температурах близких к 1000°C. Такой способ не гарантирует однородного распределения компонентов по всей массе и образования единого химического соединения.

Нами произведен синтез совместного CuFeCr оксида со структурой типа шпинели (Шп) термообработкой гидроксо соединения (ГС) предшественника, полученного методом непрерывного соосаждения. Последующую термообработку ГС проводили в токе аргона при 600°C.

По данным термогравиметрического анализа ГС на кривой ДТА были выявлены два термических эффекта: первый эндотермический эффект с минимумом в области 145°C, соответствует удалению адсорбированной и слабосвязанной воды, второй экзотермический, с максимумом в области 520°C, соответствует разложению ГС с образованием оксидной фазы Шп.

Результаты РФА ГС и Шп показали, что гидроксо соединение-предшественник имеет структуру типа гидроталькита ( $\text{Me}^{2+}_6\text{Me}^{3+}_2(\text{OH})_{16}\text{CO}_3$ ), а после его термообработки образуется оксид со структурой типа шпинели ( $\text{Me}^{2+}_1\text{Me}^{3+}_2\text{O}_4$ ).

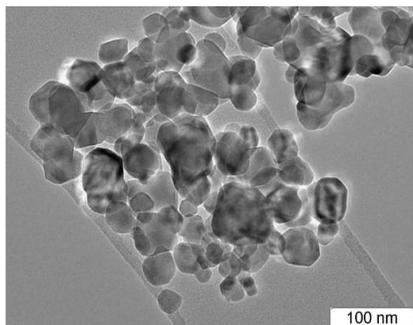


Рис.1. Микрография катализатора.

Выбранный метод приготовления позволяет получить массивный оксидный катализатор (рис.1) заданного состава, однородного по всей массе, при относительно невысокой температуре термообработки, что обеспечивает высокую удельную поверхность, а, следовательно, и повышенную эффективность катализатора.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ ЛАУРДАНА И ПРОДАНА

Т. Ю. Титова

Томский государственный университет

Флуоресцентные зонды – обширный класс органических соединений. Молекулярные зонды используются в различных научных исследованиях и имеют большое прикладное значение. Метод флуоресцентных зондов широко используется при исследовании нефлуоресцирующих или слабо флуоресцирующих веществ. Параметры люминесценции флуоресцентных зондов меняются в зависимости от окружающей их среды, что позволяет судить о физических свойствах непосредственного микроокружения молекулы зонда.

Цель работы: установление зависимости спектрально-люминесцентных свойств флуоресцентных зондов от структуры, электронного строения и межмолекулярных взаимодействий. Исследование проводилось с использованием комплексного подхода, содержащего теоретический и экспериментальный методы исследования.

Объектами исследования являются флуоресцентные зонды – лаурдан (6–додеканоил–2–диметиламинонафталин) и продан (6–пропионил–2–диметиламинонафталин). Для выбранных молекул экспериментально интерпретированы спектры поглощения и флуоресценции как в инертном растворителе, так и в растворителях различной химической природы. Проведены квантово-химические расчеты в газовой и конденсированной фазах. Оценен вклад общих эффектов растворителя в смещение полос флуоресценции исследуемых молекул. Показана возможность использования флуоресцентных зондов для оценки полярности протонодонорных и протоноакцепторных растворителей.

В работе показано, что спектры флуоресценции продана и лаурдана в гексане вследствие «нежесткой» структуры молекул формируются как наложение спектров плоской и неплоской (с поворотом диметиламино-группы) конформаций. Установлено, что в величину смещения полосы флуоресценции лаурдана и продана в ряду растворителей изопропанол – этанол – метанол 65% вклада вносят общие эффекты растворителя, остальные 35% – водородные связи как специфические эффекты растворителя. Оценены параметры кислотности, основности и полярности для растворителя Тритон X–100.

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

## ПЛОТНОСТЬ СПЛАВОВ И ЕГО СВЯЗЬ С ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ В АМОРФНОМ, ЖИДКОМ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СОСТОЯНИЯХ.

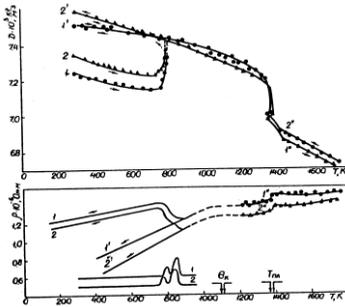
Д. Х. Тошпулатова., А. З. Орзиев  
Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Температурная зависимость плотности сплавов в жидком, аморфном и кристаллическом состояниях имеет большое значение, так как она непосредственно связана с кристаллической и электронной структурной и достаточно резко изменяется при фазовых превращениях.

В данной работе исследованы плотности и удельного электросопротивления аморфных сплавов на основе переходных металлов группы железа с добавками кремния и бора, полученных закалкой из жидкого состояния. Изучено также взаимосвязь между этими свойствами.

Для всех образцов в жидком состоянии плотности уменьшается линейно, а для большинства образцов в кристаллическом состоянии плотность уменьшается по линейно – параболическому закону. Скорость изменения плотности в жидком состоянии больше, чем в кристаллическом состоянии.

Температурные зависимости плотности, удельного электросопротивления и кривые ДТА сплавов  $Fe_{58}Co_{20}Si_{12}B_{10}$  и  $Fe_{60}Co_{20}Si_8B_{10}$  в аморфном 1, 2, кристаллическом 1', 2' и жидком 1, 2" состояниях приведены на рисунке.



Величина плотности исследованных сплавов и её температурная зависимость  $D(T)$  в кристаллическом, аморфном и жидком состояниях коррелирует со значениями удельного электросопротивления и температурной зависимости  $\rho(T)$  во всех трех состояниях. Так в аморфном состоянии величина плотности сплава занимает промежуточное состояние между соответствующими значениями  $D$  для

кристаллического и жидкого состояния, причем  $D_{ж} < D_{ам} < D_{кр}$ . Для значений удельного электросопротивления выполняется условие  $\rho_{ж} > \rho_{ам} > \rho_{кр}$ . При этом температурные коэффициенты электросопротивления  $\frac{\partial \rho_{ж}}{\partial T} < \frac{\partial \rho_{ам}}{\partial T} < \frac{\partial \rho_{кр}}{\partial T}$ , а

$$\frac{\partial D_{ж}}{\partial T} > \frac{\partial D_{ам}}{\partial T} > \frac{\partial D_{кр}}{\partial T}.$$

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

## ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОСВЕННОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ РЗМ – Al.

Г. К. Турсункулова, Х. К. Жуланов, Т. И. Садуллаев  
Самаркандский государственный университет, Узбекистан

В редкоземельных металлах (РЗМ) и соединений на их основе приобретает особенно важное значение вопрос о происхождении атомного магнитного порядка. Эти объекты обладают магнитным упорядочением, обусловленным обменным взаимодействием локализованных в узлах кристаллической решётки 4f-электронов через электроны проводимости, называемое косвенным обменным взаимодействием Рудермана-Киттеля-Касуя-Йосиды (РККИ) [1]. Такое упорядоченное состояние разрушается при определённой температуре  $T = \theta_p$  (называемой парамагнитной температурой Кюри), характерной для каждого РЗМ. Таким образом,  $\theta_p$  является энергетической мерой взаимодействия типа РККИ в РЗМ и соединений на их основе. По теории РККИ для чистых тяжёлых РЗМ существует пропорциональная зависимость между экспериментальными значениям  $\theta_p$  и фактором де Жена ( $G$ ).

Цель настоящей работы – проверка применимости этой предсказаний теории РККИ для интерметаллидов в бинарных системах РЗМ–Al (РЗМ=Gd, Dy, Ho, Er). Значения  $\theta_p$  были определены в работе [2].

Результаты вычислений зависимости  $\theta_p(G)$  показали, что для изучаемых эквиатомных соединений эти зависимости имеют почти линейный характер и удовлетворительно соответствуют линейному характеру зависимости  $\theta_p(G)$  для тяжёлых РЗМ.

Таким образом, в данной работе впервые подтверждено предсказание теории РККИ, т.е. установлена такая же пропорциональная зависимость между экспериментальным значением  $\theta_p$  и фактором де Жена для изучаемых эквиатомных соединений, подобно как у чистых тяжёлых РЗМ. В целом установлено, что для изучаемых соединений, как у чистых тяжёлых РЗМ, характерно обменное взаимодействие типа РККИ.

---

1. Вонсовский С. В. Магнетизм. М., 1971.

2. Кувандигов О. К., Шакаров Х. О. Магнитная восприимчивость интерметаллидов в системе РЗМ–Al высоких температурах // Известия вузов. Физика. № 3. 2004. С. 78-81.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Х. О. Шакаров

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В МДП-СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ $A_3B_5$ -ПОЛУПРОВОДНИКОВ

С. Е. Хандархаева

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

Благодаря прямозонной структуре, малой ширине запрещенной зоны, высокой подвижности носителей заряда и наличию собственного 2D электронного газа вблизи границы раздела с диэлектриками полупроводники типа  $A_3B_5$  являются перспективными материалами с точки зрения приборных применений. Особый интерес представляют металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) структуры на основе  $A_3B_5$ , которые применяются в полевых и спиновых транзисторах, а так же приемниках инфракрасного излучения. В отличие от кремния, собственный оксидный слой сложного состава на поверхности  $A_3B_5$ , не обеспечивает высокое качество границы раздела диэлектрик/ $A_3B_5$  (низкую плотность поверхностных состояний (ПС) и малую величину встроенного в диэлектрик заряда). По этой причине пассивация поверхности тонкими оксидными слоями становится чрезвычайно важным процессом при изготовлении приборов на основе  $A_3B_5$ .

В данной работе с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ВРЭМ) проводится исследование морфологии пассивирующего слоя и строения границ раздела между оксидными пленками и бинарными полупроводниками типа  $A_3B_5$ : InAs и GaAs. Гетеросистемы фторсодержащий анодный оксидный слой (ФАОС)/InAs(111)A и  $HfO_2/Si(6ML)/GaAs(100)$  изучались в конфигурации поперечных срезов. Было установлено, что: сухое окисление в таунсендовской газоразрядной плазме приводит к формированию переходных слоев между оксидной пленкой и InAs с некоторой периодической структурой, зависящей от соотношения ионов фтора и кислорода в плазме, при этом плотность ПС на такой границе раздела  $<10^{11}$  эВ $^{-1}$ см $^{-2}$ . Для гетеросистемы  $HfO_2/Si(6ML)/GaAs(100)$  плотность ПС  $\sim 3 \cdot 10^{12}$  эВ $^{-1}$ см $^{-2}$ , однако уменьшается до величины  $\sim 6 \cdot 10^{11}$  см $^{-2}$ эВ $^{-1}$  в результате отжига образцов при температуре 400 – 450°C. При этом значительно изменяется морфология оксидного слоя, происходит частичная кристаллизации  $HfO_2$  в моноклинную фазу.

Научный руководители – канд. физ.-мат. наук А. К. Гутаковский, канд. хим. наук Н. А. Валишева

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПОДВИЖНОСТИ СТРУКТУРЫ МИКРОПОРИСТЫХ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ МЕТОДОМ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА НА ЯДРАХ ДЕЙТЕРИЯ

А. Э. Художитков

Институт катализа им. Г. К. Борескова, г. Новосибирск

Металл-органические каркасы (МОК) – это новый класс гибких, пористых материалов, которые имеют широкий диапазон потенциальных применений, начиная от катализа, заканчивая сорбцией и разделением веществ. Эти каркасы состоят из металлических центров, связанных между собой органическими мостиками. Большое разнообразие органических веществ, которые можно использовать в качестве мостиков, приводит к большой вариативности самих каркасов.

Наличие структурной динамики в некоторых МОК, в частности вращательной подвижности фрагментов мостиковых лигандов, открывает возможность узнать больше о внутреннем устройстве каркаса, например получить информации о положении и величине энергетических барьеров.

Существует два фундаментальных механизма, которые могут повлиять на эти барьеры и, соответственно, на вращение органических фрагментов: стерический и электронный механизм. До сих пор остается неизвестным: в какой степени каждый из этих механизмов влияет на динамику каркаса.

Для того чтобы исследовать этот вопрос, был исследован набор идентичных каркасов с различными металлическими центрами (Co, Ni, Zn). Так, стерический фактор должен быть одинаков для всех материалов, в то время как электронный фактор зависит от электронной структуры металла. Исследование было произведено как для каркасов без гостевых молекул, так и для каркасов с гостевыми молекулами диметилформамида.

Исследование динамики проводилось с помощью записи спектров ЯМР на ядрах дейтерия при различных температурах, с последующим моделированием этих спектров. Данный метод позволяет следить за динамикой только дейтерированного участка каркаса, что позволяет выбирать фрагмент каркаса, который мы исследуем. Еще одним преимуществом этого метода является то, что для дейтерия квадрупольное взаимодействие доминирует над всеми остальными видами взаимодействия, что существенно упрощает интерпретацию спектра. Сильная зависимость спектра от модели движения позволяет не только понять скорость движения, но и его геометрию.

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

## СПЕКТРЫ ОПТИЧЕСКОГО ПРОПУСКАНИЯ КАЛИЕВОАЛЮМОБОРАТНЫХ СТЕКОЛ С ДОБАВКАМИ Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ИНДУЦИРОВАННЫЕ ГАММА-РАДИАЦИЕЙ

С. А. Хужанов

Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Калиевоалюмоборатные (КАБ) стекла, содержащие ионы Fe<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup> в виде наноструктурированных магнитных включений проявляют необычные магнитные свойства. Перспективы их применения можно раскрыть путем терморadiационной модификации структуры и свойств. Целью данной работы является исследование спектров оптического пропускания в многокомпонентном стекле с магнитными нановключениями, подвергнутом терморadiационной обработке.

Объектами были стекла состава 22,5K<sub>2</sub>O·22,5Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·55B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (мол.%), с добавками Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> от 1,0 до 3,0 масс.%. Температура варки 1603±5 К. Образцы площадью 1 см<sup>2</sup> имели толщину 8 мм. Дополнительная термообработка проводилась в γ-поле источника <sup>60</sup>Со мощностью 26 Гр/с, ИЯФ АН РУз при 673±2 К. После длительной релаксации образцов проводили измерения. Затем образцы снова облучали, но при меньшей мощности 3 Гр/с последовательно дозами 10<sup>3</sup> – 10<sup>6</sup> Гр, и сразу же измеряли оптические спектры, чтобы увидеть нестабильные центры. Спектры пропускания снимали на однолучевом спектрофотометре СФ-56 в области от 190 до 1100 нм с погрешностью ± 3 %.

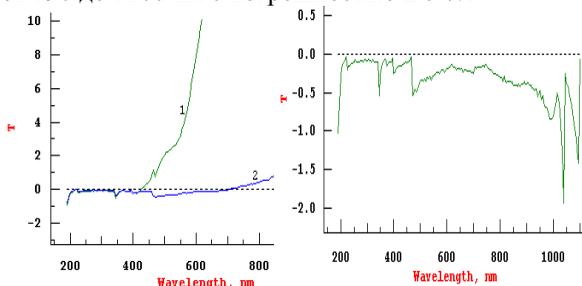


Рис. 1. Оптическое пропускание КАБ-стекла с разными добавками Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> после облучения дозой 10<sup>5</sup> Гр: Слева-кривая 1 - 1,5 %, 2-2 %, справа-3 %.

Полученные экспериментальные данные достаточно хорошо объясняются на основе развития феноменологической теории радиационно-наведенных процессов при ТО и ТРО.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент М.К. Салахитдинова

## АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЁРДОГО ТЕЛА

А. А. Шмаков

Новосибирский государственный университет

В последние годы тема исследования возможных применений кластерно-ионных пучков (СІВ) для модификации поверхностей становится всё более актуальной. Столкновения кластеров с поверхностью приводит к сложным нелинейным эффектам, которые используются для полировки материалов, травления и напыления тонких плёнок с шероховатостью на уровне нескольких нанометров [1, 2]. В нашем отделе изучались механизмы формирования как однокомпонентных так и смешанных кластеров в сверхзвуковых импульсных и непрерывных потоках [3]. В настоящее время ведутся работы по разработке методики кластерно-ионной полировки поверхности и изучаются процессы, приводящие к повышенной эффективности этой технологии.

Главной особенностью взаимодействия ускоренных газовых кластерно-ионных пучков (GСІВ) с поверхностью является низкая энергия отдельного атома, составляющего кластер, которая напрямую зависит от ускоряющего напряжения. Поэтому, при бомбардировке поверхности такими кластерами не происходит разрушения подповерхностных слоёв, что является одним из основных преимуществ технологии.

В работе использовалась идея предварительной сепарации малоразмерных кластерных и мономерных ионов варьированием потенциала экстрактора. [4] Образцы, с разными значениями шероховатости были обработаны в кластерных и кластерно-мономерных режимах. Итоговые исследования обработанных образцов проводились методами сканирующей зондовой микроскопии.

---

1. T. Seki, J. Matsuo, G. H. Takaoka, I. Yamada. Cluster ion beam process technology, Mater. Chem. Phys., 206. 820-829 (2003).

2. I. Yamada Cluster ion beam process technology – 20 years of R&D history, Mater. Sc. and Eng., 257. 632-638 (2007).

3. A. E. Zarvin etc. Formation of mixed clusters in a pulsed helium-oxygen-isoprene supersonic jet, Eur. Phys. J. D, 49. 101-110 (2008).

4. N. G. Korobeishchikov etc. Experimental Study of Accelerated Argon Ion Cluster Beams, Technical Physical Letters., 40. 25-28 (2014).

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

## ВЛИЯНИЕ НЕКОНТРОЛИРУЕМЫХ БДП НА ПАРАМЕТРЫ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

С. К. Эшмаматов

Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Предлагаемый нами способ позволяет повысить эффективность нейтрализации быстродиффундирующих примесей (БДП) в кремнии путем селективного связывания в электронейтральные химически связанные комплексы по всему объему кристалла. Это достигается тем, что при обработке кремния, вводится образец кремния примесь, образующая при последующем отжиге с БДП электронейтральные комплексы, в качестве примеси используют серу, которую вводят методом диффузии до определенной растворимости. А также, влияние БДП на параметры солнечных элементов исследовалось на стандартных пластинок монокристаллического кремния толщиной 380 мкм с уровнями легирования бором или фосфором  $10^{15}$ - $10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Уровень легирования фронтального слоя не превышал концентраций  $10^{19}$  см<sup>-3</sup>, что предотвращало образование мертвого слоя на поверхности. Фотоэлемент изготавливался в виде плоскопараллельной пластины размером 10x10 мм с двумя металлическими контактами, сеточным лицевым и сплошным тыльным. В качестве глубоко уровневых примесей выбраны сера и цинк. Дополнительное легирование проводилось в кварцевых ампулах в атмосфере паров диффузианта по технологии, описанной в [1]. Для учета влияние термоотжига при дополнительном легировании глубоко уровневыми примесями на параметры солнечных элементов нами производился отжиг контрольных образцов, не содержащих глубоко уровневые атомы, при температуре и в течение времени, соответствующих условиям диффузии. Во всех случаях при дополнительном легировании и контрольном термоотжиге использовались одинаковые по параметрам и конструкции солнечные элементы. Изменение напряжения холостого хода и тока короткого замыкания относительно контрольных образцов в зависимости от концентрации атомов серы и цинка, определяемой методом эффекта Холла, с учетом зарядового состояния атомов в кристаллической решетке кремния имели следующий характер. В целом напряжение холостого хода малочувствительно к дополнительному легированию атомам серы, так, оно практически не меняется при увлечении концентрации данных атомов с  $10^{14}$  до  $10^{16}$  см<sup>-3</sup>. В случае же введения атомов цинка напряжение холостого хода уменьшается в 2-2,5 раза.

Результаты исследований могут быть использованы для повышения стабильности параметров кремния в процессе изготовления как эффективных солнечных элементов, так и полупроводниковых приборов в целом.

1. Бахадырханов М. К. и др. Письма ЖТФ. 1992. Т. 18. Вып. 4.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Т. У. Тошбоев

## СИНТЕЗ ЛЮМИНОФОРОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ГРАНАТОВ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

А. А. Юсуф

Новосибирский государственный университет

Известно много областей применения люминофоров на основе редкоземельных гранатов, но наиболее широкой является область светотехники (светодиоды, лампы дневного света, автомобильные фары, архитектурное и дизайнерное освещение и т.д.).

Для изготовления светодиодов, используемых в коммерческих целях, требуется получать люминофоры, соответствующие по своим люминесцентным свойствам лучшим коммерческим образцам. На люминесцентные свойства люминофора влияют такие характеристики, как размер частиц, морфология, отсутствие посторонних фаз. Следует отметить, что синтез люминофоров проходит при температурах выше 1600 °С, что приводит к спеканию порошка. Для получения фракции частиц с необходимыми характеристиками необходимо привлекать дополнительные методы обработки, такие как помол и сепарация. Кроме того, сам процесс синтеза в этих условиях довольно длительный и энергозатратный.

Известно, что при повышенных давлениях оксид иттрия из кубической фазы переходит в более разупорядоченную моноклинную [1]. Предполагается, что в твёрдофазной реакции образования  $Y_3Al_5O_{12}$ , диффузия атомов алюминия в разупорядоченную структуру оксида иттрия будет происходить быстрее, в результате скорость реакции увеличится, исчезнет промежуточная фаза  $YAlO_3$ , и, как следствие, полный синтез фазы  $Y_3Al_5O_{12}$  будет происходить при более низкой температуре и за более короткое время. Поскольку фотолюминофор  $Y_3Al_5O_{12}:\text{Ce}$  является базовым для многих областей применения, в настоящей работе предлагается способ синтеза люминофоров на основе редкоземельных гранатов в условиях высокого давления.

Синтезированные люминофоры охарактеризованы: определен их фазовый состав, распределение по размерам частиц в порошке. Измерены люминесцентные свойства образцов.

---

1. Yusa H (2010) Dense Ytria phase eclipsing the A-type sesquioxide structure: high-pressure experiments and ab initio calculations. Inorg Chem 49:4478–4485.

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

## ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$

Е. А. Яковлева

Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург  
Институт химии твёрдого тела УрО РАН, г. Екатеринбург

Одним из основных направлений в развитии микроэлектроники является повышение быстродействия электронных устройств с сохранением или уменьшением их габаритов. Материалы  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$  являются перспективными для элементов конструкций электрохимической и микроэлектронной техники, например, в качестве диэлектрика в конденсаторах, благодаря наличию гигантской диэлектрической проницаемости и ее слабой зависимости от температуры и частоты приложенного электрического поля [1,2]. Работа посвящена исследованию электрических свойств сложных оксидов  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ , полученных разными методами синтеза, и керамических образцов твердых растворов  $\text{La}_{1,8}\text{Sr}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}\text{M}'_{0,2}\text{O}_4$  ( $\text{M}'=\text{Fe}, \text{Co}, \text{Cu}$ ), синтезированных методом прекурсорной цитратной технологии. Цель работы - выявление влияния температуры, давления, концентрации, частоты электрического поля на электрические характеристики, в том числе, на диэлектрическую постоянную, определение корреляции кристаллохимических параметров и электрофизических характеристик материалов.

Установлено, что существенная часть диэлектрической проницаемости материалов  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ , полученных в термобарических условиях, имеет наибольшее значение, по сравнению с материалами, полученными другими двумя методами, и мало меняется с частотой в области  $10^2$ - $10^7$  Гц. Анализ связи структурных параметров материалов с их диэлектрическими свойствами показал, что диэлектрическая проницаемость увеличивается при отклонениях от идеальной структуры.

*Исследования поддержаны грантами РФФИ №14-03-00103 и 13-02-00633.*

---

1. Krohns S., Lunkenheimer P., Kant Ch., Pronin A., Brom H., Nugroho A., Diantoro M., Loidl A. Colossal dielectric constant up to gigahertz at room temperature // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 94. P. 122903-122906.

2. Ерин Ю. Найдено вещество с гигантским значением диэлектрической проницаемости // Химия и химика. 2009. № 1. С. 16-22.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук, доцент Н. В. Мельникова, канд. хим. наук, доцент Т. И. Чупахина

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВРЕМЯРАЗРЕШЕННОГО МАГНИТНОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СКОРОСТЕЙ ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ

А. О. Бессмертных

Новосибирский государственный университет

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

В спин-коррелированных ион-радикальных парах (ИРП) происходят переходы между триплетными и синглетными спиновыми состояниями. Химическая реакция одного из партнеров ИРП с другой частицей среды приводит к изменению спиновой эволюции ИРП из-за изменения магнитного окружения неспаренного электрона. Таким образом, спиновая эволюция ИРП может отражать информацию о химических реакциях с участием партнера ИРП.

При действии ионизирующего излучения на растворы образуется ансамбль ИРП, в рекомбинационной флуоресценции которых спиновые переходы проявляются в виде осцилляций – квантовых биений. Метод времяразрешенного магнитного эффекта (ВМЭ) заключается в анализе отношения кинетик спада флуоресценции в ненулевом и нулевом магнитных полях:  $I_B(t)/I_0(t)$ , что позволяет изучать спиновую динамику ансамбля ИРП. В настоящей работе представлены результаты применения метода ВМЭ в рекомбинационной флуоресценции для изучения различных типов химических реакций на примере модельных систем с участием катион-радикалов (КР) аминов в облученных алкановых растворах.

Основное внимание уделено реакции образования комплекса, состоящего из КР и нейтральной молекулы тетраметилпиперидина. Согласно квантовохимическим расчетам [1] эта реакция может протекать по механизму переноса электрона или протона, причем в этих случаях магнитное окружение неспаренного электрона изменяется по-разному. В работе метод ВМЭ применен для определения механизма и скорости протекания реакции путем сравнения экспериментальной кривой ВМЭ с результатом теоретического расчета в широком диапазоне магнитных полей и концентраций тетраметилпиперидина.

---

1. Вьюшкова М. М. и др. Необычный комплекс с переносом протона от катион-радикала к молекуле 2, 2, 6, 6-тетраметилпиперидина // Доклады АН. 2008. Т. 420. № 4. С. 500–503.

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

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОРФОЛИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ**

В. М. Гольшев

Новосибирский государственный университет  
Институт химической биологии и фундаментальной медицины,  
г. Новосибирск

Производные и аналоги нуклеиновых кислот (НК) используют как зонды для исследования биологических объектов, в системах генодиагностики, как терапевтические препараты и др. Уже разработаны ряд аналогов НК с измененными свойствами. Прогностический расчет характеристик новых соединений на основе нуклеиновых кислот является важной и актуальной задачей. Метод молекулярной динамики может выступать в качестве способа расчета физико-химических свойств биополимеров исходя из их атомарной структуры.

Морфолиновые НК являются незаряженными аналогами природных соединений, в которых рибозофосфатный остов заменен морфолиновым производным. Данные соединения могут быть более эффективны относительно нативных в ряде фундаментальных исследований и прикладных разработок. Однако детальных данных о физико-химических свойствах таких соединений в литературе не представлено, что не позволяет применять их с максимальной продуктивностью.

Целью данной работы является исследование физико-химических свойств морфолиновых производных экспериментальными подходами и методами компьютерного моделирования.

Методом термической денатурации определена термическая стабильность комплексов данных производных с комплементарными последовательностями ДНК и РНК. Вторичная структура олигонуклеотидов и их комплексов исследована методом кругового дихроизма. В рамках проведения компьютерных расчётов разработана процедура создания новых аналогов и производных нуклеиновых кислот, которая включает в себя квантово-химические расчеты, создание библиотек мономеров новых производных НК и механизм сборки олигомерных цепей.

Проводится сравнение полученных экспериментальных данных с результатами компьютерного моделирования методом молекулярной динамики.

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

## ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ОКСИГЕНАЦИИ И pH ИШЕМИЧЕСКОГО СЕРДЦА КРЫСЫ МЕТОДОМ ТОМОГРАФИИ ЭПР

А. А. Городецкий  
Новосибирский государственный университет  
Новосибирский институт органической химии  
им. Н. Н. Ворожцова СО РАН

Ишемия сердца вызвана недостаточным кровоснабжением сердечной мышцы и приводит к гипоксии и ацидозу миокардиальной ткани, что в конечном счете ведет к необратимому повреждению кардиомиоцитов и инфаркту миокарда. Неинвазивное наблюдение за функциональными параметрами микроокружения ткани может обеспечить важной информацией о механизмах ишемического повреждения.

ЭПР в низких магнитных полях позволяет неинвазивно изучать биологические объекты. Функциональные измерения ЭПР *in vivo* основаны на применении парамагнитных проб со спектральными характеристиками чувствительными к микроокружению. В данной работе мы применили специально разработанные нитроксильные радикалы для визуализации оксигенации и pH ишемического сердца крысы методом томографии ЭПР.

В этом исследовании мы использовали модель изолированного и перфузируемого сердца. Изолированные сердца перфузировали в присутствии парамагнитных проб непосредственно в резонаторе ЭПР спектрометра L-диапазона. Миокардиальную ишемию инициировали путем наложения лигатуры на нисходящую ветвь левой коронарной артерии. Измерения ЭПР проводили в спектрально-пространственных координатах. После реконструкции изображений спектральную информацию использовали для вычисления локальных значений концентрации кислорода и pH. В результате впервые в мире были получены карты оксигенации и pH ишемического сердца крысы. Наблюдаемая концентрация кислорода в здоровой ткани составляла 200 мм рт. ст., в то время как в ишемической области оксигенация опускалась до 20 – 50 мм рт. ст. pH ишемической области составлял 6.7 – 6.9.

Примененные в работе нитроксильные радикалы продемонстрировали хорошую функциональную чувствительность и высокую стабильность в миокардиальной ткани. Разработанные методы функциональной томографии ЭПР в перспективе могут стать ценным инструментом для биомедицинских исследований.

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

**АНАЛИЗ ХИМИИ ГОРЕНИЯ МЕТАНА ПРИ ДАВЛЕНИЯХ 1-5 АТМ**

А. М. Дмитриев

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Метан является основным компонентом природного газа, а также промежуточным продуктом горения тяжёлых углеводородов. Любой детальный химико-кинетический механизм горения больших углеводородов включает реакции окисления метана. Как правило, горение в используемых на практике устройствах происходит при давлениях выше атмосферного, поэтому понимание химии горения метана в условиях, близких к реальным, представляет большой интерес.

В данной работе проведён анализ двух химико-кинетических механизмов окисления метана, предложенных в литературе, использованных для моделирования горения стехиометрической смеси  $CH_4/O_2/Ar$  при давлениях 1, 3 и 5 атм. Цель данной работы заключается в установлении и объяснении основных тенденций изменения химии горения метана с повышением давления.

Проведено сравнение результатов моделирования с ранее полученными экспериментальными профилями мольной доли реагентов, основных стабильных продуктов и некоторых промежуточных соединений в пламени метана на плоской горелке при давлениях от 1 до 5 атм. Отмечены соответствия и расхождения между данными моделирования и экспериментов, в частности, качественно неверное описание механизмами изменения максимальных мольных долей этилена и ацетилена с ростом давления. Подробно исследованы реакционные пути окисления метана, заложенные в механизмах, построены соответствующие схемы превращений с учётом вклада каждой реакции в расходование того или иного компонента. Установлено, что в стехиометрических условиях с ростом давления роль реакций с участием радикала Н падает, а с участием радикала ОН возрастает.

*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

## ЗАВИСИМОСТЬ ВРЕМЕН ЯДЕРНОЙ СПИНОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ МОЛЕКУЛЫ 5-БРОМ-2,4-ДИФТОРАНИЛИНЕ ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

В. А. Егоров

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

ЯМР релаксометрия с быстрым переключением внешнего магнитного поля является широко используемым способом установления молекулярной подвижности в жидких растворах, полимерных материалах и биологических молекулах. Данный метод используется для нахождения магнито-полевой зависимости времен ядерной спиновой релаксации как протонов, так и гетероядер со спином  $\frac{1}{2}$ . Известно, что существенное влияние на поведение спиновой релаксации могут оказывать спин-спиновые взаимодействия [1]: в слабых магнитных полях спин-спиновые взаимодействия приводят к тому, что атомы оказываются «сильно связанными» и их времена продольной релаксации сравниваются.

Целью данной работы является рассмотрение влияния спин-спиновых взаимодействий на релаксацию протонов и гетероядер, в данном случае  $^{19}\text{F}$ , в различных магнитных полях. В ходе работы были получены зависимости времен релаксации  $T_1$  для протонов Н3 и Н6 от магнитного поля для 5-бром-2,4-дифторанилина. Промоделированы спектры ЯМР, найдены константы спин-спинового взаимодействия молекулы. Анализ результатов показывает, что в области слабых полей времена релаксации скалярно связанных протонов стремятся к одинаковому значению; кроме того, установлено существенное влияние спин-спиновых взаимодействий с ядрами фтора на поведение времен  $T_1$  релаксации протонов.

---

1. S. E. Korchak, K. L. Ivanov, A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, R. Kaptein, H.-M. Vieth, J. Chem. Phys., 137, 094503 (2012).

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук К. Л. Иванов, А. Н. Правдивцев

## ПОЛУЧЕНИЕ ТРИОКСИДА ВОЛЬФРАМА, ДИОКСИДА ТИТАНА И ИХ КОМПЛЕКСОВ С КИСЛОРОДОМ В МОЛЕКУЛЯРНОМ ПУЧКЕ

К. С. Ершов

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Большой интерес представляет исследование природы фотофизических и фотохимических процессов с участием фотокатализаторов окисления, таких как оксид титана, оксид вольфрама и другие. Детальную информацию о механизме этих процессов можно получить с использованием современных методов изучения фото процессов с участием молекул, таких как техника визуализации карт скоростей [1]. Для этого необходимо научиться генерировать кластеры молекул фотокатализаторов  $(\text{TiO}_2)_n$  и  $(\text{WO}_3)_n$  и их комплексы с кислородом в молекулярном пучке. Известно, что уже в маленьких кластерах оксида вольфрама(VI)  $n=4$  проявляются свойства объёмного вещества [2].

В представленной работе кластеры оксидов титана и вольфрама генерировались непосредственно в молекулярном пучке, так как сами по себе не являются летучими. Оксиды были получены из летучих соединений гексакарбонила вольфрама и изопророксида титана. Для фотовозбуждения комплексов и фотоионизации образующихся фотофрагментов использовалось излучение твердотельного Nd:YAG лазера на длине волны 266 нм.

В работе представлены результаты изучения фотохимических процессов, протекающих при УФ фотовозбуждении летучих соединений  $\text{W}(\text{CO})_6$  и  $\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$  с кислородом, полученные с помощью времяпролетной масс-спектрометрии и техники визуализации карт скоростей фотофрагментов.

---

1. Imaging in Molecular Dynamics: Technology and Applications // edited by B. J. Whitaker // New York: Cambridge University Press, 2003.

2. B. K. Rao et al. // Appearance of bulk properties in small tungsten oxide clusters // J. Chem. Phys., V. 121(19), P 9417-9422

Научные руководители – д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, канд. физ.-мат. наук С. А. Кочубей

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОСПИНОВЫХ ПАРАМАГНИТНЫХ  
СИСТЕМ С БОЛЬШИМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ В НУЛЕВЫХ  
МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ МЕТОДАМИ  
ИК- И ЭПР- СПЕКТРОСКОПИИ**

Л. А. Жукас

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

Парамагнитные системы, характеризующиеся полным спином  $S > 1/2$  и большим значением энергии расщеплений в нулевом магнитном поле (РНП) активно синтезируются и исследуются во всем мире, поскольку потенциально могут являться молекулярными ячейками хранения данных для более емких носителей информации.

Для определения характерных энергий РНП данных объектов наиболее популярным методом является ЭПР-спектроскопия в виду простоты проведения эксперимента и высокой точности измерения параметров РНП. Однако для больших значений РНП (например, РНП  $> 10 \text{ см}^{-1}$ ) эта методика неприменима, т.к. энергии кванта СВЧ недостаточна для детектирования резонансных спиновых переходов.

Для преодоления возникающих ограничений, в данной работе предложен метод измерения параметра РНП с использованием ЭПР спектрометра, собранного в синхротронном центре BESSY2 (Берлин, Германия). Установка позволяет использовать альфа-моду синхротронного излучения вкупе с внутренним источником ИК-Фурье спектрометра, позволяя покрыть частотный диапазон от  $200 \text{ см}^{-1}$  вплоть до  $5 \text{ см}^{-1}$ , что соответствует характерным энергиям резонансных спиновых переходов при наличии РНП. С помощью данного метода, а также стандартной ЭПР спектроскопии было исследовано 4 типа комплексов кобальта ( $S=3/2$ ) с различными предполагаемыми значениями РНП: от  $50$  до  $200 \text{ см}^{-1}$ . В ходе исследований для одного из комплексов наблюдалась линия поглощения на  $100 \text{ см}^{-1}$ , для этого соединения определены магнитные параметры такие, как g-тензор и РНП. Кроме того, по полученным данным определены характерные частоты лазерного излучения (ЛСЭ, ИЯФ СО РАН) для экспериментов по измерению РНП путем лазерной накачки спиновых уровней с одновременным регистрированием ЭПР-сигнала в X-диапазоне, результаты этого эксперимента также обсуждаются в данной работе.

*Данная работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (МК-3241.2014.3), гранта РФФИ (15-03-07640).*

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГОМОГЕННОЙ НУКЛЕАЦИИ ПАРА ХЛОРИДА ЦЕЗИЯ

В. Д. Зелик

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

Хорошо известно, что у наночастиц доля поверхностных атомов сопоставима с долей объемных, поэтому поверхность вносит существенный вклад в свойства наночастиц. Термодинамические свойства межфазной поверхности полностью характеризуются функцией состояния свободной удельной поверхностной энергией, которую Гиббс предложил называть поверхностным натяжением  $\sigma$ . В теории Гиббса  $\sigma$  является функцией радиуса кривизны. Напрямую измерить  $\sigma$  для наночастиц не возможно. Однако скорость гомогенной нуклеации является функцией поверхностного натяжения. Поэтому можно определять  $\sigma$  на основе экспериментальных данных (скорость нуклеации, пересыщение и температура) используя строгую формулу для скорости нуклеации [1].

Настоящая работа посвящена исследованию гомогенной нуклеации пара хлорида цезия и определению поверхностного натяжения его наночастиц. Исследование гомогенной нуклеации пара хлорида цезия проводилось в ламинарной проточной камере. Концентрации и распределения частиц на выходе из камеры были определены с помощью диффузионного спектрометра аэрозолей (ДСА). Морфология частиц и их размер были исследованы с помощью просвечивающего электронного микроскопа. Зона нуклеации внутри камеры была определена методом отсечки прессыщения. Распределение температуры внутри камеры измерено с помощью термопары, распределение концентрации внутри камеры определено из экспериментально измеренного потока массы вдоль аксиальной координаты. Это позволило определить распределение пересыщения внутри камеры.

Получено, что при температуре  $T \approx 598$  К и пересыщении  $S \approx 2.6 \cdot 10^4$  скорость нуклеации составляет  $J \approx 10^{10}$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup>. Определена величина поверхностного натяжения наночастиц хлорида цезия с радиусом  $R_s \approx 0.39$  нм,  $\sigma \approx 94$  дин/см, что на 70% выше поверхностного натяжения плоской поверхности.

---

1. S.V. Vosel at el. // J. Chem. Phys. 131. 204508 (1-11) (2009).

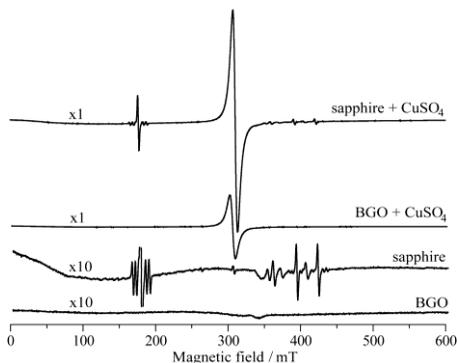
## РАЗРАБОТКА ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ЭПР РЕЗОНАТОРА НА ОСНОВЕ ГЕРМАНАТА ВИСМУТА

М. Ю. Иванов

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

Тип СВЧ резонатора, источник СВЧ излучения и детектор играют важную роль в чувствительности современных ЭПР спектрометров. Диэлектрические СВЧ резонаторы стали очень популярны при использовании приборов X- и Q-диапазона рабочей частоты, они обладают высоким фактором заполнения и добротностью. Существенным недостатком диэлектрических резонаторов является наличие дефектов в диэлектрическом материале, что ведет к нежелательному сигналу ЭПР от базовой линии.

В данной работе проведена разработка диэлектрического ЭПР резонатора на основе германата висмута ( $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ , далее BGO). Проведено сравнение характеристик диэлектрического резонатора из BGO с широко-используемым резонатором из сапфира. Сравнение свойств резонаторов выявило, что температурная зависимость добротности резонатора из BGO более резкая и само значение добротности выше по сравнению с резонатором из сапфира в диапазоне 5-20 К. При сравнении базовых линий как источник опорного ЭПР сигнала был выбран  $\text{Cu}_2\text{SO}_4$ . Видно, что BGO почти не содержит дефектов, которые проявляются в ЭПР эксперименте. С помощью пакета CST MW STUDIO был проведен расчет резонаторов с внутренним диаметром 2, 3, 4 и 5 мм с  $\text{TE}_{011}$  в качестве основной моды. Ожидается, что изготовленные по данным расчетам резонаторы будут иметь больший фактор



заполнения и одновременно более чистую базовую линию по сравнению с коммерческим резонатором из сапфира.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук М. В. Федин, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДНК-ДУПЛЕКСА С ПРИСОЕДИНЕННЫМИ ТРИТИЛЬНЫМИ РАДИКАЛАМИ

Е. Д. Кадцын, А. В. Аникеенко

Новосибирский государственный университет

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

Было проведено молекулярно-динамическое моделирование ДНК-дуплекса, состоящего из десяти пар оснований с присоединенными к его концам двумя тритильными радикалами. Интерес к этим радикалам вызван тем, что они стабильны при комнатной температуре, и при помощи импульсного ЭПР можно найти расстояние между их центрами. Таким образом, используя эти радикалы в качестве спиновых меток, можно определять строение различных биологических молекул при комнатных температурах.

Сначала нами была сделана параметризация тритильного радикала с пиперазиновым линкером в пакете AMBER14 с использованием универсального поля сил GAFF. Расстановка частичных зарядов проводилась с помощью квантово-химического расчета неограниченным методом Хартри-Фока и процедуры RESP. Затем в пакете Gromacs было проведено молекулярно-динамическое моделирование ДНК-дуплекса с присоединенными тритильными радикалами в окружении 15236 молекул TIP3P воды и 18 ионов натрия. Равновесное моделирование системы длительностью 100 нс проводилось в NPT ансамбле.

Было построено распределение расстояния между центрами тритильных радикалов. Качественно оно совпадает с полученным в работе [1], где это распределение было измерено экспериментально и так же рассчитано с помощью молекулярно-динамического моделирования. Основное отличие наших результатов состоит в том, что мы наблюдали явное плечо на распределении на 3.8 нм. Анализ молекулярно-динамической траектории показал, что оно соответствует конформациям комплекса, где один из тритильных радикалов повернут в сторону от дуплекса, в то время как большую часть времени радикалы закрывают концы олигонуклеотидной цепочки.

---

1. Shevelev G. Y. et al. Physiological-Temperature Distance Measurement in Nucleic Acid using Triarylmethyl-Based Spin Labels and Pulsed Dipolar EPR Spectroscopy // J. Am. Chem. Soc. 2014. Vol. 136, № 28. P. 9874–9877.

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

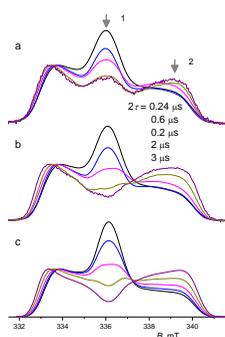
## ОРИЕНТАЦИОННОЕ САМОУПОРЯДОЧИВАНИЕ СПИН-МЕЧЕНОГО ХОЛЕСТЕРИНА В ЛИПИДНЫХ БИСЛОЯХ

М. Э. Кардаш

Новосибирский государственный университет

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

Взаимодействие холестерина и липидов в клеточной мембране приводит к образованию локальных неоднородностей – липидных рафтов, которые участвуют в функционировании мембранных белков. Поэтому в настоящее время актуальным является развитие новых подходов для изучения этих взаимодействий. В данной работе методом электронного спинового эха исследовался спин-меченый аналог холестерина в модельных липидных мембранах [1]. Концентрация спин-меченого



холестерина варьировалась от 0.1 до 4 мол.%. Скорость спада сигнала эха зависит от взаимной ориентации спиновых меток, что влияет на форму эхо-детектированного (ЭД) спектра ЭПР. На рис.1 показаны ЭД спектры при разных величинах временной задержки  $\tau$ , нормированные к одинаковой амплитуде низкочастотной компоненты. Видно, что спектр для системы с холестерином (а) отличается от спектра системы сравнения со спин-меченой стеариновой кислотой (б) и от спектра, смоделированного для спиновых меток с равномерным распределением ориентаций (с). Его центральная компонента не образует провала с увеличением  $\tau$ . Это можно объяснить существованием доменов, в которых молекулы холестерина ориентированы одинаково. Тогда скорость спада эха будет одинаковой для всех компонент спектра. Из полученных данных также следует, что холестерин в доменах не агрегируется (схематически вид сверху на микродомены в мембране представлен на рис.2). То есть, можно говорить о существовании дальнедействующего взаимодействия молекул холестерина в мембране.

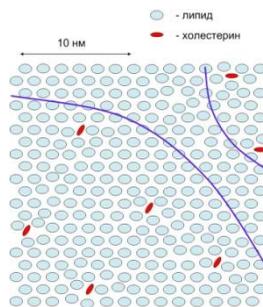


Рис.2

1. М. Е. Kardash and S. А. Dzuba, J. Chem. Phys., 141, 211101-4 (2014).

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

## ИЗУЧЕНИЕ РАДИКАЛОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ФОТООБЛУЧЕНИИ БИПИРИДИЛА, ФЕНАНТРОЛИНА И БАТ- ФЕНАНТРОЛИНА, МЕТОДАМИ ЭПР И ДЭЯР

Р. О. Колбаскин

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

Бипиридил, фенантролин и бат-фенантролин являются довольно распространенными лигандами, используемыми в синтезе множества координационных соединений и полимеров. Тем не менее, оказалось, что оптические элементы, созданные с их применением, быстро теряют прозрачность при облучении. Предположительно, это связано с образованием радикалов при облучении этих лигандов. Для предотвращения этого эффекта необходимо знать структуру образующихся радикалов. В данном случае эффективным методом изучения является ЭПР спектроскопия.

В данной работе были получены и исследованы ЭПР спектры данных радикалов в Q и X диапазонах, а также спектры ДЭЯР на частоте протонов. Для получения радикалов образцы вышеупомянутых лигандов были растерты и облучались в течении 30-50 часов излучением ртутной лампы высокого давления (ДРШ500). Разумно предположить, что под действием фотооблучения образуются анион-радикалы исследуемых веществ. Для одного из лигандов были известны изотропные константы СТВ, и можно было бы ожидать схожее, либо уширенное из-за анизотропии расщепление в спектре ДЭЯР. Однако экспериментальные спектры оказались наоборот примерно в два раза уже. Также можно предположить разрыв С-С или С-N связей под действием света и образование стабильных бирадикалов. Однако, в этом случае спин-спиновое расстояние будет достаточно коротким, что должно привести к огромным значениям дипольного спин-спинового взаимодействия и, как результат, характерным особенностям в спектрах ЭПР, которые не наблюдаются. Впоследствии из работ по структурному анализу было выяснено, что молекулы изучаемых веществ в кристалле упакованы парами параллельно друг над другом ( $\pi$ -stacking). При этом межмолекулярное расстояние оказывается достаточно малым, и возбужденный электрон может перескочить на соседнюю молекулу с образованием пары катион-анион. Подобная структура объясняет свойственное для бирадикала сужение спектра ДЭЯР в два раза. Компьютерное моделирование подобных структур при этом дает спектры ЭПР в значительной мере схожие с экспериментальными.

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ АГРЕГАЦИИ ЛИЗОЦИМА В АНАЭРОБНЫХ И АЭРОБНЫХ УСЛОВИЯХ**

Ю. В. Копыльцова

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск

При ежедневном попадании УФ-излучения в ткани хрусталика происходит его поглощение основным УФ-фильтром хрусталика – кинуренином (КН) и его производными. Интермедиаты, образующиеся при облучении кинуренинов УФ излучением, способны вступать в реакции с белками, приводя к необратимым модификациям. Накопление различных модификаций может приводить к потере водорастворимости белков и образованию высоко молекулярных агрегатов. Эти процессы могут во многом способствовать развитию катаракты.

Основными целями данной работы являются: 1) установление качественного характера агрегации модельного белка лизоцима при фотолизе в анаэробных и аэробных условиях в присутствии кинуреновой кислоты (КНК), одного из продуктов термического превращения КН; 2) исследование влияния импульсного (лазер, 355 нм) и постоянного (ртутная лампа) источников возбуждения. Анализ водных растворов белка после фотолиза проводился методом гель-электрофореза.

В результате анаэробного фотолиза водного раствора белка наблюдается образование димеров, тримеров и агрегатов с более высокой молекулярной массой. 1) В случае насыщения кислородом или воздухом фотоагрегация происходит заметно медленнее. Это объясняется тем, что кислород является тушителем молекул КНК в триплетном состоянии, предотвращая реакции фотовозбужденной КНК с молекулами белка. 2) При использовании постоянного источника излучения наблюдается более интенсивная агрегация белка. Это связано с тем, что при непрерывном излучении количество образующихся триплетов КНК в единицу времени существенно ниже, чем при импульсном излучении. В результате снижается вклад триплет-триплетной аннигиляции в гибель триплетов КНК, тем самым увеличивается количество элементарных реакций этого интермедиата с лизоцимом. Полученные результаты показывают, что в хрусталике, который содержит малое количество кислорода, может иметь место подобная агрегация белков, что со временем вносит вклад в развитие катаракты.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук П. С. Шерин

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КОНВЕРСИИ ОТ ВРЕМЕНИ ОБЛУЧЕНИЯ ВЕЩЕСТВА В РАСТВОРЕ.

В. С. Краюхина

Томский государственный университет,

Исследования замещенных кумаринов находят свое применение во многих отраслях науки и техники. Например, некоторые кумарины применяют для очистки воды от фенолов, грибков и пестицидов. А так же активно используются в медицине. В данный момент, они применяются в медицине для ПУФА-терапии. Но для неё используются только 5-МОП и 8-МОП, поэтому необходимо исследование новых соединений для расширения ряда веществ и подбора соединения с наилучшими свойствами.

В целях исследования конверсии со временем облучения вещества в растворе, был проведен следующий эксперимент: были взяты растворители с разным пропорциональным содержанием в этаноле перекиси водорода. В первом случае была взята  $1/2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  и  $1/2\text{H}_2\text{O}_2$ . Затем добавив в этот растворитель исследуемое соединение раствор облучали в течении 2х часов лампой ХеВг с длиной волны 283нм. Так же исследуемые вещества облучались лампой КrСl длиной волны 222нм, но по данным полученным в этой серии экспериментов наблюдали другие закономерности. Изменения, которые происходили в исследуемых растворах, фиксировали с помощью спектрофотометра ShimadzuUV-160. Затем, эксперимент проводили для 1/4 и 1/8 концентрации перекиси водорода, а четвертая серия была сделана только в этаноле.

Исследуемые объекты: 5-метоксипсорарен (5-МОП) (использовалось в качестве известного вещества); 4',5'-диметил-3,4-циклогексилпсорален; 4'-метил,3,4-циклогептил псорален (КС4).

В результате проведенных экспериментов при построении графиков наблюдалось, что при увеличении концентрации  $\text{H}_2\text{O}_2$  происходит распад исследуемого соединения и, следовательно, приводит к увеличению конверсии по сравнению с первоначальным раствором (без добавления  $\text{H}_2\text{O}_2$ ). Присутствие  $\text{H}_2\text{O}_2$  является определяющим фактором для достижения высоких значений конверсии. Тем не менее, нет никакого существенного улучшения для более высоких пропорций.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Н. Г. Брянцева, д-р физ.-мат. наук, проф. О. Н. Чайковская

## СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР МЕТАБОЛИТОВ ТКАНЕЙ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ IN VITRO ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СТЕАТОЗА ПЕЧЕНИ

М. С. Крестина

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

Отклонение от нормы в обмене веществ является одним из самых ранних откликов организма на физиологические изменения, следовательно, это может служить маркером для определения болезней или показателем эффективности терапии, даже на ранних стадиях развития патологии. С помощью ядерного магнитного резонанса можно идентифицировать продукты обмена веществ и установить их содержание. Целью работы является изучение изменений в составе метаболитов в тканях мозга и печени методом спектроскопии ЯМР при моделировании стеатоза печени лабораторных животных. В качестве экспериментальной модели использовано воздействие на крыс этанола и препарата «рейши», направленного на восстановление исследуемых тканей после воздействия этанола.

Животные были разбиты на 3 группы (контроль, негативный контроль, эксперимент), которые в течение 26 дней получали воду, этанол, этанол и «рейши» соответственно. Была выбрана и проверена методика приготовления образцов для дальнейшего исследования методом ЯМР  $^1\text{H}$  in vitro. Были получены спектры ЯМР и произведена их расшифровка. В результате удалось идентифицировать 38 метаболитов в спектрах печени и 25 в спектрах мозга. Сравнение содержания продуктов обмена веществ по группам выявило, что средний разброс в каждой из групп составил около 15%. Из 28 метаболитов печени для 17 метаболитов изменения превышают ошибку измерения, а для 5 из них изменения соответствуют теоретическим ожиданиям. Так концентрация триметиламинооксида в негативной группе увеличилась в два раза, а в экспериментальной только в 1.5. Содержание изолейцина в негативном контроле уменьшилось в 1,2 раза под воздействием этанола, а в экспериментальной группе оно не отличается. Похожее поведение наблюдалось для оксимасляной кислоты, валина и глутамина. Были приготовлены и проанализированы образцы, взятые из печени одного животного, средний разброс в этом случае составил около 12%. Было установлено, что уровень pH коррелирует с изменением химических сдвигов некоторых метаболитов.

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНИЗОТРОПИИ СТВ НА ВРЕМЯРАЗРЕШЕННЫЙ МАГНИТНЫЙ ЭФФЕКТ В РЕКОМБИНАЦИОННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ**

Г. А. Летагин

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

Исследование транспорта зарядов в органических аморфных веществах является интересной темой, так как транспорт зарядов играет определяющую роль в органической фотовольтаике, спинтронике, электролюминесцентных устройствах и т. п. При исследовании носителей заряда в растворах хорошо зарекомендовал себя метод времяразрешенного магнитного эффекта (ВМЭ) в рекомбинационной флуоресценции спин-коррелированных ион-радикальных пар. Среди достоинств данного метода – возможность идентифицировать носители заряда с наносекундным временем жизни, возможность установить механизм транспорта заряда в жидкости по модуляции сверхтонкого взаимодействия (СТВ).

По сравнению с раствором, в матрице изменяется механизм транспорта зарядов и кинетика рекомбинации, начинает играть роль анизотропия СТВ. Для применения метода ВМЭ при исследовании носителей заряда в аморфных средах необходимо изучение перечисленных выше факторов; в частности цель этой работы – исследовать влияние анизотропии СТВ.

В данной работе экспериментально удалось пронаблюдать изменение кривых ВМЭ при переходе к матрице от раствора, которые качественно согласуются с ожидаемым эффектом появления не усредненной движением анизотропии СТВ. Этот результат подкреплен решением задачи о спиновой эволюции пары в приближении неразрешенного спектра ЭПР ион-радикала с учетом анизотропии СТВ.

С другой стороны, экспериментально было показано, что на вид кривой ВМЭ может оказывать серьезное влияние не только спиновая эволюция пары, но и механизм переноса заряда. Переход в эксперименте от раствора к матрице, показал, что применение метода ВМЭ в твердых матрицах будет более эффективным в рамках более широкого экспериментального подхода.

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

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА  
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ СИЛЬНО  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ  $\nu_1(A_1)$ ,  $2\nu_5(A_1)$ ,  
 $2\nu_5(E)$ ,  $\nu_4(E)$  МОЛЕКУЛЫ  $^{13}\text{CH}_3\text{D}$**

А. Г. Литвиновская, А. С. Белова  
Томский государственный университет

Основная задача спектроскопии высокого разрешения заключается в определении фундаментальных свойств на основе анализа тонкой колебательно вращательной структуры для различного типа молекул. Объектом настоящего исследования является один из дейтерированных изотопомеров молекулы метана, а именно  $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ . Во-первых, изучение спектров изотопомеров метана имеет фундаментальное значение, для теории химических связей, вращательной динамики в симметричных молекулах, нашего понимания структуры потенциальных гиперповерхностей и т.п. Во-вторых, исследуемая молекула является парниковым газом. Исходя из всего вышесказанного, исследование данного изотопомера - актуально для широкого круга задач атмосферной оптики, лазерной физики, физической химии и астрофизики. В настоящей работе, была изучена область спектра, ранее не исследуемая. Молекула  $\text{XY}_3\text{Z}$  вида – это молекула типа симметричного волчка ( $\text{C}_{3v}$ ). Она имеет 9 колебательных мод. Три из них невырожденные ( $A_1$ ) и три из них дважды вырождены ( $E$ ). Необходимо отметить, что наличие дваждывырожденных мод в молекуле приводит к сложной картине колебательно – вращательного спектра. Для его интерпретации необходимо использовать симметричные свойства молекул, применять результаты теории неприводимых тензорных систем для построения молекулярного гамильтониана, а также необходим учет резонансных взаимодействий. На основании всего изложенного, был произведен анализ спектра системы сильно взаимодействующих полос поглощения  $\nu_1(A_1)$ ,  $2\nu_5(A_1)$ ,  $2\nu_5(E)$ ,  $\nu_4(E)$  молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ . В результате анализа было проинтерпретировано около 1757 переходов для четырех полос с  $J_{\text{max}}=15$  и  $K_{\text{max}}=12$ . Были определены спектроскопические постоянные гамильтониана, описывающего вращательную структуру.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. О. Н. Улеников, д-р физ.-мат. наук, проф. Е. С. Бехтерева

## ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА В КОМПОЗИТЕ РЗНТ/РСВМ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОГО СПИНОВОГО ЭХА ВНЕ ФАЗЫ

Е. А. Лукина

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

Композит проводящего полимера РЗНТ и производной фуллерена РСВМ – один из самых широко используемых в органической фотовольтаике в качестве активного слоя фотоэлементов. Под действием света в нем происходит разделение зарядов, в ходе которого на границе раздела фаз донора и акцептора образуется промежуточное состояние – спин коррелированная радикальная пара, называемая состоянием с переносом заряда. Ранее это состояние было исследовано методом электронного спинового эха (ЭСЭ) в фазе и получена оценка расстояния между радикалами [1]. Однако метод ЭСЭ вне фазы, способный дать более подробную информацию о структуре радикальной пары и успешно применявшийся при изучении реакций фотосинтеза [2], не был ранее использован для изучения этой системы.

В данной работе был впервые получен сигнал ЭСЭ вне фазы от состояния с переносом заряда, что доказывает его спин-коррелированную природу, и оценено его время жизни при 65 К порядка 550 нс.

Для описания эволюции сигнала ЭСЭ вне фазы при увеличении задержки между СВЧ импульсами была предложена модель состояния с переносом заряда. Предполагается, что положительный заряд делокализован по цепи полимера на расстояние около 4 нм, что делает модель значительно более приближенной к реальности, чем при использовании модели точечного диполя. Электрон предполагается локализованным в пределах одной молекулы фуллерена, поэтому для его описания использована модель точечного диполя. При моделировании получено, что состояние с переносом заряда не может быть описано фиксированным расстоянием между радикалами; определено распределение по расстояниям между компонентами радикальной пары и среднее расстояние 2-3 нм.

- 
1. M. N. Uvarov, A. G. Popov et al. J. Struct. Chem. 4. 644-650 (2014).
  2. A. J. Hoff, P. Gast et al. Spectrochim. Acta. 54. 2283-2293 (1998).

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

## АНАЛИЗ ПРОБЛЕМ СИНТЕЗА ПЛЕНОК АМОРФНОГО УГЛЕРОДА МЕТОДОМ ИОННОГО ПУЧКА

Н. В. Нагирный

Новосибирский государственный университет

Пленки аморфного углерода (DLC, a-C, ta-C, a-C:H, ta-C:H) необходимы для решения задач в оптике, электронике, медицине благодаря свойствам близким к алмазу. Эффективным методом синтеза углеродных пленок является метод из ионных пучков низких энергий (20-150эВ). Известным способом получены пленки с высокими показателями твердости (до 35 ГПа), трибологическими характеристиками, спектральными характеристиками (ширина оптической щели более 2,5эВ) и высокой химической стойкостью. Однако существуют проблемы с повторяемостью и воспроизводимостью результатов синтезируемых покрытий в зависимости от свойств ионного потока. В реальности ионные источники могут изменять свои характеристики во время синтеза, одна из причин связана с образующимися пленками в области газоразрядной системы: образуются диэлектрические и проводящие пленки различного типа - от сплошных до дисперсных систем в виде "усов" и частиц порошка графита. Температурный режим подложки существенно влияет на формирование структуры пленки, что связано с метастабильным состоянием углеродных пленок. В данной работе анализируются известные результаты по синтезу пленок аморфного углерода с помощью ионного источника типа End-Hall. Рассматриваются свойства полученных покрытий с условиями синтеза с целью поиска оптимальных режимов для достижения лучших результатов. Рассмотрены модели формирования структуры углеродных пленок на основе экспериментальных данных различных методов синтеза, численных расчетов методами молекулярной динамики и Монте-Карло. Анализ показывает, что задача носит многопараметрический характер и существенное влияние оказывают энергия ионов, плотность потока и материал подложки, однако результаты разных авторов часто противоречат друг другу, что говорит о некоторых не учтенных параметрах синтеза. В докладе обсуждается влияние зарядового состава, магнитных полей и теплообмена на структуру пленки. Представлены результаты исследования пленок (напряжение разряда 30-150В, ток разряда 1-3А) на различных подложках (кремний, кварц, лейкосапфир). Характеристики полученных покрытий анализируются.

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

## **АКТИВНОСТЬ И СТАБИЛЬНОСТЬ ФЕРМЕНТОВ БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ СИСТЕМЫ БАКТЕРИЙ В СОСТАВЕ ПОЛИФЕРМЕНТНОЙ ЦЕПИ В ВЯЗКИХ СРЕДАХ**

М. С. Немчинова, О. С. Сутормин  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Актуальной задачей современной биофизики является изучение работы клетки как целостного, саморегулирующегося, устойчивого механизма. Новым направлением, позволяющим приблизиться к пониманию фундаментальных принципов внутриклеточной организации, является экспериментальное моделирование метаболизма бактериальной клетки на основе цепи сопряженных ферментативных реакций в условиях, приближенных к внутриклеточному окружению. Помимо этого исследования имеют прикладную ценность, поскольку могут быть использованы для повышения стабильности и чувствительности тест-систем на основе ферментов в целом и биолюминесцентных методов анализа, в частности.

Таким образом, целью данной работы является установление закономерностей влияния вязкого микроокружения на кинетические характеристики ферментативной системы лактатдегидрогеназа+NAD(P)H:FMN+оксидоредуктаза сопряженная бактериальной люциферазой и ее стабильность.

В ходе работы определены кинетические параметры биолюминесцентной триферментной системы в диапазоне температур от 15-80°C. Показано, что в вязких средах, моделируемых разными по природе растворителями - глицерином и сахарозой, кинетика биолюминесцентной вспышки принципиально отличается от кинетики моно- и би- ферментных бактериальных систем, входящих в состав триферментной. Кинетический профиль реакции начинается со спада максимальной интенсивности свечения, а не с монотонного роста, как это происходит в буфере. Температурный оптимум в буфере и при вязкости 0,5-1,3сП для триферментной системы равен 30°C. При увеличении вязкости до значений 1,76-6 сП ярко выраженный температурный оптимум исчезает, но зато система становится резистентной к высоким температурам. Таким образом, полученные результаты могут быть использованы для улучшения стабильности и активности биотестов, основанных на биолюминесцентной реакции бактерий.

*Работа выполнена при поддержке госконтракта №1762 Минобрнауки России и Сибирским федеральным университетом.*

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

## **ИЗМЕРЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В ГАЗОВОЙ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЕ, СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ ПРИ ГОРЕНИИ ОДИНОЧНОЙ ХВОИНКИ СОСНЫ СИБИРСКОЙ**

К. Н. Осипова

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

Моделирование распространения низового пожара по слою лесных горючих материалов (ЛГМ) является практически важной задачей. В литературе имеется большое количество работ по математическому моделированию распространения пожара по слою ЛГМ. Однако существует несравнимо меньше экспериментальных работ по исследованию и измерению основных параметров этого процесса. В частности практически не изучено горение отдельных составляющих ЛГМ, таких как хвоинки, мелкие ветки и др. Эти данные необходимы для проверки достоверности предположений, сделанных в теоретических моделях. Таким образом, одной из важнейших проблем дальнейшего развития моделей горения ЛГМ является получение точных экспериментальных данных по распределению температуры в газовой и конденсированной фазах, а также скорости горения отдельных элементов ЛГМ.

Таким образом, цель данной работы состоит в разработке методики по проведению измерений распределения температуры в газовой и конденсированной фазе. Также в ходе эксперимента определяется скорость распространения пламени при горении одиночной хвоинки сосны сибирской, являющейся основным представителем Сибирских бореальных лесов.

В рамках этой работы разработана методика измерения распределения температуры внутри и около одиночной хвоинки при распространении по ней пламени. Предложенная методика обеспечивает высокую точность и достоверность измерений температуры за счет использования тонких 0.02-0.05 мм Pt-PtRh(10%) термопар, внедренных внутрь фрагмента хвоинки, применения в системе измерения температуры 14-разрядного АЦП E14-140-M ("L-Card"), а также позволяет измерить скорость распространения пламени по одиночной хвоинке. Полученные результаты планируется использовать для проверки численных моделей горения ЛГМ.

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

## ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА БИФОРМИНГА УГЛЕВОДОРОДОВ МЕТОДОМ УСКОРИТЕЛЬНОЙ МАСС СПЕКТРОМЕТРИИ

П. Д. Парунин

Новосибирский государственный университет  
Институт катализа им Г. К. Борескова, г. Новосибирск  
Научно-образовательный центр энергоэффективного катализа,  
г. Новосибирск

Одним из промышленных методов переработки тяжелых углеводородных ресурсов является метод каталитической гидропереработки. Он проводится за счет добавления водорода к перерабатываемому сырью при высоких температурах и давлениях в присутствии катализатора. Применение чистого водорода негативно сказывается на стоимости процесса в связи с высокой стоимостью водорода, необходимостью ставить дополнительные сооружения для его очистки и другими капитальными и операционными затратами.

Одним из решений данной проблемы является проведение процесса с использованием не чистого водорода, а метано-водородных смесей или даже чистого метана на специальных катализаторах. Данный подход позволит сократить операционные затраты на водород и капитальные затраты, связанные с очисткой водорода. Таким образом, в данной работе исследуются процессы, происходящие при переработке жидких углеводородов в присутствии углеводородных газов, а именно процесс Биформинга – встраивание метана или других углеводородных газов (C2-C5) в молекулы жидких углеводородов.

Испытания катализаторов Биформинга проводили на лабораторной установке нефтепереработки в присутствии разных катализаторов. В качестве реагента использовалась тяжелая татарская нефть и модельные органические соединения и смеси, не содержащие видимые количества изотопа  $^{14}\text{C}$ . Для определения встраивания углеводородных газов в молекулы используемого сырья в работе использовался метан с радиоактивными метками  $^{14}\text{CH}_4$  в известной концентрации.

Количественное определение радиоактивного углерода ( $^{14}\text{C}$ ) в продуктах Биформинга проводилось путем анализа графитизированных проб, полученных из продуктов, методом ускорительной масс-спектрометрии (УМС). Используемая методика позволяет детектировать радиоактивный изотоп  $^{14}\text{C}$  в концентрации  $10^{-15}$  в сравнении с основным изотопом.

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

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПОЛИМЕРА РЗНТ В БИСЛОЯХ РЗНТ|РС<sub>60</sub>ВМ

А. Г. Попов

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

В настоящий момент большой интерес представляют солнечные батареи, созданные на основе органических веществ. Наибольшее распространение получили батареи, созданные на концепции объемного гетероперехода, в которой полимер представляет собой полиориентированную систему. Между тем, представляет интерес исследование светоиндуцированных радикалов в слоях с упорядоченной структурой. Целью данной работы является создание упорядоченных бислоев и изучение ориентации полимерных цепей в таких слоях.

В данной работе в качестве компонент активного слоя использовались производное фуллерена РС<sub>60</sub>ВМ и проводящий полимер поли(3-гексилтиофен-2,5-диил), РЗНТ. Бислои были нанесены методом центрифугирования из ортогональных растворителей. Характерная толщина слоя РЗНТ согласно данным атомно-силового микроскопа составила около 35 нм, что сравнимо с длиной диффузии экситона порядка 20 нм.

Для изучения ориентационной зависимости полимерных цепей были получены светоиндуцированные спектры ЭПР в X и Q-диапазонах. По данным моделирования полиориентированной системы катион-радикал РЗНТ<sup>+</sup> имеет анизотропный g-фактор  $g=[2.002\ 2.003\ 1\ 2.004]$ . Установлено, что в бислое спектр ЭПР существенно зависит от ориентации образца. В различных ориентациях образца наблюдается смещение ЭПР линии радикала РЗНТ<sup>+</sup>, которое является следствием существования упорядоченности полимерных цепей в бислое РЗНТ|РС<sub>60</sub>ВМ.

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

## ДИНАМИЧЕСКИЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ПЕРЕХОД В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СРЕДАХ

Е. А. Пушкина

Новосибирский государственный университет

Взаимосвязь структурно-динамических свойств и физиологической активности биосистем является сейчас предметом интенсивных исследований. Недавно было установлено, что в системах с некристаллической структурой существуют интенсивные колебания атомов и молекул, которые являются гармоническими ниже температуры т.н. динамического перехода и становятся ангармоническими выше ее. Для биосистем температура перехода лежит в интервале 200 – 230 К. Известно, что динамический переход существенным образом влияет на физиологическую активность

этих систем. Указанные колебания и динамический переход были зарегистрированы методами рассеяния нейтронов и мессбауровского поглощения. В настоящей работе эти явления изучаются с помощью метода импульсного электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) спиновых зондов и меток. Преимуществами импульсного ЭПР являются его чувствительность к ориентационному движению молекул, относительная доступность эксперимента и возможность путем селективного мечения изучать движения в разных участках сложных супрамолекулярных структур. В работе описываются результаты исследования подробной зависимости от температуры скорости анизотропной релаксации  $W_{anis}$  для нитроксильных радикалов двух типов в молекулярном стекле ортотерфенила. Установлено, что выше  $\sim 240$ К для обоих радикалов наблюдается резкое увеличение  $W_{anis}$ , что согласуется с известными из литературы результатами, полученными методом нейтронного рассеяния. Это совпадение можно объяснить проявлением явления динамического перехода в данной системе.

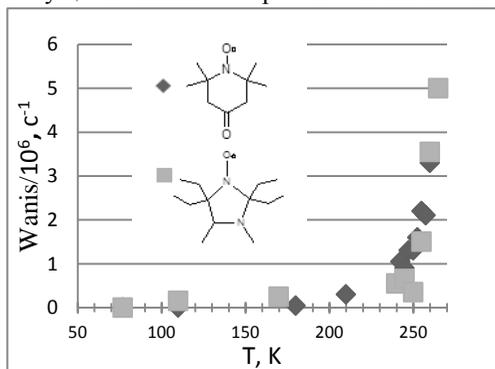


Рис. 1

Преимуществами импульсного ЭПР являются его чувствительность к ориентационному движению молекул, относительная доступность эксперимента и возможность путем селективного мечения изучать движения в разных участках сложных супрамолекулярных структур. В работе описываются результаты исследования подробной зависимости от температуры скорости анизотропной релаксации  $W_{anis}$  для нитроксильных радикалов двух типов в молекулярном стекле ортотерфенила. Установлено, что выше  $\sim 240$ К для обоих радикалов наблюдается резкое увеличение  $W_{anis}$ , что согласуется с известными из литературы результатами, полученными методом нейтронного рассеяния. Это совпадение можно объяснить проявлением явления динамического перехода в данной системе.

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

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПРИ ДЕТОНАЦИИ ТАТБ

И. А. Рубцов

Новосибирский государственный университет  
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск

Для высокотехнологичного использования взрывчатых веществ (ВВ) нужны более глубокие знания о процессе взрыва для оптимизации производства. Исследования электрофизических свойств при детонации ВВ начались около 60 лет назад, когда была обнаружена неожиданно высокая электропроводность продуктов детонации. Электропроводность интересна как для практического использования, так и как чувствительный инструмент для диагностики процессов, происходящих в детонационной волне. Так, для большинства ВВ узкая зона энерговыведения и интенсивной химической реакции проявляется в виде интенсивного пика на зависимости электропроводности от времени. Это позволяет без вмешательства во взрывной процесс определять продолжительность зоны реакции в детонационной волне.

Получено распределение электропроводности при детонации взрывчатого вещества на основе ТАТБ ( $C_6H_6N_6O_6$ ) для двух плотностей – 1.3 и 1.8 г/см<sup>3</sup>. На всех профилях выделяется пик длительностью приблизительно 0.1 мкс, который хорошо согласуется с длительностью зоны химической реакции, известной из литературы. Наблюдается протяженная область электропроводности в волне Тейлора. Максимальное значение электропроводности возрастает в 4 раза при повышении плотности на 40 %.

Данные этой работы удовлетворительно согласуются как по максимальным значениям (17 и 4 Ом<sup>-1</sup>см<sup>-1</sup> соответственно), так и по длительности области, которую уместно соотносить с химиком, с данными работы [1].

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-03-01039.*

---

1. Горшков М. М., Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л. и др. Кинетика электропроводности продуктов детонации ТАТБ как индикатор процесса роста наночастиц углерода // Физика горения и взрыва, 2007. Т. 43. № 1. С. 92-98.

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

## **ЗАВИСИМОСТЬ ВРЕМЕН ЯДЕРНОЙ СПИНОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ $^1\text{H}$ И $^{31}\text{P}$ АДЕНОЗИНМОНОФОСФАТА ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ pH ВОДНЫХ РАСТВОРОВ**

А. Х. Тураханов

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

Цель работы – экспериментальное и теоретическое исследование зависимости времен ядерной спиновой релаксации от внешнего магнитного поля при различных значениях pH водных растворов. Исследование дисперсии ядерной спиновой релаксации – метод, используемый для определения параметров молекулярной подвижности. Изучение зависимости времен продольной релаксации спинов от внешнего магнитного поля позволяет детально охарактеризовать внутри- и межмолекулярные движения. В данной работе исследовались полевые зависимости времен ядерной спиновой релаксации в молекуле аденозинмонофосфата (АМФ) методом быстрого переключения внешнего магнитного поля  $V_{\text{pol}}$  в комбинации с регистрацией спектров ЯМР высокого разрешения.

Исследования времен продольной спиновой релаксации ядер  $^1\text{H}$  и  $^{31}\text{P}$  проводились для АМФ в диапазоне  $V_{\text{pol}}$  от 0.1 мТл до 7 Тл. Обнаружено существенное влияние скалярного взаимодействия спинов на времена релаксации протонов. В слабых магнитных полях благодаря сильной связи спины приходят в термическое равновесие с одинаковой скоростью релаксации. А в сильном магнитном поле каждый спин релаксирует со своей индивидуальной скоростью релаксации. Была исследована зависимость химических сдвигов протонов H2 и H8 молекулы АМФ от pH водных растворов, определены константы кислотности. Для экспериментальных данных была выявлена pH зависимость характерного значения напряженности магнитного поля, в котором меняется скорость релаксации. Результаты моделирования зависимостей времен релаксации  $T_1$  от магнитного поля хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Научные руководители – А. Н. Правдивцев, д-р физ.-мат. наук  
А. В. Юрковская

## **ВЛИЯНИЕ ВЯЗКОСТИ И pH РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ НА КИНЕТИКУ ПОЛИФЕРМЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СВЕТЯЩИХСЯ БАКТЕРИЙ**

Д. И. Тюменцева, О. С. Сутормин  
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Моделирование физико-химических характеристик реакционной среды для ферментативного катализа в последнее время получило широкое распространение, поскольку позволяет моделировать многие биохимические процессы, например, функционирование белка в условиях, близких к естественным (*in vivo*). Изучение «эффектов среды» или «дизайн реакционной среды» на ферментативные реакции в настоящее время широко применяется к изучению механизмов ферментативного катализа и является эффективным подходом для исследования кинетики полиферментных систем. Полиферментная система лактатдегидрогеназа + NAD(H):FMN-оксидоредуктаза, сопряженная с бактериальной люциферазой, является уникальным объектом для изучения метаболических цепочек в клетке, поскольку в ходе реакции энергия химических связей трансформируется в световую, и имеет широкое прикладное значение для экологии, медицины и других областей.

Целью данной работы было изучение влияния вязкости и pH реакционной среды на кинетику триферментной системы бактериальной биолюминесцентной реакции.

В ходе данной работы была исследована pH-зависимость активности триферментной биолюминесцентной системы в реакционных средах различной вязкости в диапазоне от 5-50%. pH-оптимум триферментной системы в буфере наблюдается при pH 7,1. Данные характеристики отличаются от полученных ранее для биферментной системы NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза+бактериальная люцифераза, который равен pH 6,8. Оптимум pH среды для триферментной сопряженной реакции в диапазоне вязкостей от 5-50% не изменяется и составляет 7,1.

*Работа выполнена при поддержке госконтракта №1762 Минобрнауки России и Сибирским федеральным университетом.*

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

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РЕАКЦИЙ ТЕРМОЛИЗА БОГАТЫХ АЗОТОМ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

М. В. Шахова

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

Богатые азотом гетероциклы и их производные представляют значительный интерес в качестве экологически безвредных высокоэнергетических соединений. Детальная информация о механизме и константах скорости первичных реакций термического разложения важна для решения задачи стабилизации и безопасного хранения энергетических материалов. Экспериментальное получение таких данных крайне затруднительно из-за большого количества одновременно протекающих процессов в газовой фазе и в расплаве с участием большого количества короткоживущих интермедиатов. В то же время, квантовохимические расчеты с использованием современных методов позволяют определить эти величины с высокой точностью.

Основной задачей данной работы является изучение первичных реакций разложения диаминотетразола (DAT, схема 1), а также недавно синтезированного (2011 г.) азобистетразола (ABT, схема 1). Для расчетов были использованы методы теории функционала плотности (DFT) и развитые в последние годы высокоточные явно коррелированные CCSD(T)-F12 методы.

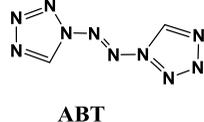
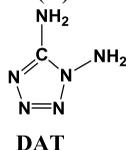


Схема 1

В рамках поставленной задачи были определены таутомеры, играющие наиболее важную роль в механизме термолиза DAT и ABT, преобладающие пути распада и основные продукты первичных реакций. Расчеты показали, что для DAT доминирует канал распада с раскрытием тетразольного цикла и последующим элиминированием  $N_2$  (активационный барьер составляет около 45 ккал/моль). Для ABT также доминирует канал разложения с молекулярного азота, при этом активационный барьер составляет около 29 ккал/моль, что хорошо согласуется с наблюдаемой высокой чувствительностью данного соединения.

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

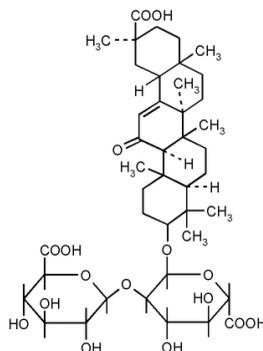
## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕМБРАНОМОДИФИЦИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ КИСЛОТЫ

И. Е. Апанасенко

Новосибирский государственный университет

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

Глицирризиновая кислота (ГК) – природное вещество содержащееся в корнях растения солодки. ГК, благодаря своим амфифильным свойствам, может образовывать супрамолекулярные комплексы с гидрофобными лекарственными препаратами, значительно усиливая при этом их терапевтическую активность. Была выдвинута гипотеза, что данный эффект может быть связан не только с увеличением растворимости лекарственных соединений, но и с влиянием ГК на проницаемость клеточных мембран для молекул лекарств. Для выяснения этого вопроса нами было изучено влияние ГК на различные функциональные характеристики мембран, в том числе на проницаемость, эластичность и подвижность молекул липидов.



Подвижность липидов исследовалась в бислое липосом в присутствии и отсутствии ГК методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Для выяснения вопроса о встраивании молекул ГК в мембрану и ее прохождения сквозь липидный бислой мы использовали подход, связанный с использованием шифт-реагентов, которые сдвигают сигналы ЯМР, что позволяет разделить сигналы от внешнего и внутреннего слоев мембраны. Это позволило отдельно изучить влияние ГК на подвижность липидов во внешнем и внутреннем слое. В работе использовались несколько типов шифт-реагентов: гидрофильные, остающиеся снаружи бислоя, и гидрофобные, встраивающиеся внутрь бислоя. Полученные данные позволили сделать вывод о механизме взаимодействия ГК с мембраной.

Актуальность данной работы связана с перспективой использования ГК в качестве средства доставки лекарственных препаратов, обладающих низкой растворимостью и биодоступностью.

Научные руководители – О. Ю. Селютина, д-р хим. наук Н. Э. Поляков

## МЕТОД МАКСИМАЛЬНОЙ ЭНТРОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИК СПАДА ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Д. О. Епланов

Новосибирский государственный университет.

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

Флуоресцентная времязрешенная спектроскопия – классический метод для исследований биологических систем, таких как живые клетки, мембраны и белки. Например, для характеристики конформационных изменений белков, их сворачивания и связывания с лигандами, для отслеживания диффузии малых молекул, ионного и энергетического транспорта. Флуоресцентные кинетики таких процессов интерпретируются как суперпозиции дискретных процессов с различными временами жизни. Параметрические методы, часто используемые для анализа кинетик – наименьших квадратов и максимального правдоподобия – имеют некоторые недостатки: требуют заранее определенное количество процессов, дающих вклад в кинетику, а также, усложняются по мере увеличения количества процессов из проблемы локальных минимумов. Однако, численный метод максимальной энтропии позволяет получить распределение времен жизни на заданном интервале, что позволяет оценить количество процессов и их относительные интенсивности.

Целью данной работы было создание устойчивого алгоритма с использованием предложенного метода для анализа кинетик спада флуоресценции: получения распределений времен жизни, определения числа процессов и отношений их интенсивностей; а также, исследование границ применимости метода, его разрешающей способности и чувствительности, и его реализация в программном обеспечении, пригодном для использования специалистами из областей химии, биологии и медицины, совместимым со множеством выпускаемых флуориметров и требующей минимальной настройки.

В ходе данной работы создан работающий алгоритм, позволяющий получать распределения времен жизни из входных экспериментальных данных. Алгоритм опробован на моделированных и экспериментальных кинетиках, позволяет выбирать требуемую точность, изменяя количество итераций и компонент в функции, приближающей кривую флуоресценции, а так же вычислять средние значения амплитуд и времен жизни в выделенной области.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Ю. И. Глазачев

## **РАЗРАБОТКА ЭЛЕМЕНТА НЕОХЛАЖДАЕМОЙ МЕГАПИКСЕЛЬНОЙ МАТРИЦЫ ПРИЕМНИКОВ ИК ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК**

С. Д. Иванов

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

Тепловидение является мягким, неинвазивным методом получения информации об объекте, именно поэтому за последние 20 лет оно получило широкое распространение в медицине. Так, разработаны и используются методики диагностики патологий сосудов конечностей, опухолей молочных желез, лимфоузлов. Многие операции на сосудах проводятся при тепловизионном контроле.

Пирозэлектрический эффект является одним из известных физических принципов построения неохлаждаемых тепловизоров. Существующие устройства имеют небольшую размерность (300x300), ограниченную физико-технологическими факторами, в первую очередь проблемами теплоизоляции чувствительного элемента, и достаточно низкую чувствительность. В связи с этим возникает задача разработки принципиально новых тепловизионных систем, более технологичных, чувствительных и обладающих в то же время большой размерностью - до 1000x1000 элементов и более.

В процессе работы экспериментально были определены зависимости пирозэлектрического коэффициента от толщины пленок разной структуры.

Рассматривается возможность создания многоэлементной ИК матрицы со следующими конструктивными особенностями:

1. Исключение традиционной для современных неохлаждаемых ИК – матриц теплоизоляции чувствительного элемента.
2. Регистрация ИК излучения не на накоплении тепла в объеме элемента, а на накоплении пирозэлектрического заряда за время кадра.
3. Высокочастотная модуляция ИК – излучения, до 10 кГц и более, за счет использования новых микроэлектромеханических устройств.
4. Создание чувствительного элемента на основе высококачественных пирозэлектрических пленок с высоким значением пирозэлектрического коэффициента.

Для данного подхода определены конструктивные параметры элемента для получения более высоких характеристик мегапиксельной матрицы тепловизора.

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

## **ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОСНОВНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИМЕРНЫХ МИКРОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕГО ПРОТОЧНОГО ЦИТОМЕТРА**

А. Н. Красулина, В. Ф. Кузин

Новосибирский государственный университет

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

В настоящее время полимерные частицы разного состава находят широкое применение во многих областях биомедицинских и биофизических исследований как в качестве носителей биологических молекул, так и в качестве самостоятельных объектов наблюдения. Ключевыми физическими и физико-химическими характеристиками полимерных частиц, определяющими возможность их использования в тех или иных приложениях, являются размер, показатель преломления и поверхностная плотность заряда. Данная работа посвящена построению метода оценки основных параметров полимерных микрочастиц с помощью сканирующего проточного цитометра (СПЦ).

На СПЦ измеряли зависимости интенсивности светорассеяния от азимутального угла (индикатрисы) карбоксилированных полистирольных микрочастиц (латексов) разного размера. С использованием теории Ми решали обратную задачу светорассеяния, аппроксимируя экспериментальные зависимости интенсивности светорассеяния частиц теоретическими с помощью метода глобальной оптимизации DiRect. При этом определяли размер частиц и показатель преломления с высокой точностью.

На следующем этапе работы исследовали начальную стадию агрегации латексов диаметром 880 нм. Увеличение ионной силы раствора приводило к уменьшению коллоидной стабильности латексов и они агрегировали. Регистрацию популяций мономеров и агрегатов в ходе реакции проводили с помощью СПЦ.

С использованием экспериментально полученных зависимостей формирования агрегатов частиц в растворах разной ионной силы определяли константы скорости димеризации, а затем на основании теории ДЛФО рассчитывали характеристики их поверхности.

Таким образом, в данной работе построен метод оценки размера, показателя преломления и поверхностной плотности заряда полимерных микрочастиц с помощью сканирующего проточного цитометра.

Научный руководитель – А. А. Польщичин

## **ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОСНОВНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРОФОТОМЕТРА**

В. Ф. Кузин, А. Н. Красулина

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

Во многих областях биомедицинских и биофизических исследований полимерные частицы разного размера и состава (отличающиеся показателем преломления) находят широкое применение. Такой параметр как поверхностная плотность заряда частиц важен для оценки возможности иммобилизации на их поверхности различных биологических молекул, таких как ДНК и белки.

Целью данной работы является разработка метода определения размера, показателя преломления, а также поверхностной плотности заряда полимерных наночастиц с помощью спектрофотометра.

На стандартном спектрофотометре измерены спектры светорассеяния монодисперсных полистирольных наночастиц разного диаметра в видимом диапазоне. С использованием теории Ми решали обратную задачу светорассеяния, аппроксимируя экспериментальные зависимости оптической плотности от длины волны теоретическими с помощью метода глобальной оптимизации DiRect. При этом определяли размер частиц и показатель преломления с высокой точностью.

На следующем этапе работы изучали динамику изменения оптической плотности раствора карбоксилированных полистирольных сфер диаметром 70 нм при различных концентрациях добавленного электролита. На основании полученных данных, используя систему кинетических уравнений Смолуховского и метод Т-матриц, находили константы скорости димеризации. Далее с помощью формулы Фукса решением обратной задачи определяли поверхностную плотность заряда частиц.

В результате работы был построен экспериментальный метод определения размера, показателя преломления и поверхностной плотности заряда латексных частиц с использованием спектрофотометра.

Научный руководитель – А. А. Польщичин

## **АКТИВАЦИЯ ТРОМБОЦИТОВ: МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЕЁ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА**

А. Л. Литвиненко

Новосибирский государственный университет

Существует множество серьёзных заболеваний, связанных с патологиями крови. Одними из серьёзнейших из них являются заболевания, связанные с патологиями тромбоцитов, т.к. они напрямую участвуют в поддержании гемостаза. Это необходимо для нормального функционирования всего организма и, как следствие, для хорошего самочувствия человека.

Первым этапом реакции тромбоцитов на повреждение кровеносного сосуда является их активация, которая сопровождается изменением формы. Целью данной работы является изучить активацию тромбоцитов, а также построить молекулярно-кинетическую модель активации и проверить её экспериментально.

Экспериментальная работа проводилась с использованием сканирующего проточного цитометра. Данный прибор регистрирует индикатрису светорассеяния от исследуемой частицы в диапазоне углов от 10 до 70 градусов. Благодаря этому можно получить достоверную информацию о форме частицы. Было получено распределение тромбоцитов по форме в нативном состоянии, а также после активации. Активация тромбоцитов проводилась *in vitro* с использованием стандартных агонистов, таких как аденозиндифосфат, коллаген и адреналин. В результате были получены зависимость доли активированных тромбоцитов в пробе от концентрации активатора. Также были измерены кинетики изменения формы клеток в зависимости от времени.

Полученные результаты могут помочь в определении механизмов, приводящих к изменению формы тромбоцита, которые до сих пор до конца не изучены. Понимание данных механизмов может помочь как в диагностике заболеваний тромбоцитов на раннем сроке, так и в терапии этих заболеваний.

Научный руководитель – А. Е. Москаленский

## ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МЕЖПОЛЯРНЫХ МИКРОТРУБОЧЕК ВЕРЕТЕНА ДЕЛЕНИЯ КЛЕТОК ДРОЗОФИЛЫ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА FRAP

А. Ф. Мунзарова

Новосибирский государственный университет  
Институт молекулярной и клеточной биологии СО РАН, г. Новосибирск

Работа посвящена исследованию динамики микротрубочек веретена деления S2 клеток дрозофилы с помощью метода FRAP (fluorescence recovery after photobleaching) в условиях, когда молекулы тубулина помечены RFP.

На кривых восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания (литературные данные) мы заметили существование фракции микротрубочек веретена, флуоресценция которых не восстанавливается во FRAP экспериментах с маркированными тубулинами. Мы изучили эту фракцию методом "обратного" FRAP - когда обесцвечивается вся клетка за исключением изучаемой области. Мы показали, что в метафазном веретене фракция не обменивающихся с пулом обесцвеченных тубулинов микротрубочек велика. В то же время, в телофазном веретене эта фракция относительно мала. С точки зрения биологии, кинетохорные микротрубочки в телофазном веретене должны отсутствовать, поэтому все микротрубочки должны быть межполюсными. Наши эксперименты позволяют считать, что межполюсные микротрубочки являются той частью веретена, которая не обменивается с пулом клеточного тубулина.

В то же время, проведенные эксперименты позволили нам заметить, что соответствие межполюсных микротрубочек и не обменивающейся фракции не является полным. Так мы заметили, что среди кинетохорных микротрубочек имеется фракция необменивающихся, а среди межполюсных имеется фракция, способная обмениваться.

Мы полагаем, что предложенный подход позволяет проводить визуализацию межполюсных микротрубочек веретена, что важно при изучении мутаций белков веретена. Кроме того, предложенный метод исследования позволит проводить изучение таких цитологических структур, как МТОС (microtubule-organizing center) и аугминовых белков, которые, вероятно, ответственны за неполное соответствие полюсных и необменивающихся микротрубочек.

*Работа поддержана мегагрантом «The mechanisms of kinetochore-driven microtubule formation in Drosophila», возглавляемым проф. M.Gatti.*

Научный руководитель – д-р биол. наук Л. В. Омелянчук

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ РАДИОЙОДТЕРАПИИ ТИРЕОТОКСИКОЗА

Д. Ю. Носковец  
Омский государственный университет

Целью нашей работы стало создание физико-математической модели фармакокинетики тиреотропного РФП NaI-131, определение транспортных констант абсорбции, тиреоидного обмена и экскреции при сопоставлении модельных результатов с количественными радиометрическими данными радиойодтерапии пациентов с тиреотоксическим зобом, дозиметрическое планирование и расчет поглощенных доз в критических органах: верхние отделы желудочно-кишечного тракта, щитовидная железа, кровь, мочевыделительная система.

Нами были использованы принципы и методы фармакокинетики (камерное моделирование), метод Хука-Дживса для нахождения минимума функции нескольких переменных при определении значений транспортных констант, с использованием количественных данных радиометрии щитовидной железы пациентов с введенным РФП, и методика расчета поглощенных доз через найденные в процессе моделирования функции активностей введенного РФП в критических органах. Для решения системы дифференциальных уравнений, соответствующих модели, был использован пакет прикладных программ Maple. Для осуществления процедуры минимизации и определения транспортных констант, расчета поглощенных доз нами была разработана и написана программа на языке C++.

Полученные расчетные данные кинетики I-131 позволили рассчитать поглощенные дозы в щитовидной железе, крови, желудке, мочевом пузыре и эффективную дозу на весь организм пациента. Для оценки поглощенных доз органами при радиойодтерапии, были использованы главные уравнения при внутреннем облучении. Также были использованы, широко используемые в клинической практике, полуэмпирические формулы расчёта доз: Маринелли – Квимби – Хайна и Г. Браунелла. Расчёты по полуэмпирическим формулам приводят к значительным отклонениям в обе стороны от индивидуальных интегральных, что может привести к недооблучению или переоблучению ткани щитовидной железы. В работе также показана важная роль кинетического моделирования при дозиметрическом планировании и целесообразность использования интегральных формул для расчета поглощённых доз.

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

## ПРИМЕНЕНИЕ КОНИЧЕСКИХ И МНОГОЛЕПЕСТКОВЫХ КОЛЛИМАТОРОВ В СТЕРЕОТАКСИЧЕСКОЙ РАДИОХИРУРГИИ

Е. А. Осипов

Новосибирский государственный университет  
Новосибирский научно-исследовательский институт патологии  
кровообращения им. ак. Е. Н. Мешалкина

Коллиматоры в дистанционной лучевой терапии играют ключевую роль, осуществляя конечное формирование терапевтического пучка осциллятора, а значит и дозного поля в теле пациента.

Центр онкологии и радиохирургии НИИПК им. Мешалкина оборудован медицинскими ускорителями Elekta Axesse с мультилепестковыми коллиматорами. В этом году появилась возможность использовать конические коллиматоры BrainLab для стереотаксической радиохирургии. Опыт применения подобных коллиматоров на территории России отсутствует. Данная работа посвящена исследованию дозиметрических характеристик терапевтического пучка, формируемого коническими и многолепестковым коллиматорами, с последующим анализом и разработкой рекомендаций по клиническому применению конических коллиматоров в лучевой терапии.

Дозные распределения для набора конических коллиматоров диаметром 5, 7.5, 10, 15 и 20мм и для многолепесткового коллиматора были измерены с помощью водного фантома *iba blue phantom*, ионизационной камеры *CC01* и клинического дозиметра *iba DOSE-1*. Измерения проведены для всех доступных энергий пучка (6, 10 и 15MV). Рассчитаны физические характеристики терапевтических пучков для исследуемых коллиматоров: градиент дозы на краях области облучения, суммарная доза выделенная в объеме за сеанс облучения, межлепестковая утечка радиации. Также была определена точность соответствия дозы, рассчитанной системами планирования *ERGO* и *Monaco*, дозе, выделенной в целевом объеме за сеанс облучения. На основании полученных данных, а также опыта применения конических коллиматоров в зарубежных клиниках, составлены клинические рекомендации по использованию конусных и многолепестковых коллиматоров для терапии различных злокачественных и доброкачественных образований.

---

1. Sharma et al. Dosimetric comparison of linear accelerator-based stereotactic radiosurgery systems, *J Med Phys.* Jan-Mar. 32(1). 18–23 (2007).

Научный руководитель – канд. мед. наук Е. С. Половников

## РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ АНАЛИЗА МАТРИЦ ВОЗБУЖДЕНИЯ-ЭМИССИИ ДЛЯ МЕТОДА ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Е. О. Папаева

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

Для анализа матриц возбуждения-эмиссии, полученных с помощью метода лазерно-индуцированной флуоресценции, можно использовать метод главных компонент – аппроксимацию полученных данных линейными многообразиями меньшей размерности. Такой способ дает возможность восстановить информацию об отдельных компонентах из смеси флуорофоров. Однако главные компоненты не соответствуют спектрам реальных флуоресцирующих веществ.

Целью данной работы являлось определение факторов, способных оказывать влияние на спектры флуорофоров и их смесей. Такие аминокислоты как триптофан, тирозин, фенилаланин, а так же коллаген, эластин и NADH вносят основной вклад в флуоресценцию тканей [1]. Так в качестве объекта исследования были взяты ткани различных органов крысы, а так же отдельные аминокислоты и флуорофоры.

В результате проделанной работы установлено, что концентрация и толщина образца способна влиять на спектры возбуждения разведенного в физиологическом растворе белка. Показано, что изменение в формах спектров возбуждения происходит из-за различного поглощения возбуждающего излучения триптофаном. Установлено, что у моделирующего оптические свойства фантома поглощение излучения целлюлозой оказывает влияние на спектры триптофана аналогичное изменению концентрации. Показано, что спектры возбуждения тканей бедра и клеток селезенки крысы зависят от толщины образца, а гемоглобин оказывает на них незначительное влияние. Показано, что окружение триптофана (растворитель, белки) сильно влияют на его спектры. Рассмотрено применение метода главных компонент к спектрам ЛИФ аорты свиньи.

---

1. Дж. Лакович. Основы флуоресцентной спектроскопии. М., 1986.

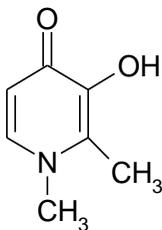
Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Н. А. Маслов

## ИССЛЕДОВАНИЕ ИНГИБИРОВАНИЯ ГИДРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ В РЕАКЦИЯХ ИНДУЦИРОВАННЫХ ИОНАМИ ЖЕЛЕЗА С УЧАСТИЕМ ДЕФЕРИПРОНА

В. А. Тимошников, Т. В. Кобзева

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

Деферипрон (L1) является активным хелатором ионов металлов. Данный препарат используется для лечения заболеваний, связанных с избытком железа в организме, таких, как талассемия. Известно, что в водных растворах ионы  $Fe^{2+}$  и  $Fe^{3+}$  могут продуцировать образование высокотоксичных гидроксильных радикалов через реакцию Фентона. Хотя в предыдущих исследованиях с  $Fe^{2+}$  сообщалось о феррооксидазной активности L1 с последующим образованием L1- $Fe^{3+}$  хелатных комплексов и ингибирования реакции Фентона, однако подробные данные об антиоксидантной активности деферипрона на молекулярном уровне отсутствуют.



Таким образом, целью данной работы было, во-первых, установление механизма ингибирования реакции Фентона с участием ионов  $Fe^{2+}$  и  $Fe^{3+}$  в присутствии L1, и, во-вторых, исследование механизма ингибирования образования активных кислородных радикалов в фотоиндуцированных процессах с участием комплексов  $Fe^{3+}$  с L1 в УФ и видимом диапазоне. Работы проводились методом ЭПР с использованием спиновых ловушек.

В результате было показано, что фотооблучение аквакомплексов  $Fe^{3+}$  в водных растворах в присутствии спиновых ловушек приводит к появлению сигнала ЭПР спинового аддукта OH радикала. Присутствие L1 полностью ингибирует образование OH радикалов в этой реакции. Механизм формирования спинового аддукта с OH радикалом был подтвержден обнаружением метильных радикалов в присутствии диметилсульфоксида. Образование синглетного кислорода также не было зафиксировано в реакции облучения L1 или его комплексов с ионами железа. Кроме того, взаимодействие L1 с ионами  $Fe^{2+}$  полностью ингибирует образование гидроксильных радикалов в присутствии перекиси водорода (реакция Фентона).

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

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАРЯДОВОГО СОСТОЯНИЯ ЦИТОХРОМОВ И ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ГЕЛЬ-ФЛЮИД В ЗАМОРАЖИВАЕМЫХ ЭМБРИОНАХ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ**

Н. С. Толмачёв

Новосибирский государственный университет

В настоящее время существует большое количество биологических и медицинских задач, требующих длительного сохранения биологических объектов, таких как клетки, эмбрионы, органы. Одним из наиболее популярных подходов сохранения биоматериалов является криоконсервация.

На жизнеспособность клеток в процессе замораживания/криоконсервации влияют следующие факторы: воздействие внеклеточного и внутриклеточного льда, концентрационная интоксикация криопротектором, а также особенности температурного поведения клеточных мембран.

Комбинационное рассеяние света (КРС) является бесконтактной, неразрушающей клетки и не требующей пробоподготовки методикой, позволяющей оценить физические процессы, происходящие в ходе замораживания эмбрионов, что и было целью данной работы.

В ходе работы получены спектры комбинационного рассеяния от замораживаемого эмбриона мыши.

Построены температурные зависимости интенсивностей линий спектра, которые соответствуют цитохромам b и c типа. Наблюдается увеличение интенсивности линий b и c цитохромов по мере снижения температуры в процессе замораживания эмбрионов мышей, что свидетельствует об увеличении восстановленного цитохрома. При этом в спектрах комбинационного рассеяния света наблюдается заострение линий, соответствующих СН<sub>2</sub> модам на 2849 см<sup>-1</sup> и на 2882 см<sup>-1</sup>, что указывает на фазовый переход липидов мембраны в более упорядоченную форму.

Анализируя данные зависимости, можно делать выводы о динамике жизненных процессов эмбриона в процессе замораживания.

Научный руководитель – д-р биол. наук С. Я. Амстиславский

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ДИМЕРОВ ТРОМБОЦИТОВ

Л. Б. Фролов

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

Анализ клеток крови является важным направлением в биомедицинской физике. В ходе данной работы изучаются тромбоциты - клетки, отвечающие за гемостаз. Связанные с тромбоцитами процессы, такие как активация, агрегация и адгезия, представляют значительный интерес в диагностике различных заболеваний, так как нарушения этих процессов могут приводить к геморрагическим заболеваниям или, напротив, к тромбозам. Работа посвящена изучению агрегации тромбоцитов на ранней стадии, для чего необходимо отличать одиночные тромбоциты от их агрегатов, преимущественно димеров.

Для экспериментального решения задачи идентификации мономеров и димеров тромбоцитов используется сканирующий проточный цитометр (СПЦ). Этот уникальный прибор позволяет измерять индикатрису светорассеяния в диапазоне углов  $10-70^\circ$ . Индикатриса сильно зависит от морфологии частиц, что позволяло надеяться на возможность использовать её для идентификации мономеров и димеров тромбоцитов.

Для проверки данной возможности было проведено математическое моделирование индикатрис мономеров и димеров тромбоцитов. В результате моделирования было показано, что в стандартном угловом диапазоне индикатрисы мономеров и димеров тромбоцитов могут совпадать, что не позволяет эффективно произвести их идентификацию. Также было показано, что возможно разделение клеток по их индикатрисам в диапазоне углов рассеяния, больше чем  $90^\circ$  при достаточно малом уровне шумов.

Исходя из этого, было решено произвести модернизацию СПЦ для расширения углового диапазона. В новой конфигурации, наряду с индикатрисой в диапазоне  $10-70^\circ$ , будет измеряться дополнительный сигнал в диапазоне углов  $110-170$  градусов.

Научный руководитель – А. Е. Москаленский

## ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОЧАСТИЦ КРОВИ И ИХ ДИМЕРОВ С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕГО ПРОТОЧНОГО ЦИТОМЕТРА

Д. Н. Чернова

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

Микрочастицы крови – фосфолипидные межклеточные везикулы, высвобождающиеся различными видами клеток в стрессовых условиях. Микрочастицы играют важную роль в процессах межклеточной коммуникации и могут рассматриваться в качестве маркеров различных патологий, поэтому представляют интерес как со стороны фундаментальных исследований, так и для клинической диагностики.

Наиболее популярными методами для проведения клинических анализов микрочастиц являются методы, основанные на измерении светорассеяния, и, в частности, метод проточной цитометрии. Однако при их использовании требуется сложная процедура пробоподготовки, а так же использование флуоресцентных меток для отделения микрочастиц от мелких тромбоцитов и клеточных фрагментов. Отсутствие стандартных процедур выделения микрочастиц в пробе крови, а так же методов их характеристики в крайней степени затрудняет воспроизводимость измерений и сравнение результатов, полученных разными лабораториями. Также на данный момент не существует флуоресцентных меток, окрашивающих исключительно микрочастицы, поскольку они несут на своей поверхности рецепторы родительских клеток. Кроме того, существующие методы не позволяют одновременно с высокой точностью определять размеры и показатели преломления микрочастиц.

Метод сканирующей проточной цитометрии (СПЦ) за счет возможности измерения угловой зависимости светорассеяния для отдельных частиц позволяет одновременно характеризовать микрочастицы по размеру и показателю преломления, а также благодаря высокой чувствительности измеряемого сигнала к форме частиц позволяет отличать одиночные микрочастицы и их димеры от более крупных агрегатов и других частиц крови. Используя теорию Ми в решении обратной задачи светорассеяния для сферических частиц, и метод Т-матриц для димеров этих частиц, по измеряемым индикатрисам светорассеяния и боковому светорассеянию, используемому в качестве дополнительной информации, нам удалось не только идентифицировать, но и с высокой точностью измерить как размер, так и показатель преломления микрочастиц и их димеров.

Научный руководитель – А. И. Конохова

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СУЛЬФАТА МАГНИЯ НА АНИОННЫЙ ОБМЕН ЭРИТРОЦИТОВ

Е. С. Чернышова

Новосибирский государственный университет

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

В перинатальной диагностике существует проблема выявления риска гипоксии плода на ранних стадиях беременности. Нарушение нормального дыхания плода посредством эритроцитов матери приводит к риску появлению аномалий внутриутробного развития и преждевременным родам. Одной из основных характеристик, определяющих скорость кислородного обмена в организме, является анионная проницаемость мембраны эритроцита. Отклонение от нормы данной характеристики свидетельствует о риске появления гипоксии. В современной медицине для уменьшения риска преждевременных родов широко применяется токолитическая терапия с использованием сульфата магния. Однако, влияние сульфата магния на анионную проницаемость эритроцитов не изучена.

Данная работа посвящена исследованию изменения анионной проницаемости эритроцитов под действием сульфата магния как *in vivo*, так и *in vitro*. В качестве образцов бралась венозная кровь беременных женщин в растворе EDTA при 22° С. Для обработки полученных экспериментальных данных была разработана соответствующая молекулярно-кинетическая модель. Эксперименты проводилось на оригинальном сканирующем проточном цитометре, позволяющем по сигналу светорассеяния определять морфологические характеристики одиночных эритроцитов в потоке со скоростью до 1000 клеток в секунду. Анионная проницаемость эритроцитов определялась методом изотонического гемолиза в растворе хлорида аммония.

В ходе исследований было зарегистрировано увеличение анионной проницаемости эритроцитов в присутствии растворенного сульфата аммония. Полученные экспериментальные данные были обработаны предложенной теоретической моделью, описывающей динамику проникновения через мембрану и взаимодействия иона магния внутри клетки с основным анионным обменником эритроцита (cdB3), и в результате были определены следующие параметры: проницаемость мембраны эритроцита к  $Mg^{2+}$  и константа равновесия комплекса  $Mg^{2+}$ -cdB3.

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

## **МАГНИТОРЕЗОНАНСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАКОПЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА МАРГАНЦА В ОПУХОЛЯХ ГОЛОВНОГО МОЗГА МЫШЕЙ**

И. С. Щербаков

Новосибирский государственный университет  
Институт цитологии и генетики СО РАН, г. Новосибирск

Транспорт различных химических соединений из носовой полости в головной мозг был исследован в целом ряде работ. Назальный путь проникновения различных соединений в мозг с одной стороны может быть использован для доставки лекарственных препаратов, с другой, является потенциальным путем проникновения различных ксенобиотиков, таких как вирусы и тяжелый металлы. Однако, данные по динамическим характеристикам данного процесса противоречивы и не полны.

Цель данной работы заключалась в том, чтобы собрать исчерпывающие данные и на их основе построить пространственно-временной паттерн движения наночастиц MnO из ольфакторных луковиц в более глубокие структуры головного мозга. Так как наночастицы MnO являются парамагнетиками наилучшим способом для их детектирования во внутренних структурах головного мозга является магниторезонансная томография.

В ходе данной работы были построены пространственно-временные паттерны движения наночастиц MnO в головном мозге, что позволит: во-первых, использовать эти данные при разработке протоколов адресной доставки лекарственных препаратов, применяемых в коллоидной форме, в мозг в обход гематоэнцефалического барьера, во-вторых, определить структуры мозга, являющиеся потенциальными мишенями для ксенобиотиков

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

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ .....</b>	<b>5</b>
А. В. Альфимов .....	5
К. А. Амонов .....	6
М. А. Буйко .....	7
Е. К. Бурцева, М. В. Ноговицына .....	8
М. И. Воскобойник, Т. А. Чистикова .....	9
О. А. Гурова .....	10
С. В. Данилов, А. В. Лекомцев .....	11
А. Л. Зиннатуллин, Р. Н. Нурмехамитов .....	12
С. П. Иванова .....	13
А. Л. Игишева, В. В. Литвиненко .....	14
Ф. Э. Исмаилова, Г. Ф. Барноев .....	15
О. Н. Казырицкая .....	16
П. С. Кириленко .....	17
М. В. Клименко .....	18
Н. С. Кобликова, О. А. Кречетова .....	19
Д. А. Колотовкина .....	20
М. Г. Корж, М. П. Пидгирный .....	21
И. А. Костогруд .....	22
Е. Г. Коэмец .....	23
З. Д. Кравцов .....	24
И. В. Кузнецова .....	25
А. М. Мальцев .....	26
З. М. Муродова, Г. К. Турсункулова, Ж. М. Шодиев .....	27
М. О. Мустафоева, Н. И. Оллобердиев, М. К. Абдувохидов .....	28
О. С. Никулина .....	29
Д. А. Остапенко .....	30
И. С. Палицын, В. И. Пряхина .....	31
И. А. Рубцов .....	32
А. В. Селиванова .....	33
А. И. Семерикова, Н. В. Нагирный .....	34
А. А. Сычев .....	35
А. Н. Тафилевич .....	36
Т. Ю. Титова .....	37
Д. Х. Тошпулатова., А. З. Орзиев .....	38
Г. К. Турсункулова, Х. К. Жуланов, Т. И. Садуллаев .....	39
С. Е. Хандархаева .....	41
А. Э. Художитков .....	42
С. А. Хужанов .....	43

А. А. Шмаков .....	44
С. К. Эшмаматов .....	45
А. А. Юсуф .....	46
Е. А. Яковлева .....	47
<b>ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....</b>	<b>48</b>
А. О. Бессмертных .....	48
В. М. Гольшев .....	49
А. А. Городецкий .....	50
А. М. Дмитриев .....	51
В. А. Егоров .....	52
К. С. Ершов .....	53
Л. А. Жукас .....	54
В. Д. Зелик .....	55
М. Ю. Иванов .....	56
Е. Д. Кадцын, А. В. Аникеенко .....	57
М. Э. Кардаш .....	58
Р. О. Колбаскин .....	59
Ю. В. Копыльцова .....	60
В. С. Краюхина .....	61
М. С. Крестина .....	62
Г. А. Летягин .....	63
А. Г. Литвиновская, А. С. Белова .....	64
Е. А. Лукина .....	65
Н. В. Нагирный .....	66
М. С. Немчинова, О. С. Сутормин .....	67
К. Н. Осипова .....	68
П. Д. Парунин .....	69
А. Г. Попов .....	70
Е. А. Пушкина .....	71
И. А. Рубцов .....	72
А. Х. Тураханов .....	73
Д. И. Тюменцева, О. С. Сутормин .....	74
М. В. Шахова .....	75
<b>БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА .....</b>	<b>76</b>
И. Е. Апанасенко .....	76
Д. О. Епланов .....	77
С. Д. Иванов .....	78
А. Н. Красулина, В. Ф. Кузин .....	79
В. Ф. Кузин, А. Н. Красулина .....	80
А. Л. Литвиненко .....	81

А. Ф. Мунзарова .....	82
Д. Ю. Носковец .....	83
Е. А. Осипов .....	84
Е. О. Папаева .....	85
В. А. Тимошников, Т. В. Кобзева.....	86
Н. С. Толмачёв .....	87
Л. Б. Фролов .....	88
Д. Н. Чернова .....	89
Е. С. Чернышова .....	90
И. С. Щербаков .....	91

МАТЕРИАЛЫ  
53-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ  
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

МНСК–2015

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

*Материалы конференции публикуются в авторской редакции*

---

Подписано в печать 04.04.2015

Офсетная печать

Заказ № \_\_\_\_\_

Формат 60x84/16

Уч.-изд. л. 4,6. Усл. печ. л. 5,9.

Тираж 80 экз.

---

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