

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

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

МНСК–2017

17–20 апреля 2017 г.

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

**Новосибирск
2017**

УДК 15.010
ББК Ю 9

Материалы 55-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2017: Физические методы в естественных науках / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2017. 97 с.

ISBN 978-5-4437-0493-7

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

Научный руководитель секции –

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

Председатель секции – д-р физ.-мат. наук, проф., Цыбуля С. В.

Ответственный секретарь секции – Никулин В. В.

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

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

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»

д-р хим. наук, проф. Бакланов А. В., канд. физ.-мат. наук Вебер С. Л., д-р хим. наук, проф. Грицан Н. П., канд. физ.-мат. наук Киселев В. Г., канд. физ.-мат. наук Князьков Д. А., канд. физ.-мат. наук Колоколов Д. И., канд. физ.-мат. наук Пыряева А. П., канд. физ.-мат. наук Правдивцев А. Н., д-р физ.-мат. наук, доцент Суровцев Н. В.

Экспертный совет подсекции «Биомедицинская физика»

канд. физ.-мат. наук Глазачев Ю. И., канд. физ.-мат. наук Юркин М. А., канд. физ.-мат. наук Ломзов А. А., д-р физ.-мат. наук, проф. Мальцев В. П., канд. физ.-мат. наук Яньшолле В. В., канд. физ.-мат. наук Строкотов Д. И., канд. физ.-мат. наук Марьясов А. Г., канд. физ.-мат. наук Корнеев Д. В., канд. биол. наук Федорова С. А., канд. физ.-мат. наук Москаленский А. Е.

ISBN 978-5-4437-0493-7

© Новосибирский государственный университет, 2017

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

**PROCEEDINGS
OF THE 55th INTERNATIONAL STUDENTS
SCIENTIFIC CONFERENCE**

ISSC-2017

April, 17–20, 2017

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

**Novosibirsk, Russian Federation
2017**

Proceedings of the 55th International Students Scientific Conference.
Physical methods in natural sciences / Novosibirsk State University.
Novosibirsk, Russian Federation. 2017. 97 pp.

ISBN 978-5-4437-0493-7

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

Section scientific supervisor –

Dr. Phys. Math., Prof. Dzuba S. A.

Section head –

Dr. Phys. Math., Prof. Tsybulya S. V.

Responsible secretary –

Nikulin V. V.

Section scientific committee

«Physical methods of functional materials and nanosystems»

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

Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:

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

Section scientific committee «Biomedical Physics»:

Cand. Phys. Math. Glazachev Yu. I., Cand. Phys. Math. Yurkin M. A.,
Cand. Phys. Math. Lomzov A. A., Dr. Phys. Math., Prof. Maltsev V. P.,
Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole, Cand. Phys. Math. Strokov D. I.,
Cand. Phys. Math. Maryasov A. G., Cand. Phys. Math. Korneev D. V.,
Cand Biol. Fedorova S. A., Cand. Phys. Math. Moskalenskiy A. E.

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 676.023.1

Восстановление бумагообразующих свойств целлюлозы

Антонова В. С.

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики

Проведено исследование термо-, влагообработки целлюлозной папки для восстановления её бумагообразующих свойств. Объектом исследования служили промышленные образцы сульфатной белой целлюлозы (СП-1650, степень упорядоченности 0,65, содержание α -целлюлозы 95,5 %). Обработку воздушно-сухой целлюлозы проводили водяным паром в автоклаве в условиях постоянной относительной влажности 100 % при температуре 438 К и времени воздействия 5-40 минут. В качестве методов исследования целлюлозы были использованы: калориметрический для измерения теплот гидратации модифицированной целлюлозы; вискозиметрический для определения средней степени полимеризации (в качестве растворителя использовали железовиннонатриевый комплекс), рентгенографический для определения степени упорядоченности; статический метод сорбции паров воды в широком диапазоне относительных давлений. Воздействие на сухой целлюлозный материал насыщенным паром высоких параметров состояния приводит к раскрытию сомкнувшихся при сушке пор и капилляров и к увеличению сорбирующей поверхности целлюлозы. Исследования показали полное восстановление капиллярнопористой структуры водяным паром при температуре 438 К и времени воздействия 4 минуты, о чем свидетельствуют теплоты гидратации и равное содержание капиллярной влаги образца, обработанного в указанном режиме и производственной целлюлозы, не прошедшей стадию сушки. Влагосодержание, соответствующее предельному насыщению функциональных групп молекулами воды указывает также на увеличение содержания активных центров, доступных к взаимодействию с водой. При воздействии более 4 минут гидрофильные свойства обработанной целлюлозы (теплоты гидратации и сорбция паров воды) снижаются вследствие начавшейся деструкция полимолекул целлюлозы. Степень полимеризации снижается с 1650 до 1380. Это указывает на протекание процесса вторичной кристаллизации, который типичен для полимеров в высокоэластическом состоянии. Индекс упорядоченности составляет 0,68 против 0,54 для необработанного образца. Следовательно, в условиях постоянной температуры и влажности может происходить как увеличение гидрофильных свойств целлюлозы, так и гидрофобизация полимера в зависимости от времени гидротермических воздействий.

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Осовская И. И.

Исследование состава наноструктур окиси кремния с помощью FTIR спектров

Барсуков А. В.

Новосибирский государственный университет

В последнее время нанотехнологии и нанонаука развиваются бурными темпами. Изучение свойств наноструктур представляет значительный интерес, в частности метод FTIR позволяет исследовать их состав.

В данной работе были синтезированы нанопроволоки окиси кремния на кремниевой подложке методом газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой. Синтез проводился на оловянном и индиевом катализаторах при различных температурах. Для сравнения при тех же условия были синтезированы пленки SiO_x.

Для исследования состава наноструктур использовались инфракрасная Фурье спектроскопия (FTIR). Обработка FTIR спектров наноструктур состояла в следующем: разложение спектров на гауссовы функции соответствующие пикам отдельных колебаний групп атомов, определение по этому разложению положения основного пика и высокочастотного плеча, а также отношение площадей этих пиков.

На рис. 1 представлена зависимость положения основного пика для нанопроволок, синтезированных на индиевом, оловянном катализаторах, от температуры. Так же на нем проведены горизонтальные линии, соответствующие определенному значению коэффициента стехиометрии, рассчитанные по модели случайных связей. По пересечению кривой, соответствующей этой зависимости, с этими линиями определяется коэффициент стехиометрии. Для наноструктур этот коэффициент получился близким к 2. Это означает, что состав структур SiO₂.

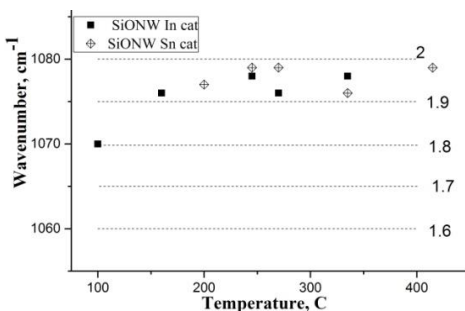


Рис. 1. Зависимость положения основного пика от температуры

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

Создание неразрушающей методики определения толщины тонких пленок методами ЭДС и ВДС

Баскакова К. И.

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

Широкое использование функциональных тонких пленок в современной технике стимулирует разработку методов неразрушающего определения их толщины. К ним относятся эллипсометрия, метод полного внешнего отражения рентгеновских лучей, спектроскопия обратного Резерфордского рассеяния и др. Развитие методов электронной микроскопии сделало возможным создание новых более простых методик определения толщины тонких пленок.

При падении на поверхность объекта электронного пучка, служащего источником возбуждения в сканирующем электронном микроскопе генерируются рентгеновское излучение, обратно-рассеянные и вторичные электроны и катодолюминисценция. Рентгеновские фотоны обладают свойствами и частиц, и волн, поэтому для рентгеноспектрального анализа используют энергодисперсионный спектрометр, который сортирует фотоны по их энергии, и волнодисперсионный спектрометр, использующий принцип разделения рентгеновского излучения по длинам волн. Интенсивность пиков характеристического излучения пропорциональна количеству вещества, следовательно, интенсивности спектров тонких пленок различной толщины на одинаковых подложках будут пропорциональны их толщинам.

В работе исследованы металлические (Ni, Ti) и диэлектрические пленки (HfO_2 , TiO_2), нанесенные на подложки Si(100) методами термического напыления и атомно-слоевого осаждения, соответственно. Толщина пленок варьировалась от 10 до 300 нм.

Методами ЭДС и ВДС были получены калибровочные кривые для данных пленок. Проведено сравнение значений толщины пленки, полученной с помощью разрабатываемой методики, с рассчитанной из эллипсометрических данных и определенной методом исследования скола образца (СЭМ). Разработан алгоритм построения калибровочных кривых для металлических и оксидных пленок постоянного состава, позволяющий определять толщину пленок неразрушающим экспресс-методом.

Научный руководитель – канд. хим. наук Максимовский Е. А.

Особенности структуры и свойств композитного материала на основе полисилоксана и оксида кремния

Боброва И. А.¹, Хрипунков М. Н.²

¹Московский государственный областной университет

²ООО «Альба-Инновации», г. Москва

Исследование структуры и свойств дисперсных систем на основе жидкостей и твердых тел представляет интерес с точки зрения фундаментальной и прикладной науки. В 2006 году шведскими разработчиками [1] впервые была получена и запатентована двухкомпонентная система на основе силиконовой дилатантной жидкости и дисперсного наполнителя (мелкозернистого оксида кремния). Данная система под торговой маркой «Кинетический песок» применяется в качестве детской массы для лепки и получила широкую известность благодаря комплексу оригинальных свойств: низкой адгезии к коже рук и другим материалам, способностям сохранять приданную форму и растекаться под влиянием механических воздействий.

Целью данной работы является анализ физической природы явлений, обуславливающих наличие комплекса оригинальных свойств у композитного материала на основе дилатантной жидкости и мелкодисперсного наполнителя.

В работе получены и исследованы композитные материалы с различным содержанием компонентов на основе специально синтезированного полисилоксана и диоксида кремния с размером частиц от 100 до 300 мкм. Определены насыпная и истинная плотности полученных образцов. Методом оптической поляризационной микроскопии исследованы микроструктура и свойства композитов. Показано, что при линейном растяжении образцов между частицами оксида кремния образуются короткоживущие нитевидные микрообъекты с длиной до 10 сантиметров и диаметром порядка 10 микрометров. Определено среднее время жизни данных объектов, по-видимому представляющих собой Рэлеевские мосты жидкости. Выбран метод исследования [2] и определена фрактальная размерность данной системы. Предложена математическая модель для описания термодинамических процессов, происходящих в системе.

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия инновациям по программе «УМНИК» и гранта РФФИ № 16-57-00089Бел_а.

1. Jonas Modell, Staffan Thuresson. Material composition and method for its manufacture. Patent EP, no. 2054128 A1, 2006.

2. Смирнов Б. М. Фрактальные кластеры // Успехи физических наук. 1986. Т. 149. Вып. 2. С. 177–219.

Научный руководитель – канд. хим. наук, ст. науч. сотр. Машенко В. И.

Изучение электрофизических и оптических свойств гибких электродов на основе композитов полимер-графен

Бойко Е. В.

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

Графен – двумерная аллотропная модификация углерода, является одним из интереснейших материалов, благодаря его уникальным свойствам. Его высокая электро- теплопроводность, механическая прочность, а также прозрачность делает его перспективным материалом в различных областях науки и техники. Наиболее популярным методом получения графена является метод газофазного осаждения. В данном методе графеновые плоскости образуются на металлической подложке (Si, Cu). Многие применения графена основаны на использовании его электрических и оптических свойств, анализ которых сложно провести, если графен находится на непрозрачной проводящей подложке. Актуальной задачей является развитие методов переноса графена на непроводящую прозрачную подложку, например, полимер. Работа посвящена развитию методов переноса графена с меди на полимерные плёнки, исследование электрических и оптических свойств полимер-графеновых плёнок.

Синтез графена осуществлялся в термическом реакторе, при температуре 1070°C и атмосферном давлении в смеси газов Ag/H₂/CH₄. В качестве подложки, на которой происходил рост графена, использовалась медная фольга. Перенос графена производился на полимеры ПЭТ/ЭВА и ПММА методами горячего прессования и центрифугирования соответственно. Удаление медной подложки осуществлялось механическим расщеплением и химическим травлением. В полученных образцах были исследованы проводимость методом двухзондовой резистометрии, прозрачность с помощью метода спектрофотометрии.

В результате проделанной работы был определен оптимальный метод удаления меди – метод химического травления меди. Наиболее высокая прозрачность была достигнута при использовании полимера ПЭТ/ЭВА. Однако наиболее высокая проводимость графена была получена на полимере ПММА.

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

Исследование влияния наночастиц Au и Ag на электропроводность оксида графена

Бурцева Е. К.

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

Создание новых композиционных материалов на основе наночастиц (НЧ) перспективно в силу того, что уникальные свойства НЧ, помещенных в различные матрицы сохраняются и даже усиливаются при этом. Наиболее перспективными областями применения материалов на основе оксида графена (ОГ) и наночастиц благородных металлов являются катализ, топливные элементы, химические сенсоры и биологические приложения.

В работе проведено исследование влияния наночастиц золота и серебра на электрические свойства оксида графена, полученного модифицированным методом Хаммерса. Из измерений методами электронной и атомной силовой микроскопии установлены размеры наночастиц, которые лежат в диапазоне от 10 до 20 нм для золота, и от единиц нм до нескольких сот нм для серебра.

Для синтеза наночастиц золота использован цитратный метод. Отличительной особенностью этого метода является то, что цитрат-анион одновременно выступает в роли стабилизатора и восстановителя. Этот метод получения наночастиц золота, применим и к получению наночастиц серебра. Но, так как серебро более активный металл, чем золото, то синтез наночастиц серебра происходит более сложно из-за способности серебра к быстрому окислению и агрегации.

Таким образом, введение наночастиц Au и Ag в ОГ приводит к увеличению электропроводности на порядок по сравнению с исходными образцами при термообработках до 250 С. В последующем с увеличением температуры эта проводимость уменьшается и стремится к значению для ОГ без НЧ. Наблюдаемый эффект проявляет зависимость от содержания наночастиц в ОГ.

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

Метод ЭПР-спектроскопии в исследовании межорганного распределения наноалмазов при внутривенном введении животным

Волкова М. Б.

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск
ИБФ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск
МНЦИЭСО ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Развитие нанотехнологии открывает возможности для решения широкого спектра биомедицинских задач. При этом важной задачей является изучение действия нанообъектов на сложные биосистемы. Метод ЭПР-спектроскопии регистрирует нанообъекты, имеющие парамагнитные центры. Преимуществом метода ЭПР является высокая чувствительность, позволяющая выявлять нанообъекты при низких концентрациях. В ИБФ СО РАН получены модифицированные наноалмазы (МНА), обладающие высокой коллоидной устойчивостью в водных суспензиях, что открывает перспективы их применения в биомедицинских целях.

Целью работы является оценка методом ЭПР межорганного распределения МНА после внутривенного введения мышам.

В работе использованы МНА со средним размером кластеров в гидрозолях $d_{50} = 70,6$ нм (Zetasizer Nano ZS, Malvern Instruments Ltd., Англия). Водную суспензию МНА вводили в хвостовую вену мышам (самцы ICR массой 28–30 г) в дозе 40 мг МНА / кг массы. Через 2,5 часа забирали кровь, печень, почки, легкие, сердце, головной мозг и мышцы бедра. Органы гомогенизировали, кровь и гомогенаты замораживали в жидком азоте и исследовали с помощью ЭПР Фурье-спектрометра Elexsys E580 (Bruker, Германия). Содержание МНА в образцах оценивали по величине ЭПР-сигнала, который пропорционален концентрации наночастиц.

Показано: через 2,5 часа после внутривенного введения основная часть МНА аккумулируется в легких и печени мышей – 24 % и 18 %, соответственно от всего введенных. В крови, почках и сердце обнаруживается значительно меньшее (разница более порядка) количество МНА. Наличие МНА в образцах головного мозга и мышц бедра в пределах чувствительности использованного метода не выявлено. Полученные данные открывают перспективы изучения методом ЭПР-спектроскопии межорганного распределения и элиминации МНА после их внутривенного введения в организм животных.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-04-00999).

Научный руководитель – канд. биол. наук, доцент Инжеваткин Е. В.

Причины самоупрочнения марганцовистой стали 110Г13Л

Герт С. С., Анфилофьев В. В.

Восточно-Казахстанский государственный университет
им. С. Аманжолова, г. Усть-Каменогск, Казахстан

Несмотря на многочисленные исследования причин самоупрочнения стали 110Г13Л, проблема эта окончательно не решена.

Обнаружено, что после интенсивной пластической деформации в образцах стали возможно формирование фаз с икосаэдрической симметрией [1]. Показано, что при разрыве стали 110Г13Л с высокой ударной вязкостью (более 300 мДж/мм²) в зоне разрыва не образуется трещин, металл рвется по кратерам, на дне которых находятся частицы размером 1-2 мкм, обогащенные марганцем. Эффект Мессбауэра не смог обнаружить известных шести линий у ставшего ферромагнитным пластически деформированного образца стали 110Г13Л.

Цель работы – выявить причину аномального характера спектра Мессбауэра, полученного от ферромагнитного образца стали 110Г13Л.

Как показал В. И. Высоккий [2], для формирования когерентного коррелированного состояния квантовая частица должна оказаться в потенциальной яме, стенки которой испытывают быстрые изменения. Примером такой потенциальной ямы может служить нано-полость в кристаллической решетке твердого тела, подвергающегося ударному сжатию или разрыву. Можно предположить, что под действием волн пластической деформации создаются условия для прохождения реакции образования марганца-55 из Fe57. Спектр Мессбауэра, полученный в [2] не смог обнаружить известных шести линий у ферромагнитного Fe57, как и в нашем эксперименте. Процессы, проходящие при такой реакции, могут кардинально изменить структуру и свойства стали 110Г13Л.

1. Kveglis L. I. Local electron structure and magnetization in β -Fe86Mn13C / L. I. Kveglis, R. B. Abylkalykova, F. M. Noskov, V. G. Arhipkin, V. A. Musikhin, V. N. Cherepanov, A. V. Niavro // *Superlattices and Microstructures*. 2009. Т. 46. № 1–2. С. 114–120.

2. Vysotskii A. A. Kornilova, and I. I. Samoilenko, Experimental discovery of the phenomenon of low-energy nuclear transmutation of isotopes ($Mn55 \rightarrow Fe57$) in growing biological cultures., Proc. 6th Int. Conf. on Cold Fusion, Toya, Japan, 1996. P. 687–693.

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

Поляризационно-оптический метод контроля прочности компакт-дисков

Данюкина И. С., Жураева Б. С.

Сибирский государственный университет путей сообщения,
г. Новосибирск

Хранение информации на компакт-дисках (CD, DVD) до настоящего времени обладает рядом преимуществ – в частности, повышенной защитой от влияния вредных вирусов при эксплуатации дисков. Вместе с тем, высокая плотность записи обуславливает повышенные требования к стабильности геометрических параметров дисков – их формы и размеров. Из-за несовершенства процессов производства и эксплуатации в дисках могут возникать остаточные напряжения, влияющие на такую стабильность. В настоящей работе рассматривается применение поляризационно-оптического метода (метода фотоупругости) для качественной оценки внутренних напряжений в CD, DVD.

Для изготовления компакт-дисков в современных условиях используется поликарбонат, обладающий свойством двойного лучепреломления. Это позволяет проводить исследование напряжений в них как на просвет, так и по схеме отражательного полярископа. Метод фотоупругости позволяет интерпретировать картину полос, как по номинальному уровню напряжений, так и по их градиенту. Эффективно определяются недогруженные и перегруженные области. При возрастании нагрузки, новые полосы интерференции сдвигаются в зону с наименьшим значением напряжений. В связи с этим важно правильно присвоить порядковые номера изохромам и определить цвет в пределах каждой полосы. На внутреннем свободном контуре диска картина изохром является изолиниями касательных напряжений. В случае неравномерного распределения остаточных напряжений по поверхности диска и при их релаксации из-за внешнего воздействия (силового и температурного) может произойти инициирование трещин и последующее разрушение CD. Также возможно значительное формоизменение диска, при котором последующее считывание информации становится невозможным.

Проведены исследования компакт-дисков, произведенных по технологиям штамповки и лазерной записи при различных временах их эксплуатации, при знакопеременном температурном воздействии.

Научный руководитель – д-р техн. наук, проф. Герасимов С. И.

Спектроскопические методы исследования сегнетоэлектрического порошка титаната бария (BaTiO_3), подвергнутого негидростатическому прессованию при высоких давлениях

Зайцева И. В.

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

В данной работе исследуется влияние негидростатического давления, которое не только применяется при изготовлении сегнетоэлектрической керамики, широко применяемой во многих областях техники (электроника, акустика и т. д.), но и оказывает существенное влияние на важные ее свойства, например, температуру и ширину фазового перехода.

Известно, что в сегнетоэлектрическом порошке BaTiO_3 , подвергнутом прессованию, действуют остаточные механические напряжения (ОМН), которые приводят к смещению температуры и ширины перехода из тетрагональной в кубическую фазу (ФП). В данной работе в качестве основных методов исследования ФП порошка BaTiO_3 в зависимости от величины приложенных негидростатических и остаточных механических напряжений применены методы комбинационного рассеяния света (КРС) и генерации второй оптической гармоники (ГВГ).

Метод КРС совместно с применением ячейки с алмазными наковальнями позволяет количественно определить величины ОМН в зависимости от приложенного давления. Для этого используется позиция линии вблизи 307 cm^{-1} в спектре КРС как функция от приложенного давления. Для определения величины приложенных механических напряжений используется сдвиг линии КРС алмаза ($\omega = 1332 \text{ cm}^{-1}$), измеренной в самой алмазной наковальне. Метод ГВГ позволяет определить температуру и ширину ФП в силу того, что величина сигнала ГВГ в образце пропорциональна спонтанной поляризации.

Установлена связь ОМН с приложенными негидростатическими механическими напряжениями. Продемонстрировано влияние действующих в образце ОМН на температуру и ширину ФП. С помощью методов КРС и ГВГ показано, что негидростатическое давление в отличие от гидростатического давления приводит к увеличению температуры ФП на 100 К при наличии в образце ОМН величины 0,3ГПа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-02-04950.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. Пугачев А. М.

Применение технологии твёрдопламенного горения для создания защитных радиационных материалов

Закусилов В. В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Бурное развитие и широкое внедрение ядерных технологий в сферы человеческой деятельности такие как: наука, промышленность, энергетика и медицина создали потенциальную угрозу радиационной опасности для человека и окружающей среды. Поэтому при изучении вопроса защиты от внешнего воздействия ионизирующих излучений основное внимание уделяется созданию защитных материалов от нейтронного и гамма-излучения, ввиду их высокой опасности. Основными требованиями, предъявляемыми к материалам радиационной защиты, являются оптимальные массогабаритные характеристики, способность выдерживать термические и радиационные нагрузки, а также способность ослаблять многофакторные ионизирующие излучения.

Сочетание всех вышеперечисленных требований создаёт определённые трудности в решении материаловедческой задачи, однако одним из перспективных методов порошковой металлургии является самораспространяющийся высокотемпературный синтез, способный значительно снизить экономическую составляющую ввиду отсутствия больших затрат энергии для протекания синтеза и технологически сложного оборудования [1].

В качестве материалов нейтронной защиты, были выбраны боросодержащие вещества, ввиду нейтронно-физических особенностей реакции поглощения нейтронов ядрами бора [2].

В работе проведено экспериментальное сравнение свойств материалов радиационной защиты, полученных в режиме твёрдопламенного горения от потоков ионизирующего излучения, а также исследовано изменение нейтронного потоков при прохождении защитного материала разной толщины.

1. Колядко Д. К., Чурсин С. С. Влияние способа иницирования СВС на структурообразование образца // Наука. Технологии. Инновации: сборник научных трудов: В 9 т. Новосибирск: НГТУ, 2015. Т. 3. С. 111–113.

2. Демянюк Д. Г. Влияние экзотермических добавок на температуру иницирования СВ-синтеза боросодержащих материалов / Д. Г. Демянюк, О. Ю. Долматов, Д. С. Исаченко и др. // Известия высших учебных заведений. Физика. Физика. 2013. № 4–2. С. 99–103.

Научный руководитель – Кузнецов М. С.

Термодинамическое исследование спинового перехода в комплексных соединениях железа(II) с трис(пиразол-1-ил)метаном

Ишкиняева В. Р.

Новосибирский государственный университет

Комплексы 3d-металлов с электронной конфигурацией d^3-d^7 , в которых наблюдается спиновый переход, вызывают неизменный интерес исследователей и интенсивно изучаются. Изменение спинового состояния 3d-металлов происходит под влиянием изменения внешних условий: температуры, давления или облучения светом определенной длины волны. Наиболее часто явление спинового перехода наблюдается в комплексах железа(II) и железа(III) с полиазотсодержащими лигандами, имеющих близкое к октаэдрическому строение координационного полиэдра и узел FeN_6 . Комплексы, обладающие свойством молекулярной бистабильности, имеют перспективу технического применения в качестве температурных сенсоров, активного элемента различных типов термоиндикаторов, носителей информации.

Одним из наиболее перспективных классов лигандов для синтеза комплексов железа(II), в которых проявляется спиновый переход, являются трис(пиразол-1-ил)метан ($HC(pz)_3$) и его производные. В комплексном катионе Fe(II) с двумя молекулами $HC(pz)_3$ образуется слабо искаженный октаэдрический полиэдр с координационным узлом FeN_6 . Это создает предпосылку для проявления спинового перехода в соединениях общей формулы $[Fe(HC(pz)_3)_2]A_n$, где A – анион, $n = 1, 2$.

Поскольку СП является одной из наиболее важных особенностей с точки зрения практического применения, исследовательская работа посвящена термодинамическому исследованию комплексных соединений Fe(II) методом дифференциальной сканирующей калориметрии и обнаружение тепловых эффектов связанных со спиновым переходом.

Для изучения термодинамических свойств использован дифференциальный сканирующий калориметр NETZSCH DSC 204 F1 Phoenix. В работе была определена температура, рассчитана энтропия и энтальпия перехода, в области спинового перехода.

Результаты показывают, что на температуру и характер спинового перехода влияет большое количество факторов. В частности, состав соединения (лиганд и внешнесферный ион), присутствие растворителя, методика синтеза и пр.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Пищур Д. П.

Изучение фотосферы Солнца

Коняев Е. С.

Новосибирский государственный университет

В работе будет исследоваться фотосфера Солнца – тот излучающий слой, в котором формируется непрерывный спектр излучения тех химических элементов, из которых состоит плазма Солнца. Фотосфера даёт основную часть излучения звезды. На поверхности фотосферы Солнца наблюдаются крупномасштабные области пониженной температуры – солнечные пятна, тёмные области на Солнце, температура которых понижена примерно на 1500 К по сравнению с окружающими участками фотосферы. Потемнение фотосферы в пятнах обусловлено влиянием магнитного поля: происходит подавление конвективных движений вещества и, как следствие, снижение потока переноса тепловой энергии в этих областях.

Возможно наблюдение Эффекта Вильсона – изменение видимой формы солнечного пятна в зависимости от его положения на диске Солнца, в том случае если пятна останутся в той же локализации что и в феврале 2017 – вблизи края диска Солнца и если активность этих зон будет повышена (в данное время пятна слабо контрастны). Этот эффект вызван тем, что солнечное пятно имеет форму блюдцеобразного понижения в солнечной атмосфере глубиной около 500–700 километров ниже уровня фотосферы.

В моменты наибольшего спокойствия атмосферы можно зафиксировать гранулы образования в фотосфере Солнца, вызванные конвекцией плазмы.

Конвективные потоки формируют колонны конвекции, перемешивающие вещество в зоне конвекции (область звезды, в которой перенос энергии из внутренних районов во внешние происходит главным образом путём активного перемешивания вещества). Гранулы являются видимыми вершинами таких отдельных колонн и образуют зернистую структуру, называемую грануляцией. Среднее время существования гранул – от 8 до 20 минут.

В данной работе был использован телескоп системы Клевцова ТАЛ-200К, зеркальная камера Canon 400D, солнечный фильтр Baader Planetarium Astrosolar, обработка видеороликов производилась в программе Autostakkert.

Научный руководитель – Нестеренко И. Н.

**Исследование структуры и свойств покрытий
полученных методом электровзрывного напыления**

Кучумова И. Д.

Новосибирский государственный технический университет

Метод электровзрывного напыления (ЭВН) является одним из перспективных способов получения покрытий. Покрытия, полученные данным методом, позволяют повысить эксплуатационные показатели и срок службы изделий. Основным преимуществом данных покрытий является высокая адгезия с материалом основы.

Нанесение покрытий электровзрывным напылением осуществляется за счет взрыва проволоки. ЭВН без оплавления материала поверхности основы позволяет получить слои напыляемого металла. При многократном напылении слоев различных металлов можно получить композиционные покрытия со слоистой структурой. ЭВН с оплавлением поверхности металла основы и перемешиванием с напыляемым материалом позволяет получать покрытия со структурой, в которой в матрице одного металла расположены включения других фаз.

Для формирования покрытий использовалась медная и титановая проволока с диаметром поперечного сечения от 2 до 4 мм. В качестве подложек, на которые наносилось покрытие, использовали пластины из меди и титана (тех же марок) размерами 100×40 мм. На титановую пластину напыляли медное покрытие, а на медную пластину – титановое. Используемые материалы широко применяются в различных отраслях промышленности и машиностроения, в том числе и для формирования покрытий.

Электровзрывное напыление медных и титановых покрытий на титановые и медные пластины осуществлялось в лаборатории университета г. Кумамото в Японии на установке для электровзрывного напыления покрытий.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент Батаев И. А.

Компрессионная и температурная динамика структуры комплекса меди с нитроксильным радикалом

Летягин Г. А.

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

Важнейшей характеристикой твердых фаз всех соединений, содержащих парамагнитные центры, и особенно для молекулярных магнетиков, являются данные по температурной зависимости их магнитных свойств. Аномалии их поведения связаны со структурными перестройками и могут быть надежно интерпретированы только при наличии данных рентгеноструктурного анализа по температурной динамике структуры. Первые результаты по зависимости магнитных свойств молекулярных магнетиков от внешнего давления показали их высокую чувствительность к его изменению [1, 2]. Но данные по *компрессионной динамике структуры* для таких соединений в литературе практически отсутствуют.

Изучение трансформации структуры комплекса гексафторацетилацетоната меди(II) $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ со стабильным нитроксильным радикалом (L^{All}) $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{All}}]_{\infty}$ в диапазоне давления от 10^{-4} ГПа до 1 ГПа показало принципиальное различие температурной [3] и компрессионной динамики его структуры.

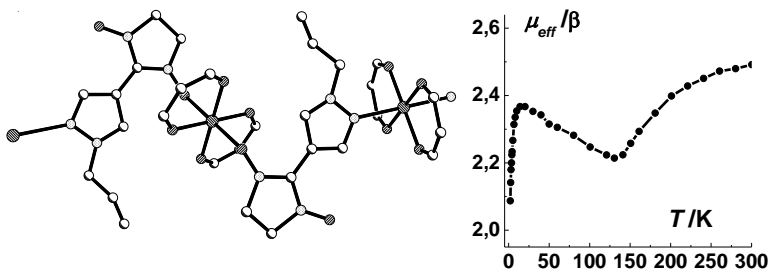


Рис. 1. Структура и магнитные свойства $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{All}}]_{\infty}$ при 10^{-4} ГПа

1. Maryunina K. et al. // J. Materials Chem. C., 2015, 3, 7788–7791.
2. Artiukhova N. et al. // J. Materials Chem. C., 2016, 4, 11157–11163.
3. Марюнина К. Ю. и др. // Изв. АН. Сер. хим., 2013, 2337–2345.

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

Экспериментальное исследование показателей огнестойкости древесины с различными защитными средствами в изменяющихся окружающих средах и их поведение в условиях пожарах

Лоскина К. С., Олесов С. С.

Государственное бюджетное профессиональное образовательное учреждение Республики Саха (Якутия) «Чурапчинский колледж»

Деревянные конструкции находят широкое применение в строительстве, однако горючесть дерева является недостатком, ограничивающим использование древесины в строительстве. Защитить древесину от огня можно путем ее пропитки водными растворами антипиренов или облицовки поверхности древесины негорючими плитными материалами и защитными покрытиями.

Целью данной работы является анализ эффективности применения огнезащитных средств для древесины.

В рамках работы применены методы исследования на огнестойкость. Огнестойкость конструкций характеризуется продолжительностью времени, в течение которого в условиях пожара они сохраняют свою несущую способность и устойчивость.

Для сравнения мы применили 9 образцов без защитных средств и с 2 пропиточными, огнезащитными средствами зарубежного и отечественного производства при разных условиях окружающей среды.

Во время исследования образцы с огнезащитными средствами не сгорели, даже не воспламенились. Образцы с эмалью быстрее всех воспламенились, сгорели и потеряли теплоизолирующие способности. Образцы с покрытием «Тонотексом» и огнезащитным средством зарубежного производства не воспламенились и не потеряли своей целостности и несущей конструкции, что доказывает высокую эффективность огнезащитного средства. Образец с защитным составом «Тонотекс с воском» и огнезащитным средством отечественного производства воспламенился, но не сгорел. В результате мы видим, что применение огнезащитных средств намного эффективнее и не имеют пожарной опасности, чем образцы без огнезащитных средств даже при меняющихся условиях окружающей среды.

Исследование позволяет сделать вывод о серьезных достоинствах и эффективности применения огнезащитных средств для древесины.

Таким образом, из использованных при эксперименте огнезащитных средств зарубежного и отечественного производства имеют аналогичные, высококачественные свойства.

Научный руководитель – отличник профобразования РС (Я) Жергина М. В.

Сравнительное исследование свойств растворов сополимера акрилата аммония и гуммиарабика – компонентов воднодисперсионной краски

Львова С. А.

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики

Исследование направлено на изучение раствора синтетического полимера, а именно – сополимера акрилата аммония (SYNTRAN KL-219) в качестве полимерного связующего. Целью исследований является применение раствора сополимера акрилата аммония в красках для художественного творчества и замены дорогостоящего гуммиарабика. Актуальность проблемы обусловлена в недостаточном использовании экологически чистых водорастворимых полимеров в лакокрасочных материалах (ЛКМ). Одним из основных свойств пленкообразующего компонента, используемого в рецептуре ЛКМ, являются его поверхностные свойства. Измерение поверхностного натяжения выполнено на приборе дю-Нуи. Результаты эксперимента показали снижение поверхностного натяжения во всей области концентраций полимера, что свидетельствует об отсутствии мицеллообразования, а снижение поверхностного натяжения является следствием влияния функциональных групп полимера. Следовательно, изучаемый раствор является истинным, что позволяет сделать практический вывод, а именно, отсутствие поверхностной активности делает необходимым введение в рецептуру краски поверхностно-активного вещества для улучшения растворения компонентов ЛКМ и увеличения адгезионной способности композиции. Получение пленок выполнено при температуре 23 °С, в этом случае приходится значительно усложнять систему, вводя в неё пластификаторы. В качестве пластификатора использовали многоатомный спирт – глицерин (10 % от массы полимера). Для ускорения времени сушки пленок в раствор был добавлен коалесцент, а именно этилацетат в количестве 3% от массы полимера. Добавка этилацетата улучшила слипание полимерных частиц в процессе формирования пленки, ускорила скорость обезвоживания и обеспечила дополнительную пластификацию полимера. Определение блеска и белизны выполнено фотоэлектрическим методом на блескомере ФБ-2. Сравнительная оценка физико-химических свойств пленок позволяет сделать следующие выводы: изучаемый сополимер акрилата аммония не уступает дорогостоящему гуммиарабику. Полученные результаты могут служить основой для синтеза отечественного продукта со свойствами, не уступающими Синтрейну.

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Осовская И. И.

**Морфология поверхностных наноструктур германия
на структурированных подложках кремния**

Лю Цзючжао

Новосибирский государственный университет

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Эти квазиульмерные системы обладают замечательными физическими свойствами и могут получить применение в электронных приборах и устройствах, таких, как светодиоды, лазеры на КТ, спинтронная память и логические элементы для квантовых вычислений. Одним из методов получения пространственно упорядоченных массивов КТ является молекулярно-лучевая эпитаксия на структурированных подложках, т. е. на подложках, поверхность которых содержит систему упорядоченных ямок, сформированных с помощью литографии. Ямки служат местами преимущественного зарождения КТ при последующей гетероэпитаксии. Механизм роста на поверхности со сложным рельефом не достаточно изучен. В данной работе методом молекулярной динамики рассчитана удельная энергия для различных морфологий nanoостровков Ge на структурированных подложках Si. При этом варьировались число, положение и размер nanoостровков в ямках. Ямки имели форму перевернутых усеченных пирамид, угол наклона стенок ямок также варьировался. Из сравнения величин удельной энергии для набора морфологий делалась оценка, какая конфигурация nanoостровков является энергетически выгодной. Результаты выполненных расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными по росту Ge на структурированных подложках Si.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Новиков П. Л.

Исследование структурных и оптических свойств люминофора $\text{CaSnO}_3:\text{Yb}^{3+}, \text{RE}^{3+}$ ($\text{RE}=\text{Er}; \text{Ho}; \text{Tm}$)

Марьина У. А., Марьин А. П.

Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь

Развитие науки и техники требует создания новых стоксовых и антистоксовых люминесцентных материалов, излучающих в ИК-области. В настоящее время такие люминофоры изготавливают на основе сульфидных и фторидных соединений. Целью нашей работы стало изучение новых люминесцентных структур на основе станната кальция, активированных ионами редкоземельных элементов. Данные люминофоры более просты в изготовлении [1] и обладают люминесценцией в ближней и средней ИК-области [2], что делает их перспективными для исследования.

Твердофазным методом синтезированы серии опытных образцов CaSnO_3 , активированного ионами Yb^{3+} , Er^{3+} , Ho^{3+} , Tm^{3+} . Температура синтеза 1250 °С, время синтеза изменялось от 10 до 18 часов. Рентгенофазовый анализ производили на дифрактометре «ДИФРЕЙ 401» (Cu K α -излучение Ni-фильтр), параметры элементарных ячеек рассчитывали с использованием программы «Diffract». Анализ дифрактограмм показал, что с увеличением времени прокаливания количество целевой фазы CaSnO_3 в образцах увеличивается. Параметры кристаллической решетки CaSnO_3 соответствуют структурному типу «перовскит», элементарная ячейка имеет орторомбическую сингонию.

Изменяя параметры синтеза и исходные компоненты шихт, нам удалось получить составы $\text{CaSnO}_3:\text{Yb}^{3+}, \text{RE}^{3+}$ ($\text{RE}=\text{Er}, \text{Ho}, \text{Tm}$), люминесцирующие в ближней ИК-области при возбуждении ИК-лазером большей частоты. В качестве исходных реактивов использовались: CaCO_3 , $\text{Sn}(\text{OH})_2$, SnCl_2 , Yb_2O_3 и дополнительных активаторов Er_2O_3 , Ho_2O_3 , Tm_2O_3 , которые добавлялись в шихту в виде растворов. Спектры люминесценции и возбуждения снимались с использованием монохроматора МДР-41 и спектрофотометра Hitachi 850. При возбуждении структур лазером с длиной волны 811-960 нм наблюдается люминесценция в ИК-области, характерная для энергетических переходов в ионах Yb^{3+} и RE^{3+} .

1. Марьина У. А., Воробьев В. А. Особенности синтеза перовскитоподобных структур типа MSnO_3 ($\text{M}=\text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$) и исследование их люминесцентных свойств // Вестник СКФУ: науч. жур. 2016. №1 (52). С. 7–13.

2. Марьина У. А., Воробьев В. А. Исследование люминесцентных свойств станната кальция CaSnO_3 , активированного ионами редкоземельных металлов // Вестник СКФУ: науч. жур. 2016. №4 (55). С. 36–41.

Научный руководитель – д-р тех. наук, проф. Воробьев В. А.

Измерение концентрации кислорода в тонких пленках субоксида кремния методами FTIR, RBS и WDX

Меркулова И. Е.

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

В течение последних десятилетий уделяется много внимания пленкам аморфного субоксида кремния ($\alpha\text{-SiO}_x\text{:H}$) для использования в микроэлектронике, оптике, а также для создания различных слоев солнечных элементов. Благодаря усовершенствованию методов диагностики, стало возможным получать более детальную информацию о структуре и составе тонких пленок $\alpha\text{-SiO}_x\text{:H}$, которые определяют свойства данных пленок.

В данной работе исследовались тонкие пленки $\alpha\text{-SiO}_x\text{:H}$, синтезированные с помощью метода газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой. В процессе синтеза увеличивался расход моносилана (SiH_4) при постоянном расходе аргона, что приводило к увеличению скорости роста и уменьшению концентрации кислорода в пленках.

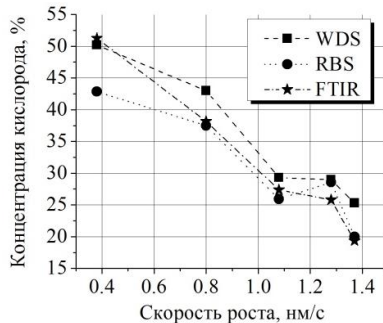


Рис. 1. Зависимость концентрации кислорода от скорости роста пленок

Для определения концентрации кислорода в пленках использовались следующие методы: спектроскопия в ИК-диапазоне (FTIR), спектроскопия резерфордского обратного рассеяния (RBS) и дисперсионная рентгеновская спектроскопия по длине волны (WDX). Видно, что данные, полученные этими методами, хорошо согласуются между собой (см. рис. 1).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-08-08334-а.

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

Портативный разрывной стенд с аналогово-цифровыми измерительными датчиками

Ноговицын С. И.

Якутский индустриально-педагогический колледж

В современных условиях инновационного развития среднего профессионального образования важной ролью является повышение уровня профессионального обучения за счет использования современного учебно-лабораторного оборудования, обеспечения наглядно демонстративных материалов, стендов и наглядных пособий.

Целью работы является проектирование и разработка опытного образца портативного разрывного стенда с применением расчета в среде 3-D моделирования методом конечных элементов.

Проанализировав существующие заводские модели разрывных стендов Российской Федерации и зарубежных образовательных университетов, сделано техническое задание на проект, в основе которого легкость и прочность конструкции с широким диапазоном применения нагрузок до 50 кН.

С помощью программы AutoCAD разработан чертеж, где габаритные размеры подобраны в соответствии диапазона испытываемых образцов согласно ГОСТ 1497 «Методы испытания образцов на растяжения».

Построенная 3-х мерная модель методом конечных элементов в программе APM Structure 3D, позволила подобрать основные материалы согласно техническому заданию.

Обработка результатов осуществляется модулем ZET 210, где в качестве датчиков используются тензорезисторы подключенные по мостовой схеме.

Разработанная модель разрывного стенда успешно применяется в лабораторных работах на предмете профессионального цикла «Материаловедение».

1. Единая система конструкторской документации. Электронная модель изделия. Общие положения. ГОСТ 2.052 – 2006. С.15

2. Программное обеспечение ZETLab. Руководство оператора. Ч. 1, ЗТМС.00068-01 34.

Научный руководитель – Матаннанов А. К.

Компьютерная симуляция реального рентгеноструктурного эксперимента на четырехкружном дифрактометре с двухкоординатным детектором

Паулиш Н. А.

Новосибирский государственный университет

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

Целью работы является создание компьютерной модели дифракции рентгеновского излучения на кристалле в экспериментах на четырехкружном дифрактометре с двухкоординатным детектором. Существующие модели (например, реализованные в ПО Bruker APEXII [1]) не достаточно точно учитывают аппаратные особенности дифрактометра и, в частности, позволяют определять параметры элементарной ячейки с точностью $\approx 0,05\text{--}0,01 \text{ \AA}$. Однако, для некоторых задач требуется более высокая точность. Задачей разрабатываемой модели является фиксация малых изменений параметров элементарной ячейки кристалла на уровне $0,001 \text{ \AA}$. Для достижения этого необходимо учитывать реальный профиль рефлекса в дифракционной картине, на который влияют геометрические размеры кристалла и поглощение им излучения, немонохроматичность излучения, дифракция, не связанная с исследуемым образцом (держатель кристалла, воздух и т. д.) и другими причинами.

Четырехкружный дифрактометр состоит из источника рентгеновского излучения, дополненного монохроматором и коллиматором; гониометра, обеспечивающего вращение образца вокруг трех осей, проходящих через его центр; двухкоординатного CCD детектора, который перемещается по окружности, в центре которой находится кристалл, при этом радиус этой окружности может меняться.

На первом этапе была написана программа, которая по заданным параметрам элементарной ячейки, форме кристалла и коэффициенту линейного поглощения рассчитывает распределение интенсивности (профиль) от заданного рефлекса на детекторе и в обратном пространстве. Для проверки правильности модели проводились эксперименты на слабо- (алмаз) и сильнопоглощающих ($\text{LuBaCo}_4\text{O}_7$) образцах. Результаты сравнения модели и эксперимента показали удовлетворительное согласие профилей рефлексов и позволили выбрать дополнительные приборные факторы, необходимые для их более точного описания. Включение выявленных факторов в модель позволит в дальнейшем исследовать кристаллы на более высоком методическом уровне и изучать более «тонкие» явления.

1. Bruker AXS Inc. (2004). APEX2 (Version 1.08). Madison, Wisconsin, USA.

Исследование термоэлектрических свойств катион-замещенных соединений $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$

Пельменев К. Г., Сыроквашин М. М.

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

Катион-замещенные сульфиды $\text{Me}_{1-x}\text{CuCr}_x\text{S}_2$ являются перспективными соединениями с варьируемыми физическими свойствами. Данные соединения могут быть основой систем, в которых используются эффект колоссального отрицательного магнетосопротивления, термоэлектрический эффект, суперионная проводимость и переходы металл-диэлектрик [1, 2].

Исследования закономерностей термоэлектрических свойств данных соединений способствуют дальнейшему совершенствованию материалов для технического применения в области сенсорной электроники, проектирования высокоэффективных термоэлектрических преобразователей энергии.

В настоящей работе изучались термоэлектрические свойства образцов катионзамещенных железосодержащих слоистых дисульфидов, синтезированных в виде порошков, блочных кристаллов и монокристаллических пластинок.

Для проведения измерений термоэлектрических параметров была создана экспериментальная установка, отработана методика проведения эксперимента, произведена поверка установки по образцам с известными параметрами.

В работе исследованы зависимости коэффициента Зеебека, проводимости и теплопроводности от температуры для образцов состава $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ ($0 \leq x \leq 0,3$) и $\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{CrS}_2$ ($0 \leq x \leq 0,03$) в диапазоне температур 100–450 К, а также произведена оценка термоэлектрического качества соединений (ZT).

1. Титов С. В., Горбенко А. П., Якшибаев Р. А. Ионная проводимость, особенности структуры и мультифрактальные свойства межзеренных границ в $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$. Известия РАН. Серия физическая, 2007, 71(5), С. 743–744.

2. Альмухаметов Р. Ф., Якшибаев Р. А., Абдуллин А. Р. Образование и магнитные свойства твердых растворов $\text{CuCr}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}_2$. Неорганические материалы, 2002, 38(5), С. 548–550.

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

**Исследование структуры ультрадисперсных
нанесённых катализаторов $\text{MoS}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ с использованием
современных методов рентгеновской дифракции**

Петнев И. В.

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

В настоящее время в качестве альтернативных источников энергии рассматриваются продукты пиролиза биомассы (бионефть) а также возобновляемое сырьё на основе жирных кислот: непившевые масла, отработанные фритюрные жиры и т. д. [1]. Нанесенные сульфидные катализаторы $\text{MoS}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ проявляют высокую активность в каталитическом процессе гидродеоксигенации (ГДО), направленного на снижение высокого содержания кислорода и облагораживание сырья растительного происхождения. Структурная диагностика является неотъемлемым этапом при разработке и тестировании каталитических материалов. Однако высокая дисперсность активного компонента в составе $\text{MoS}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, катализаторов существенно затрудняет их изучение традиционными методами рентгеноструктурного анализа (РСА). В качестве метода диагностики структурных и дисперсных характеристик, как правило, используется метод просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ПЭМВР). В последние годы активно развиваются рентгеновские методы диагностики ультрадисперсных систем, основанных на анализе полного профиля рентгенограммы.

Представленная работа посвящена изучению структуры серии ультрадисперсных катализаторов $\text{MoS}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ с помощью современных методов рентгеновской дифракции. Показаны возможности метода Дебая (Debye Function Analysis) [2], который позволяет рассчитать дифракционный профиль от модельных частиц любой структуры, в определении средних размеров и формы кристаллитов MoS_2 в составе катализаторов, а также метода распределения атомных пар (pair distribution function analysis) в определении ближнего порядка атомов в частицах MoS_2 .

Показано, что в рассмотренных катализаторах нанесенные частицы MoS_2 имеют анизотропную форму. Средняя толщина двумерных (2D) кристаллитов MoS_2 соответствует только одному пакету слоистой структуры MoS_2 , латеральные размеры не превышают 3.5 нм.

1. Murzin D. Yu., Simakova I. L. Catal. Ind., 2011, 3, P. 218–249.

2. Yatsenko D. A., Tsybulya S. V. Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2012, 76, 382.

Научный руководитель – канд. хим. наук Пахарукова В. П.

Оценка низкотемпературной зависимости скорости звука в ориентационном стекле фуллерита C_{60}

Резванова А. Е.

Томский государственный университет систем управления
и радиоэлектроники

Целью данной работы было исследование природы линейного слагаемого в теплоемкости и определение из данных теплоемкости низкотемпературной зависимости скорости звука в фуллерите C_{60} . Теплоемкость и скорость звука ультрачистого фуллерита C_{60} были исследованы в интервале температур от 1,2 до 120 К. Анализ полученных результатов теплоемкости проведен в предположении, что поступательные, вращательные и внутримолекулярные степени свободы вносят аддитивный вклад в теплоемкость C_{60} . Линейный член в температурной зависимости теплоемкости ниже 3 К, по-видимому, может быть обусловлен наличием низкоуровневых туннельных уровней в ориентационном стекле C_{60} . Ниже 10 К расчет стекольного вклада в теплоемкость и низкотемпературную зависимость скорости звука был проведен нами в рамках модифицированной модели динамической конфигурации возбуждений (ДКВ). Низкоэнергетические туннельные состояния, которые расположены на границах доменов, по-видимому, вносят основной вклад в низкотемпературные эффекты в теплоемкости и скорости звука. Для получения температурной зависимости скорости звука выше 10 К мы использовали соотношение между упругими и термодинамическими свойствами.

Благодарность: Мы благодарны за финансовую поддержку Российскому фонду фундаментальных исследований (проект №16-32-50015).

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Барабашко М. С.,
канд. физ.-мат. наук Пономарев А. Н.

Исследование структуры и морфологии наноструктурированной формы χ -оксида алюминия

Саламатов И. Н.

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

Оксиды алюминия являются уникальным классом объектов благодаря наличию большого числа нанокристаллических метастабильных форм. Одной из таких форм является χ - Al_2O_3 , получаемый дегидратацией гиббсита при температурах выше 500°C и стабильными при 900°C .

Считается, что χ -форма оксида алюминия имеет структурный тип шпинели $\text{A}^{2+}\text{B}^{3+}_2\text{O}^{2-}_4$ с катионными вакансиями, статистически расположенными как в тетраэдрических, так и октаэдрических позициях [1]. Данная форма имеет высокую дисперсность (размеры кристаллитов от 3 до 10 нм) и дефектную структуру, что приводит к трудностям в применении стандартных подходов рентгеноструктурного анализа.

По этой причине в работе используется метод DFA (Debye Function Analysis) [2], позволяющий рассчитать полный профиль дифрактограммы от любой структуры (в том числе некристаллической), не используя искусственное размытие дифракционных максимумов, как это характерно для метода Ритвельда.

В настоящей работе рассматриваются планарные дефекты структуры шпинели, приводящие к образованию дополнительного пика в дифрактограмме χ - Al_2O_3 и определяется 3D наноструктура, характерная для данной формы оксида алюминия.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-23-00037.

1. Tsybulya S. V., Kryukova G. N. Phys. Rev. 2008, 77, 024112.

2. Yatsenko D. A., Tsybulya S. V. Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2012, 76, 382.

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

**Особенности спектров комбинационного рассеяния света
и их связь со структурой углеродных пленок,
полученных ионно-лучевыми и дуговым методами**

Семерикова А. И.

Новосибирский государственный университет

В работе исследованы спектры комбинационного рассеяния света (КРС) аморфных углеродных пленок (а-С и а-С:Н) с целью установления связи между особенностями спектров КРС и результатами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Для исследования отобраны наиболее твердые образцы, характерные для каждого метода синтеза.

Пленки осаждались на монокристаллический кремний. 1 – плёнки синтезированы из ионных пучков низких энергий (150 эВ) с помощью источника типа End-hall. Газ – CH_4 . 2 – плёнки, получены непосредственно из ионных пучков высоких энергий (500 эВ) с помощью источника ионов с азимутальным дрейфом электронов. Газ – C_3H_8 . 3 – плёнки, синтезированы импульсным дуговым способом распыления графита (энергия, примерно, 30 – 100 эВ).

Рамановские спектры получены на спектрометре Jobin Yvon T64000 с длиной волны возбуждения – 514,5 нм. Толщины покрытий измерялись с помощью лазерного эллипсометра LEF – 752. Твердость определялась методом индентирования на сканирующих нанотвердомерах «НаноСкан-3D» и «НаноСкан-4D». Исследование структуры проводилось на просвечивающих электронных микроскопах JEOL JEM-4000EX и JEM-2200FS.

Установлено, что, пленки, полученные импульсным дуговым методом, содержат элементы упорядоченных структур в аморфной матрице. Размытость колец на электронограмме объясняется присутствием преимущественно аморфной фазы. В плёнках, полученных из ионных пучков низких и высоких энергий, наиболее выражена аморфная фаза. Сильная размытость колец может быть связана с избыточной толщиной плёнок (120-250 нм). В этом случае на фоне дифракции от преимущественно аморфной фазы сигнал от структурированных образований практически незаметен. Наличие пяти- и семизвенных колец, выявленное методом рамановской спектроскопии, может являться не достаточным условием для формирования фуллереноподобных структур [1].

1. Wang Y., Gao K., Zhang J. J. Appl. Phys. 120 (2016) 045303-1 – 045303-7

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

Исследование фотохромной полимерной композиции

Смирнова А. В.

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики

Целью данного исследования является разработка методов усиления фотохромного эффекта для создания полимерных композиций с улучшенными фотохромными характеристиками. Для получения фотохромных полимерных композиций с улучшенными свойствами необходимым является варьирование структуры как фотохромных пигментов, так и полимерных матриц. Полимерные матрицы должны обладать удовлетворительными физико-механическими свойствами, высокой прозрачностью, совместимостью с фотохромными пигментами, а также иметь большой свободный объем. В качестве матрицы использовали полиметилметакрилат, в качестве пигмента – нафтопиран. Большое влияние на фотохромный эффект оказывает растворитель, одним из главных требований к которому является скорость растворения композиции. Исследования показали хорошую растворяющую способность по отношению к нафтопирану и полиметилметакрилату проявляют: 1,2-дихлорэтан, хлороформ, метилэтилкетон. Время растворения в этих растворителях: 40,50,65 мин соответственно. Для поиска растворителя с меньшим временем растворения применили метод Хансена, который справедлив для многокомпонентных систем. Результаты исследования растворимости ПММА по Методу Хансена показали, что лучшим растворителем ПММА является смесь растворителей ацетон – хлороформ. Время растворения в смеси составило 8 минут при 45 °С, в то время как в монорастворителях время растворения 75 минут в ацетоне и 50 минут в хлороформе, то есть скорость растворения в смеси растворителей снизилась в 4 раза. Пленки для изучения фотохромного эффекта получали методом напыла. Толщина пленок – 60 мкм. Экспериментально установлены оптимальные условия получения полимерной пленки, а именно: температура растворения – 45 °С, концентрация раствора ПММА – 2 %, концентрация пигментов – 5 % от массы полимера. В работе для измерения фотохромных свойств пленки в качестве источника излучения использовали шаровую ртутно-кварцевую лампу сверхвысокого давления типа ДРШ-250, которая является мощным, концентрированным источником излучения видимой и ультрафиолетовой частях спектра. На спектральном комплексе измерена кинетика потемнения различных образцов пленок под действием УФО. На Specord M40 сняты спектры поглощения полимерной композиции в зависимости от длин волн.

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Осовская И. И.

**Разработка программно-аппаратного комплекса
для ресурсных испытаний плоских резинотросовых канатов**

Сологуб С. А.

Новосибирский государственный университет

На сегодняшний день в области проектирования грузоподъемных механизмов (лифты, шахтные установки, судовые подъемники) широко используются резинотросовые канаты (РТК). Производители РТК не проводят ресурсных испытаний, достаточных для принятия проектировщиками оправданных коэффициентов запаса по технико-экономическим показателям, что приводит, например, к более частой замене канатов.

Данная работа посвящена созданию испытательного стенда для выявления экспериментальной зависимости, аналогичной долговечности подшипника – времени разрушения резинотросового каната от действующей сжимающей нагрузки. Еще одной целью работы является автоматизации испытательного стенда, имитирующего условия на конкретном исследовательском объекте для определения применимости конкретного каната, в котором канат проходит такое же количество перегибов, так же нагружен и претерпевает такое же количество рабочих циклов.

В результате выполнения данной работы была впервые экспериментально получена зависимость срока службы резинотросового каната от приложенной сжимающей нагрузки.

Полученные результаты могут быть использованы в исследовании полиуретанов, а также при проектировании лифтовых механизмов, шахтных установок, подъемников на судах – например, при обслуживании пассажирских лифтов периодически визуально оценивается состояние канатов, а имея возможность прогнозировать износ каната, можно проводить проверки реже. Также, детальное изучение плоских РТК позволит создавать конструкцию канатов, которые имеют параметры, оптимальные в конкретных условиях работы.

Научный руководитель – канд. техн. наук, Бакиров Т. С.

Исследование тензорезистивных свойств композитов на основе малослойного графена в полимерной матрице

Стефанюк А. Я., Кузнецов В. А.

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

Композиты на основе малослойного графена (МСГ) представляют большой интерес в области получения и исследования новых функциональных материалов. Частицы МСГ, как наполнитель для различных матриц, в том числе полимерных, приводят к заметному улучшению механических свойств материалов, повышая тем самым эксплуатационные характеристики. Изучение композитов МСГ в матрицах высокотемпературных полимеров является перспективным направлением с точки зрения практических применений таких объектов, в частности для использования в качестве тензочувствительных элементов.

В данной работе изучается тензорезистивный эффект в композите, представляющем собой листы малослойного графена в матрице высокотемпературного полимера. С помощью ультразвуковой обработки МСГ в растворе поли-2,2'-п-оксидифенилен-5,5-бис-добензимидазола в N-метил-2-пирролидоне были получены устойчивые коллоидные дисперсии графеновых частиц. Электропроводящие композиционные плёнки были сформированы методом полива из раствора. Были исследованы два типа экспериментальных образцов – с массовой долей наполнителя 0,75 и 2%.

Проведены измерения коэффициента тензочувствительности:

$$K = \frac{\Delta R}{R_{\epsilon(\min)}} \cdot \epsilon$$

где $\Delta R = R_{\epsilon(\max)} - R_{\epsilon(\min)}$; $R_{\epsilon(\max)}$ и $R_{\epsilon(\min)}$ – сопротивления при максимальной (при растяжении образца) и минимальной (при сжатии) продольной деформации, соответственно; $\epsilon = \Delta l / l$ – продольная деформация. Образцы были получены вырезанием из полученных плёнок полосок шириной 2 и длиной 8 мм. Образцы крепились к балкам равного сопротивления изгибу клеем на основе цианоакрилата. В ходе эксперимента образцы подвергались циклическим нагрузкам сжатия-растяжения длительностью 10 минут.

Для образцов с массовым содержанием частиц малослойного графена 0,75 и 2% были получены коэффициенты тензочувствительности (с учётом статистической и инструментальной погрешностей) $K = 20,7 \pm 1,0$ и $K = 21,2 \pm 0,9$, соответственно.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. Романенко А. И.,
канд. техн. наук, доцент Бердинский А. С.

Измерение электромагнитных характеристик полимерных пленок, содержащих магнитный микропровод в гигагерцовом диапазоне

Файзулин Р. Р.

Национальный исследовательский Томский государственный университет

За последние десятилетия сверхвысокочастотная электроника сделала значительный шаг вперед. Для дальнейшего развития радиоэлектронных устройств необходимо использовать новые радиоматериалы. Микропровода обладают рядом уникальных свойств и характеристик (малый вес, возможность создания прочных и прозрачных структур, высокая электропроводность и исключительные электромагнитные характеристики) и могут использоваться в радиокомпозитах.

В данной работе исследованы электромагнитные характеристики материалов на основе полиэстеровых пленок, содержащих упорядоченные включения остекленных микропроводов. В процессе изготовления экспериментальных образцов отрезки микропровода одинаковой длины на равноудаленном расстоянии t (равном 1 или 2 мм) помещались в полиэстеровую пленку. Были использованы остекленные микропровода двух различных сплавов: NiCrSiMn с диаметром жилы 17,2 мкм и FeCoBSi с диаметром жилы 23,2 мкм. Исследования экранирующих свойств образцов пленок проводились в свободном пространстве с использованием пирамидальных рупорных антенн и векторного анализатора цепей Agilent PNA-X N4257A в диапазоне частот от 22 до 40 ГГц. На выходе антенн излучение было поляризовано в горизонтальной плоскости.

При вертикальном расположении микропровода в пленке образцы являются практически прозрачными для излучения (коэффициент прохождения $T \sim 100\%$). А в случае горизонтального расположения они в значительной степени экранируют падающее на них излучение ($T \sim 65\%$). При этом различия в коэффициенте прохождения между образцами с NiCrSiMn и FeCoBSi микропроводами незначительны. Уменьшение расстояние между соседними микропроводами в пленке до 1 мм приводит к повышению эффективности экранирования более чем в два раза ($T = 20 \div 25\%$). В случае измерения материалов с двумя слоями композиционных пленок эффективность экранирования значительно возрастает. Варьируя расстояние между микропроводами в полиэстере или число слоев, можно создать тонкое (1 слой в 200 мкм) и прозрачное экранирующее покрытие ($T = 0 \div 100\%$) в рассматриваемом диапазоне частот.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Кулешов Г. Е.

Исследование поверхностной активности твердотельных структур методом инфракрасной термографии

Фаст С. С.

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

Применение инфракрасной термографии для изучения сорбционных процессов, протекающих на поверхности твердых тел с выделением и поглощением теплоты, дает информацию, недоступную другим методам исследования [1]. Мелкодисперсная структура вещества способствует доступу большего числа молекул газа-адсорбата к поверхности, поэтому изучение таких систем представляет особый научный интерес.

В настоящей работе исследовались сорбционные свойства порошкообразных веществ органической и неорганической природы: поваренная соль, сахарная пудра, горчичный порошок, манная крупа, стрептоцид, гидроксид магния, окись алюминия и др. Внутрь камеры в течение 30-60 с направлялись потоки газов, содержащие молекулы O_2 , N_2 , CO , H_2O . Запись термограмм производилась с частотой 100 кадров/с.

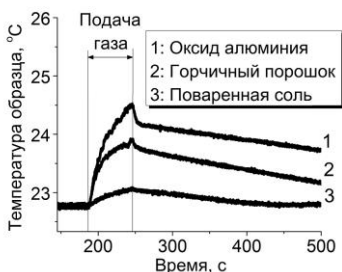


Рис. 1. Температурные характеристики адсорбции для трех образцов.

В качестве примера на рис. 1 продемонстрированы температурные адсорбционные кривые разной амплитуды, полученные синхронно в одном процессе для трех различных образцов.

Показано, что с помощью метода инфракрасной термографии можно успешно исследовать термодинамические свойства порошкообразных материалов при взаимодействии их поверхностей с различными газами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-02-070680).

1. Vainer B. G. et al // In: Proc. QIRT-2014. Available at QIRT Open Archives: <http://qirt.gel.ulaval.ca/archives/qirt2014/QIRT2014.html> (QIRT-2014-167).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Вайнер Б. Г.

Фотохромные системы для инновационных технологий

Хамитова Г. Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики

Проведены сравнительные исследования влияния полимерной матрицы на величину фотохромного эффекта. Наиболее эффективные фотохромные системы получены на основе специальных пигментов (спиро- и нафтопиранов), которые будучи введенными в полимерную матрицу, сообщают ей фотохромные свойства. Получать фотохромные полимерные материалы можно либо химическим введением фотохромных групп в полимер, либо простым смешением полимера с фотохромной добавкой. Можно получить фотохромные полимерные материалы разных видов в зависимости от области их использования: полимерные плёнки, жидкие растворы, тонкие аморфные и поликристаллические слои на гибкой или жёсткой подложке, полимолекулярные слои, монокристаллы, силикатные и полимерные стёкла. Полимерная матрица оказывает большое влияние на характеристики фотохромных превращений. Изменяя природу полимерной матрицы, можно управлять временем жизни её метастабильного состояния, тем самым регулируя скорости окрашивания и релаксации. Несмотря на большое количество публикаций по данному вопросу как российских, так и зарубежных, в настоящее время нет четкого представления о влиянии матрицы на величину фотохромного эффекта. В связи с этим целью данного исследования является сравнительный анализ влияния различных матриц (поликарбоната (ПК), полистирола (ПС) и поливинилацетата (ПВА)). Значимым этапом данного исследования являлось установление оптимального содержания пигмента в полимерной композиции с целью получения максимального фотохромного эффекта. Для определения необходимой концентрации пигмента был проведён эксперимент с наложением двух фотохромных плёнок и их последующим УФ-облучением, в ходе которого выявлено, что плёнка, содержащая 5 % пигмента полностью поглощает УФ-излучение, при этом вторая плёнка остаётся прозрачной. Исследования показали, что оптимальным содержанием пигмента в композиции является 2 % от массы полимера. Установлены оптимальные условия получения пленок для исследуемых матриц: для ПК, ПС и ПВА концентрация раствора – 10; 12 и 7 %; температура растворения – 45; 80 и 20 °С; растворители: 1,2-дихлорэтан, ацетон – четыреххлористый углерод и метилэтилкетон -четырёххлористый углерод соответственно. Полученные плёнки исследовали на кинетику потемнения и релаксации.

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Осовская И. И.

Влияние температуры синтеза на структуру многослойных углеродных нанотрубок, полученных на Fe-Co катализаторе

Цэндсүрэн Цог-Очир

Новосибирский государственный университет

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

Углеродные нанотрубки, в силу уникальности механических свойств, высокой тепло- и электропроводности, являются одним наиболее перспективных материалов, находящихся применение в различных областях науки и техники, в качестве компонентов новых композиционных материалов, элементов электроники, оптики, и т. д. Данная работа посвящена исследованию влияния температуры реакции на дефектность и распределение диаметра многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ), полученных пиролизом этилена катализатора Fe-Co, в интервале температур 610–750° С.

Дефектность МУНТ оценивалась с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света (СКР), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и измерений температурных зависимостей электропроводности.

Для обработки спектров КР использовали следующие моды колебаний D (колебания дефектной структуры; $\sim 1340 \text{ см}^{-1}$), G (тангенциальные колебания атомов углерода в графене; $\sim 1580 \text{ см}^{-1}$), 2D (двухфононное рассеяние; $\sim 2680 \text{ см}^{-1}$). Изменения отношения интенсивностей мод $I(G)/I(D)$ и $I(2D)/I(D)$ использовались в качестве характеристики размеров графеновых фрагментов, являющихся строительными блоками стенок нанотрубок. Полученные результаты свидетельствуют об увеличении отношений $I(G)/I(D)$ и $I(2D)/I(D)$ с увеличением температуры синтеза МУНТ, что соответствует увеличению размеров графеновых фрагментов, образующих стенки МУНТ.

Исследование МУНТ, полученных при различных температурах, позволяет сделать вывод о влиянии температуры синтеза на дефектность и структуру МУНТ, размер частиц катализатора, определяющих средний диаметр углеродных нанотрубок. Обнаружено, что МУНТ полученные при более высоких температурах на Fe-Co катализаторах характеризуются большим средним диаметром и большим размером графеновых фрагментов, входящих в состав слоев трубок.

Работа выполнена при поддержке А. В. Ищенко и В. А. Володина (проведение исследований ПЭМ и СКР), А. И. Романенко (измерения температурных зависимостей электропроводности МУНТ), Д. В. Красникова, В. Л. Кузнецова.

Научные руководители – канд. хим. наук Кузнецов В. Л.

д-р физ.-мат. наук Цыбуля С. В.

Влияние воды на модуль Юнга микротрубок дифенилаланина

Южаков В. В.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России
Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Микротрубки дифенилаланина ($C_{18}H_{20}N_2O_3$, ДФА), образующиеся в результате самосборки, являются перспективным материалом для биосовместимых элементов медицинской техники. Однако их упругие свойства и влияние на них содержания воды в наноканалах изучены слабо.

В данной работе представлены результаты систематических исследований модуля Юнга микротрубок ДФА, выращенных из раствора мономера (Bachem AG, Швейцария) в смеси воды с гексафторизопропанолом (1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol).

Модуль Юнга измерялся локально при помощи сканирующего нанотвердомера НаноСкан-4D (ФГБНУ ТИСНУМ, Россия). Количество воды в микротрубках определялось с помощью конфокального микроскопа комбинационного рассеяния Alpha 300AR (WITec GmbH, Германия) по методике, описанной в работах [1, 2]. Уменьшение количества воды в наноканалах производилось путём контролируемого нагрева микротрубок в муфельной электропечи.

Локальный модуль Юнга исследовался для микротрубок ДФА в исходном состоянии и после контролируемого нагрева при $80^\circ C$ в течение 3 и 8 часов. Измерения производились на неполярной поверхности трубок. В этих же трубках по спектрам комбинационного рассеяния света определялось содержание воды в наноканалах. В результате была выявлена зависимость значений локального модуля Юнга от содержания воды, что открывает возможность управления упругими свойствами микротрубок ДФА.

Исследование выполнено с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых ученых (МК-2294.2017.2) и Правительства Российской Федерации (постановление 211, контракт 02.A03.21.0006).

1. Wu X., Xiong S. et al., J. Phys. Chem. C 116, 9793 (2012).

2. Zelenovskiy P., Kornev I. et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 29684 (2016).

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. Шур В. Я.,
канд. физ.-мат. наук Зеленковский П. С.

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 577.352.2

Новый молекулярный механизм нарушения функционирования бактериальных мембран пептидами-антибиотиками

Афанасьева Е. Ф.

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

Аламетицин – антимикробный пептид, выделяемый из гриба *Trichoderma Viride*. Большинство пептидов – амфифильные молекулы, поэтому при контакте с клеточной мембраной пептиды адсорбируются на ее поверхности. При превышении пороговой концентрации пептиды переходят в трансмембранное положение, образуя поры. Считается, что порообразование обуславливает антимикробное действие аламетицина. Однако антимикробное действие наблюдается и при низких концентрациях пептида, что нельзя объяснить порообразованием.

В работе изучалось влияние аламетицина на наноразмерные неоднородности в модельной фосфолипидной мембране, образованные гостевыми молекулами стеариновых кислот. Стеариновая кислота – это представитель жирных кислот, которые играют важную роль в функционировании мембраны. Исследование проводилось методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) спиновых меток. Импульсные методы ЭПР позволяют изучать магнитные диполь-дипольные взаимодействия неспаренных электронов спиновых меток между собой в нанометровом диапазоне расстояний между ними.

Оказалось, что стеариновые кислоты в мембранах формируют нанокластеры. Наличие пептида аламетицина в составе мембраны даже в малых концентрациях (~0.1 мол.%) серьезно влияет на распределение жирных кислот. Локальная концентрация стеариновой кислоты уменьшается с добавлением аламетицина, что можно объяснить «притягиванием» молекул стеариновой кислоты к пептиду. Жирные кислоты – промежуточный продукт липидного гомеостаза молекул. Поэтому наблюдаемый захват стеариновой кислоты пептидом может нарушать нормальное функционирование бактерии, что может определять антимикробное действие пептида.

Научные руководители – Сырямина В. Н.,
д-р физ.-мат. наук, проф. Дзюба С. А.

Оптимизация масс-спектрометра MALDI-TOF для регистрации фрагментных ионов пептидов

Ашкарин И. Н.

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

Метод матрично-активированной лазерной десорбции/ионизации (MALDI) применяется при исследовании большого числа высокомолекулярных соединений. Метод позволяет переводить сложные нелетучие вещества в газовую фазу и ионизовать их, избегая фрагментации. Наиболее часто MALDI используется в сочетании с времяпролетным масс-анализатором (TOF). Особый интерес для задач протеомики представляют исследования пептидов и белков. Использование масс-спектрометра MALDI-TOF в этих исследованиях позволяет достигнуть высокой точности идентификации соединений массой в несколько десятков тысяч Дальтон.

В режиме регистрации фрагментных ионов масс-спектрометр MALDI-TOF позволяет проводить диссоциацию выбранных ионов, что играет особую роль для определения первичной структуры исследуемых пептидов и белков. Фрагментация иона в большинстве случаев происходит вследствие разрыва пептидной связи, при этом разница между пиками фрагментных ионов будет совпадать с одной из 20 базовых аминокислот.

Целью данной работы являлась оптимизация параметров масс-спектрометра MALDI-TOF направленная на увеличение разрешения и повышение точности в получаемых спектрах, а также на уменьшение влияния погрешностей при секвенировании полипептидов. Многопараметрическая оптимизация масс-спектрометра проводилась по набору известных пептидов в диапазоне масс от 500 до 4000 Дальтон.

В результате работы определены оптимальные параметры для ряда узлов масс-спектрометра: ускоряющих и замедляющих высоковольтных пластин, систем выделения ионов для фрагментации, триггерных систем. Проведенная оптимизация позволила существенно увеличить разрешение прибора, сделав возможной качественную регистрацию фрагментных ионов пептидов и идентификацию неизвестного пептида массой около 1500 Дальтон.

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

Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики первичных реакций термолита нитроалкенов

Бийбосунов А.

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

Простые алифатические нитросоединения представляют значительный интерес как прототипы практически используемых высокоэнергетических соединений. Одна из важных задач исследования энергетических соединений состоит в определении взаимосвязи их структуры и термической стабильности, а также чувствительности к внешним воздействиям. Для решения поставленных задач необходимо знать кинетику и механизм первичных реакций термолита этих соединений. В свою очередь, для расчета констант скорости элементарных реакций необходимы геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний и их термодинамические потенциалы. По причине трудности проведения экспериментов с энергетическими соединениями, высокоточные квантовохимические расчеты представляют собой прекрасную альтернативу эксперименту.

В данной работе велось исследование первичных реакций термического разложения трех изомеров нитропропена (НП) в газовой фазе. Работа преследовала две основные цели: (1) провести детальное тестирование методов теории функционала плотности, широко применяемых для изучения термодинамики энергетических соединений, с помощью результатов высокоточных CCSD(T)-F12 расчетов. (2) Детально изучить канал разложения НП, протекающий через внутримолекулярное присоединение нитрогруппы, на возможность реализации которого указывает экспериментально определенное распределение продуктов термолита.

Были исследованы типичные для нитросоединений первичные реакции разложения: разрыв C-NO₂ связи, нитро-нитритная перегруппировка, изомеризация в аци-форму с последующим разложением. Было установлено, что с помощью функционала M06-2X можно наиболее точно (среднее расхождение с CCSD(T)-F12 ~ 2 ккал/моль) рассчитать геометрию и термодинамические потенциалы НП. Для одного из изомеров (1-нитропропен) реакция внутримолекулярного присоединения нитрогруппы с активационным барьером ~ 48 ккал/моль конкурирует в качестве первичного канала термолита с изомеризацией в аци-форму, а для другого (2-нитропропен) – с реакцией отщепления HONO.

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

Изучение влияния степени диамагнитного разбавления в $[\text{Co}_x\text{Zn}_{(1-x)}(\text{piv})_2(2\text{-NH}_2\text{-Py})_2]$ на величину расщепления спиновых уровней энергии иона кобальта(II) в нулевом магнитном поле

Валуев И. А.

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

Явление снятия вырождения по проекциям спина на ось квантования в отсутствие магнитного поля, известное как расщепление в нулевом поле (РНП), открывает перспективы создания мономолекулярных магнитов и привлекает всё большее внимание исследователей в последние десятилетия.

Наличие эффекта РНП в высокоспиновом комплексном соединении $[\text{Co}^{\text{II}}(\text{piv})_2(2\text{-NH}_2\text{-Py})_2]$ с полным спином $S = 3/2$ приводит к образованию двух крамерсовых дублетов с $S_z = \pm 1/2$ и $\pm 3/2$. Традиционная ЭПР-спектроскопия (9 ГГц) позволяет наблюдать магнито-дипольные переходы только в пределах нижнего дублета $\pm 1/2$, поскольку РНП в данном соединении составляет ~ 2 ТГц. Одним из способов изучения спиновой релаксации между дублетами $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$ может быть возбуждение соответствующих переходов монохроматическим излучением при одновременной регистрации ЭПР-спектров.

Для подавления межмолекулярных взаимодействий, ускоряющих процессы спиновой релаксации, широко применяются диамагнитно разбавленные аналоги изучаемых соединений, например, $[\text{Co}_x\text{Zn}_{(1-x)}(\text{piv})_2(2\text{-NH}_2\text{-Py})_2]$. Однако в данном случае возникает вопрос о влиянии такого разбавления на величину РНП, знание которой необходимо для реализации предложенных выше экспериментов. При этом само определение величины РНП требует применения нестандартных спектроскопических методов с использованием источников терагерцового излучения.

В данной работе было исследовано влияние степени диамагнитного разбавления в $[\text{Co}_x\text{Zn}_{(1-x)}(\text{piv})_2(2\text{-NH}_2\text{-Py})_2]$ на величину РНП методом терагерцовой ЭПР-спектроскопии, реализованной на синхротронной станции BESSY II в Гельмгольц-Центре Берлина. Было обнаружено, что при последовательном разбавлении исходного соединения происходит резкое уменьшение величины РНП от $\sim 75 \text{ см}^{-1}$ до $\sim 50 \text{ см}^{-1}$ в диапазоне значений x от 0,5 до 0,25. Полученные результаты оказались в хорошем согласии с данными рентгеноструктурного анализа, показавшего резкие изменения длин связей между центральным атомом металла и координирующими атомами лигандов в том же диапазоне концентраций.

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

Структура диффузионного пламени полиоксиметилена в противотоке окислителя

Глазнев Р. К.

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

В настоящее время полимерные материалы используются в различных областях деятельности человека, в том числе и в строительстве. В связи с этим возрастают требования к пожарной безопасности их использования. Для понижения горючести полимеров и предсказания распространения пламени по ним необходима достоверная модель горения чистого полимера. В данной работе использовался метод горения полимера в противотоке окислителя для изучения структуры пламени полимера.

Объектом данного исследования стал полиоксиметилен (ПОМ). Данный полимер широко применяется в машиностроении в качестве заменителя металлов и сплавов в различных конструкциях.

Целью данной работы было выбрано изучение химической и термической структуры диффузионного пламени ПОМ в противотоке воздуха. Цилиндрический образец ПОМ ($\rho = 1,44 \text{ г/см}^3$) диаметром 14 мм и длиной 25 мм приготавливались методом горячего прессования при температуре 120°C и давлении 50 атм. Затем он помещался в термостатируемый стакан температурой 30°C . Стабилизация поверхности горения осуществлялась подачей образца вверх с помощью шагового двигателя. Равномерный плоско-параллельный поток воздуха, создаваемый с помощью сопла Витошинского, был направлен по нормали к плоской поверхности образца. Пламя имело форму диска.

Сканирование температурного профиля осуществлялось Pt-PtRh (10%) микротермопарой диаметром 50 мкм. Термопара перемещалась программируемым 3D-сканирующим механизмом. Было получено двумерное температурное распределение газовой фазы пламени в плоскости, перпендикулярной поверхности горения. Однородность температурного профиля по радиальной составляющей позволило свести задачу по составлению распределения по концентрациям химических веществ в пламени к одномерной.

Измерение профилей концентраций химических веществ производилось с помощью масс-спектрометрического комплекса Hiden HPR 60. Были зарегистрированы основные компоненты пламени ПОМ: CH_2O (формальдегид), CO_2 , CO , H_2O , O_2 , N_2 . Произведено моделирование пламени ПОМ модельным пламенем формальдегида в противотоке воздуха программой OPDIFF пакета Chemkin II. Граничные условия соответствовали эксперименту.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Гончикжапов М. Б.

Гибридизационные свойства новых морфолиновых аналогов нуклеиновых кислот с ДНК

Гольшев В. М.

Институт химической биологии и фундаментальной медицины,
г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Производные нуклеиновых кислот (НК), в которых рибозофосфатный остов заменен на морфолиновые кольца, соединённые глициновым линкером, являются перспективными соединениями, как для фундаментальных исследований, так и прикладных разработок [1]. Их применение основано на способности образовывать комплексы с комплементарными последовательностями нуклеиновых кислот. Изучение морфолиновых аналогов олигонуклеотидов затрудняется сложностью их получения. Целью данной работы является определение термодинамических параметров формирования комплексов морфолиновых аналогов НК с ДНК. Для этого разработана термодинамическая модель, позволяющая достоверно определять термодинамические параметры формирования отдельных структурных элементов тандемных комплексов НК. С использованием нативных ДНК/ДНК комплексов $(dA_5)_n/(dT_{5^*n})$, $n = 2-5$ доказана применимость модели, и определены термодинамические параметры формирования элементов нативных тандемных комплексов и их аналогов $(MA_5)_n/(dT_{5^*n})$ (рис. 1). Исследована зависимость термодинамических параметров от значений pH (5.5-8) и ионной силы раствора ($[Na^+] = 10-1000$ мМ). На основании полученных данных установлено зарядовое состояние морфолинового производного при различных значениях pH.

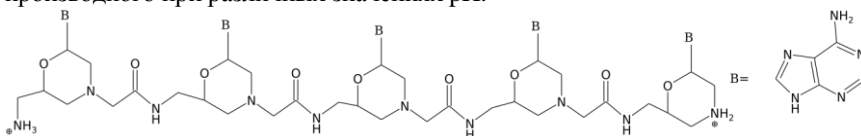


Рис. 1. Морфолиновое производное MA_5 при нейтральных значениях pH

Работа поддержана грантами РФФИ 16-04-01029 и ПФНИ ГАН на 2017-2020 гг. (VI.62.1.4, 0309-2016-0004).

1. Абрамова Т. В. и др. Синтез и свойства метиленкарбоксамидных миметиков нуклеиновых кислот на основе морфолиновых нуклеозидов //Биоорганическая химия. 2012. Т. 38. №. 4. С. 458–471.

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

Динамический переход в белках по данным импульсного ЭПР спиновых зондов

Гольшева Е. А.

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

В биологических средах методами рассеяния нейтронов наблюдается низкотемпературный динамический переход, который заключается в появлении высокоамплитудных движений атомов водорода. Этот переход связан с появлением физиологической активности этих сред. Однако молекулярная природа перехода остается невыясненной.

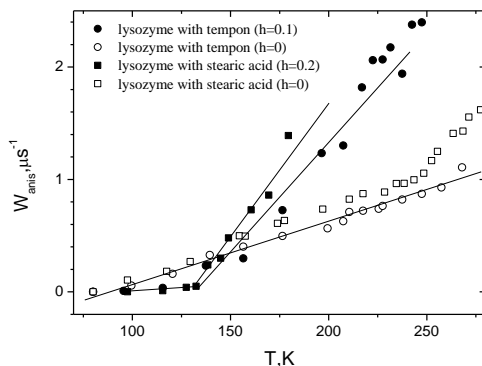


Рис. 1. Температурная зависимость скорости анизотропной релаксации

В данной работе описываются результаты исследования методом импульсного ЭПР динамики спиновых зондов в белке лизоциме с различной степенью гидратации. В отличие от рассеяния нейтронов, где изучаются движения атомов водорода, в этом методе исследуются движения молекул как целых. Найденная температурная зависимость движений согласуется с литературными данными по рассеянию нейтронов, однако различие принципов наблюдения позволило предложить совершенно иную интерпретацию данных. Так, наблюдаемый резкий рост скорости анизотропной релаксации при 130 К (см. рис. 1) объяснен размораживанием подвижности воды в гидратационном слое.

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

Моделирование фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул йода

Дозморов Н. В.

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

Для изучения динамики внутримолекулярных процессов с фемтосекундным временным разрешением широко используется подход «накачка-зондирование» (pump-probe). В совместных экспериментах ИХКГ СО РАН и Фрайбургского университета, этот метод использовался для изучения динамики молекул I_2 при их фотовозбуждении в состоянии ионной пары. При этом для зондирования состояния волнового пакета использовалось измерение «мгновенного» распределения по кинетической энергии относительного движения ионов I^+ и I^- в состоянии ионной пары с использованием техники измерения карт скоростей (velocity map imaging) фотофрагментов.

Данная работа посвящена моделированию фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул I_2 . В рамках нее проведено рассмотрение динамики с точки зрения классической и квантовой механики. Основные цели моделирования – описать динамику внутримолекулярных процессов и получить распределение по кинетической энергии относительного движения ионов в возбуждаемых состояниях ионной пары как функцию времени, что позволит сравнивать эти данные с экспериментально полученными. Все численные расчеты проведены с помощью системы Wolfram Mathematica.

При классическом описании движения система была рассмотрена в виде точечной частицы, находящейся в потенциале, соответствующем изучаемому состоянию ионной пары. Описывая движение частицы с помощью классических законов, была получена зависимость распределения по кинетической энергии от времени, которая сравнивалась с экспериментальными данными [1].

Для квантовомеханического описания системы было проведено моделирование движения волнового пакета при возбуждении молекулы из основного состояния в состояние ионной пары. Распространение волнового пакета рассчитывалось с помощью метода расщепления экспоненциального оператора (exponential split operator method).

1. von Vangerow J. et al. Role of ion-pair states in the predissociation dynamics of Rydberg states of molecular iodine // Physical Chemistry Chemical Physics. 2016. Т. 18. №. 28. С. 18896–18904.

Исследование фотохимических реакций 4-гидроксихинолина с аминокислотами и белками

Дятлов М. Г.

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

Основными УФ-фильтрами хрусталика глаза приматов являются кинуренин и его производные. Со временем кинуренин подвергается фото- и терморазложению. Одним из образующихся продуктов является 4-гидроксихинолин (4HQN), имеющий большой выход реакционно активного триплетного состояния (^14HQN). Ранее было показано, что ^14HQN может вступать в реакции с аминокислотами триптофаном (Trp) и тирозином по механизму переноса электрона, с образованием соответствующих радикалов. Реакции последних могут приводить к необратимым модификациям белков хрусталика глаза, что может давать существенный вклад в общую модификацию белков как при нормальном старении хрусталика, так и развитии катаракты. На данный момент дальнейшая судьба образовавшихся радикалов остается неизвестной.

Целью данной работы было исследование фотоиндуцированных реакций между 4HQN и Trp. Для этого использовались методы стационарного и лазерного импульсного фотолиза, а также высокоэффективной жидкостной хроматографии и масс-спектрометрии.

Было обнаружено, что радикал 4HQN^\bullet вступает в реакцию с кислородом с образованием исходного 4HQN и супероксид радикала $\text{O}_2^{\bullet-}$. Последний является реакционно активной частицей, которая быстро реагирует с Trp, с его последующим окислением. Таким образом, фотоиндуцированные реакции между радикалами 4HQN^\bullet и Trp^\bullet могут протекать в двух режимах: (1) концентрации радикалов существенно превышают концентрацию остаточного кислорода в растворе (Режим 1) и (2) обратная ситуация (Режим 2). Фотолиз в обоих режимах показал, что основным каналом гибели образующихся радикалов является обратный перенос электрона с образованием исходных соединений. Основными продуктами фотолиза в обоих режимах являются димеры и окисленные формы Trp. В случае Режима 1 наблюдаются продукты распада 4HQN, которые полностью отсутствуют в случае Режима 2.

Полученные результаты показывают, что фотовозбужденный 4HQN способен индуцировать модификации белков хрусталика глаза и приводить к их димеризации, а при наличии молекулярного кислорода вызывать окисление белков. Таким образом, 4HQN может играть важную роль в старении хрусталика и образовании катаракты.

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

Получение оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке

Ершов К. С.

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

Возможность генерации полупроводниковых материалов (диоксида титана, триоксид вольфрама и т. д.) представляет большой практический интерес. Реализация этого позволит исследовать элементарные фотопроцессы, связанные с применением этих материалов в водородной энергетике и фотокатализе, с использованием высокоэффективных методов исследования.

В представленной работе предпринята попытка генерации оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке двумя методами: из летучих соединений гексакарбонила вольфрама и изопророксида титана и абляции титановой и вольфрамовой фольги. Для фотовозбуждения молекул и их комплексов использовалось излучение четвертой гармоники твердотельного Nd:YAG лазера на длине волны 266 нм.

В работе представлены результаты изучения фотохимических процессов, протекающих при УФ фотовозбуждении летучих соединений $W(CO)_6$ и $Ti(OC_3H_7)_4$ и их комплексов с кислородом, а также результаты двухлазерных экспериментов (метод абляции и метод фотодиссоциации летучих веществ в сочетании с фотоионизацией продуктов), полученные с помощью времяпролетной масс-спектрометрии. На рис. 1 в качестве примера приведены масс-спектры фотофрагментов, образующихся при возбуждении молекул $W(CO)_6$, и указывающие на образование атомов вольфрама и его оксида.

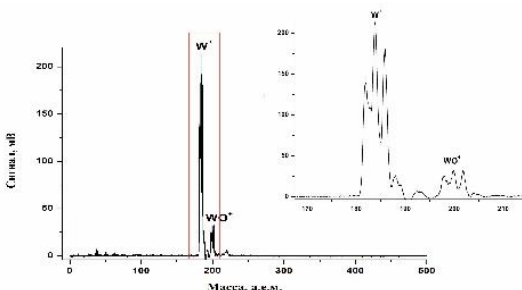


Рис. 1. Масс-спектр фотофрагментов гексакарбонила вольфрама. На вставке показан увеличенный фрагмент спектра, содержащий пики иона вольфрама и его оксида

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

Исследование полевой зависимости ядерной спиновой релаксации в ультраслабых магнитных полях методом ЯМР

Жуков И. В.

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

Зависимость времен ядерной релаксации от магнитного поля называется дисперсией. Известно, что если разность зеемановых частот ядерных спинов меньше, чем взаимодействие спинов, формируются сильно-связанные спиновые состояния, которые приходят к равновесию с общим временем релаксации [1]. Цель работы состояла в исследовании влияния гетероядер (ядер фосфора и протонов) на дисперсию для малых молекул, движение которых предполагается быстрым.

В работе впервые исследовалась полевая зависимость дисперсии ядерной релаксации спинов ^{13}P и ^1H методом ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением поля в уникально широком диапазоне от 5 нТл до 9.4 Тл. Эксперименты проводились на ЯМР спектрометре 400 МГц, с помощью механической системы для быстрого позиционирования ампулы с образцом. Измерения релаксации проводились как в остаточном поле криомагнита, перемещая образец вдоль его оси, так и при использовании системы магнитных катушек внутри магнитного экрана, расположенного над криомагнитом, с помощью которых создавали поле от 5 нТл до 2.5 мТл. Для аденозинмонофосфата в D_2O были получены данные о зависимости релаксации от магнитного поля для 9 скалярно-связанных спинов – двух протонов пуринового основания, шести протонов рибозы и атома фосфора в фосфатной группе. Обнаружено, что в магнитных полях ниже 3 мкТл время T_1 фосфора резко спадает с 20 секунд до 1с, что обусловлено сильной связью фосфора с протонами H5' и H5'' рибозы. Для H1', H3', H4', H2, H8 в полях ниже 10 нТл наблюдаются отклонения от моноэкспоненциальной релаксации. Было проведено моделирование полевой зависимости релаксации в рамках теории Редфилда для разного числа взаимодействующих спинов. В качестве параметров расчета были использованы данные спектров ЯМР и времена релаксации в сильном поле. Результаты расчетов для 10 связанных спинов хорошо согласуются данными экспериментов.

1. A. Kiryutin et al. High-resolution study of nuclear magnetic relaxation dispersion of purine nucleotides: Effects of spin– spin coupling // Solid State Nucl. Mag. Res. 2008. Vol. 34. P. 142–149.

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

Исследование везикул DMPC методом комбинационного рассеяния света

Зайцева Ю. В.

Новосибирский государственный университет

Везикулами называются замкнутые слоистые структуры фосфолипидов, с характерным размером несколько микрометров. Интерес к везикулярным структурам объясняется возможностью применять их для транспорта лекарственных веществ (Тараховский Ю. С. Интеллектуальные липидные наноконтейнеры в адресной доставке лекарственных веществ. М. : Издательство ЛКИ, 2011. 280 с.). Важным свойством фосфолипидов является фазовый переход из упорядоченной гелевой фазы в разупорядоченную жидкокристаллическую (гель-флюид) при повышении температуры. Одним из методов, применяемых для характеристики фазовых переходов, является комбинационное рассеяние света (КРС).

Данная работа посвящена исследованию водных растворов везикул насыщенного фосфолипида DMPC ($C_{36}H_{72}NO_8P$) методом КРС. Были экспериментально получены спектры КРС DMPC в температурном диапазоне от $-190^{\circ}C$ до $50^{\circ}C$. Из анализа этих спектров построены температурные зависимости интенсивностей пиков, соответствующих модам симметричных и антисимметричных С-Н колебаний (на частотах 2850 см^{-1} и 2880 см^{-1}) и растягивающих С-С колебаний (на частоте $\sim 1130\text{ см}^{-1}$). Полученные температурные зависимости позволяют охарактеризовать фазовый переход гель-флюид. Резкое изменение интенсивностей мод С-С и С-Н колебаний при температуре фазового перехода свидетельствует об изменении конформации углеводородных хвостов везикул.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Высокоразрешающая спектроскопия газов и конденсированных сред» при поддержке гранта РФФИ №16-03-00664.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН Суровцев Н. В.

**Квантовохимические расчеты параметров спин-гамильтониана
бидерного комплекса марганца (II) с нитронил-
нитроксильными дирадикалами**

Кадиленко Е. М.

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

Дизайн новых молекулярных магнетиков является очень важной задачей в связи с перспективой их применения в микроэлектронике и спинтронике. В последнее время в области молекулярного магнетизма стали использоваться расчетные методы квантовой химии. С одной стороны, исходя из расчетных параметров спин-гамильтониана, можно корректно выбрать модель и объяснить экспериментальные данные. В свою очередь, на основе анализа зависимости расчетных параметров от химической структуры гипотетических соединений, можно предложить наиболее перспективные блоки молекулярных магнетиков.

Основная задача данной работы – изучение электронной структуры и расчет параметров спин-гамильтониана, описывающего магнитные свойства бидерного комплекса $[\text{Mn}_2(\text{CF}_3\text{CO}_2)_2(\text{hfac})_2(\text{DR})_2]$ с нитронил-нитроксильными дирадикалами (рис. 1, DR).

В рамках поставленной задачи были проведены расчеты g- и D- тензоров парамагнитных центров, рассчитаны параметры обменных взаимодействий между парамагнитными центрами комплекса, а также оценены межмолекулярные обменные взаимодействия. Для расчета использованы как неограниченный по спину метод нарушенной симметрии в варианте теории функционала плотности, так и многоконфигурационные расчеты (CASSCF/NEVPT2). Проведено моделирование температурной зависимости магнитной восприимчивости поликристаллических образцов, удовлетворительно согласующееся с экспериментом.

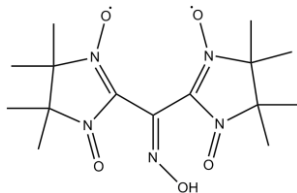


Рис. 1. Химическая структура дирадикала (DR).

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

Исследование ассоциатов в растворе ТВА методом МД

Кадцын Е. Д.

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского

СО РАН, г. Новосибирск

Новосибирский государственный университет

Водные растворы трет-бутанола (ТВА) интересны тем, что многие термодинамические и спектроскопические характеристики этих растворов имеют экстремумы в зависимости от концентрации, в частности при 2-5% (мольных) ТВА. Считается, что уже при этих малых концентрациях начинается процесс ассоциации за счет гидрофобных взаимодействий между молекулами ТВА, и на молекулярном уровне раствор становится неомогенным, при увеличении концентрации возникает «микрорасслаивание» – возникновение областей с разным составом. Однако на сегодняшний день нет количественной картины данных процессов.

С помощью пакета молекулярно-динамического моделирования Gromacs, нами были получены полноатомные модели водных растворов ТВА при разных концентрациях (0.5-10%). Для сравнения были также получены водные растворы триметиламинооксида (ТМАО), молекула которого похожа на молекулу ТВА, и модель случайно расположенных шаров.

Проведен расчет функций радиального распределения (ФРП) между центрами растворенных молекул. Наличие для ТВА высокого первого пика, уже при самых малых концентрациях, указывает на тенденцию к ассоциации между молекулами ТВА. При концентрациях выше 3% происходит изменение второго и третьего пиков фрп, что говорит о том, что возникают более крупные ассоциаты из молекул ТВА.

Используя методы кластерного анализа, проведен количественный анализ кластеров из молекул ТВА в растворах при разной концентрации. Рассчитано распределение кластеров по размерам, найден средний размер кластера, изучена компактность кластеров, времена жизни кластеров и времена жизни молекул в кластерах. Было показано большое разнообразие возникающих кластеров. Сравнение с растворами ТМАО и системой случайных шаров показывает, что количество и размер кластеров в растворе ТВА существенно больше, чем в остальных системах. Используя проведенный анализ, были оценены константы ассоциации для трет-бутанола в воде, проведена оценка энтальпийного и энтропийного вкладов в свободную энергию ассоциации.

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

Новые методы селективной регистрации мультиплетной ядерной спиновой гиперполяризации

Козиненко В. П.

Международный Томографический Центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метод ИППЯ (индуцированная пара-водородом поляризация ядер) разработан для повышения чувствительности ЯМР, например, в ЯМР приложениях для изучения процессов каталитического гидрирования. Усиление сигнала в методе ИППЯ происходит за счет неравновесной заселенности ядерных спиновых состояний в молекуле пара-водорода. Получаемое усиление сигнала достигает 10^2 – 10^5 раз, что значительно расширяет область применения ЯМР спектроскопии в химии и медицине. Полученные с помощью ИППЯ сигналы гораздо интенсивнее термических, однако имеют анти-фазный характер. При низком спектральном разрешении, например, в ЯМР-томографии, анти-фазные линии компенсируют друг друга, что ведет к снижению чувствительности. Для повышения контраста также необходимо исключить из спектра ИППЯ сигналы от термически поляризованных ядер (растворителей, воды и т. д.).

Для селективной регистрации сигналов поляризованных ядер используются специальные импульсные последовательности: OPSY (Only Parahydrogen Spectroscopy) [1] подавляет термический сигнал и оставляет в спектре только анти-фазные линии, а последовательность на основе эха «вне фазы» [2] подавляет термический сигнал и переводит мультиплетную поляризацию ядер в интегральную поляризацию. Однако применение данных последовательностей не позволяет получить спектр полностью свободный от искажений и нежелательных сигналов.

Целью данной работы является разработка надежного фильтра для регистрации только мультиплетной ядерной спиновой гиперполяризации. Для решения поставленной задачи будут модифицированы последовательности OPSY и эха «вне фазы». Разрабатываемый фильтр позволит за минимальное время (1) эффективно конвертировать «анти-фазный» спектр ИППЯ в спектр «в фазе» (2), а также полностью подавлять сигнал от термически поляризованных ядер (3).

Предлагаемый метод регистрации ИППЯ может быть использован при исследовании каталитического гидрирования методом ЯМР, а также для повышения контрастности МРТ.

Финансовая поддержка: РФФИ (грант 16-33-00679).

-
1. Aguilar J. A. et. al., Chem. Commun., 2007, p. 1183–1185.
 2. Правдивцев А. Н. и др., Докл. АН, 2015, том 465, № 1. С. 1–4.

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

Спектроскопия ЯМР ^1H метаболитов тканей и биожидкостей живых систем в норме и патологии

Крестина М. С.

Новосибирский государственный университет

Спектроскопия ЯМР, как один из основных методов метабономики, позволяет изучать метаболический отклик организма на патофизиологическое воздействие или генетическую модификацию. Поскольку заболевания и их лечение связаны с изменениями в обмене веществ, измерение концентраций метаболитов с помощью спектроскопии ЯМР может быть перспективным методом для выявления и оценки изучаемых процессов. Цель данной работы – исследование метаболических изменений в ряде тканей и крови в двух экспериментальных моделях.

В качестве первой экспериментальной модели использовано 28-и дневное воздействие этанола (10-12 г/кг в сутки) на крыс линии Спрег-Доули. Крысы были разделены на 2 группы: контроль и опыт. В конце эксперимента для спектроскопии ЯМР были взяты образцы ткани и кровь. Дополнительно кровь была взята на 14 день эксперимента. Результаты выявили отличия между группами по 18 метаболитам печени, 9 метаболитам мозга и 12 метаболитам крови. Сравнение данных по крови между группами на 2-й и 4-й неделе (отличия по 6-и и 12-и метаболитам соответственно) позволили сделать вывод о более сильном воздействии этанола с течением времени. Сопоставление метаболических профилей печени и крови позволило установить четыре однонаправленно изменяющихся метаболита: аланин, валин, изолейцин, креатин. Во всех случаях сравнение проведено с помощью Т-теста Стьюдента.

В качестве второй модели выбрана модель опухоли головного мозга. При этом исследованы как животные – иммунодефицитные мыши линии SCID, которым была привита культура клеток человеческой глиобластомы U87, так и сама культура клеток. Метаболизм животных изучен прижизненно, он демонстрирует возросший уровень лактата в области опухоли в сравнении с контролем. Культура клеток изучена *ex vivo*. В условии питательной изоляции с постепенным отмиранием клеток удалось обнаружить динамическое увеличение уровня детектируемых с помощью спектроскопии ЯМР аминокислот (аланин, лейцин, изолейцин и др.).

Выполненные в ходе работы эксперименты позволяют сделать вывод о перспективности использования метода спектроскопии ЯМР ^1H для определения патологического состояния ряда тканей и крови.

Научные руководители – д-р. хим. наук, проф. Коптюг И. В.,
канд. биол. наук Акулов А. Е.

Исследование фуллеренов РСВМ и С₆₀ как спиновых зондов на гетерогенности в ионных жидкостях методом ЭПР с временным разрешением

Курганский И. В.

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

Ионные жидкости (ИЖ) получают всё большее приложение благодаря их специфическим свойствам. Они используются, например, в так называемой «зелёной химии», а также как новые растворители или электролиты. Производная фуллерена РСВМ является акцептором электронов и поэтому нашла применение в производстве полимерных солнечных батарей и гибкой электроники.

Целью работы является исследование особенностей формирования спиновой поляризации молекул РСВМ и С₆₀ в различных ионных жидкостях и толуоле. Исследования проводились при помощи ЭПР спектрометра с временным разрешением, работающего в X-диапазоне.

В ходе экспериментов получены ВР ЭПР спектры РСВМ при температурах от 90 К до 295 К в ионной жидкости [C₁₀mim]BF₄. Для данной системы исследована температурная зависимость формы ЭПР спектра и времени спиновой релаксации в диапазоне 90 – 300 К. Также были исследованы особенности формирования спиновой поляризации РСВМ и С₆₀ в ионных жидкостях [C₁₀mim]BF₄, [bmmim]PF₆, [bmim]BF₄, проведено сравнение спиновой динамики фуллереновых комплексов в толуоле, при 100 К. Замечено, что форма спектра существенно изменяется при смене растворителя, что свидетельствует о влиянии окружения триплетной молекулы на формирование спиновой поляризации. Помимо ЭПР спектров были исследованы кинетики спиновой релаксации. Обнаружен биэкспоненциальный характер кинетики во всех исследованных системах. Определена зависимость доли фракции с большим временем спин-решёточной релаксации от температуры и растворителя для исследованных фуллеренов.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Федин М. В., Иванов М. Ю.

Фотохромизм диарилэтенов в растворах и полимерных матрицах

Лазарева С. К.

Новосибирский государственный университет

Флуоресцирующие фотохромные материалы представляют большой интерес для применения в органической фотонике в таких областях, как оптические логические системы, системы записи оптической информации, а также для характеристики органических молекул и полимеров.

В данной работе изучались как фотохромные, так и флуоресцентные свойства нескольких диарилэтиенов (см. рис. 1).

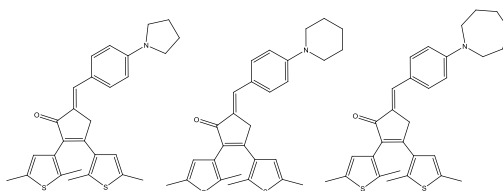


Рис. 1. Диарилэтиены, замещенные производными диметиланилина, изучаемые в данной работе

Спектральные и фотохромные параметры были измерены в четырех растворителях с различной полярностью при комнатной температуре. Квантовые выходы фотохромного превращения $A \leftrightarrow B$ (рис.2) и коэффициент экстинкции закрытой формы были определены с помощью кинетического метода.

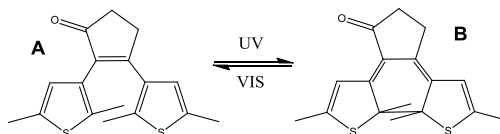


Рис. 2. Типичная реакция фотохромного превращения диарилэтиенов

Было обнаружено, что квантовый выход реакции фотоциклизации для всех соединений уменьшается с увеличением полярности растворителя. Кроме того, полярность растворителя оказывает значительное влияние на флуоресценцию. Увеличение значения диэлектрической проницаемости привело к сильному сдвигу полосы эмиссии с 450 нм (н-гексан) до 550 нм (ДМСО) для всех трех соединений. Интенсивность флуоресценции становилась слабой и практически ненаблюдаемой в н-гексане.

Работа поддержана РФФИ, грант № 16-33-6010515 мол_а-дк.

Научный руководитель – канд. хим. наук Смоленцев А. Б.

Исследование взаимодействия лития с однослойными углеродными нанотрубками методами рентгеновской спектроскопии

Лаптева Л. Л.

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

Изучение взаимодействия лития с углеродными нанотрубками является актуальной задачей, так как их использование в литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах может улучшить их электрохимические характеристики. Кроме того, легирование углеродных нанотрубок щелочными металлами делает их способными к хранению водорода. Важной задачей в этих областях является определение особенностей электронных взаимодействий между углеродом и литием.

Данная работа посвящена рентгеноспектральному исследованию электронного взаимодействия атомов лития с однослойными углеродными нанотрубками (SWCNT – Single-Walled Carbon Nanotubes).

Литирование SWCNT осуществлялось с помощью высоковакуумного термического напыления лития на поверхность образца. Рентгеноэлектронные и NEXAFS (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) спектры исходных и литированных SWCNT были сняты на Российско-Германском канале Берлинского центра синхротронного излучения (BESSYII). Литирование SWCNT приводит к сдвигу C 1s-линии в сторону больших энергий. NEXAFS исследование литированных SWCNT выявило понижение относительной интенсивности π^* -резонанса в спектре C K-края по сравнению со спектром исходных нанотрубок. Интерпретация экспериментальных фотоэлектронных спектров валентной зоны чистых и литированных SWCNT осуществлялась с помощью квантово-химических расчетов в рамках кластерной модели методом теории функционала плотности (функционал B3LYP). Также были определены структурные характеристики исходных SWCNT по спектрам комбинационного рассеяния света. В результате было установлено, что взаимодействие паров лития с SWCNT приводит к переносу электронной плотности с атомов лития на атомы углерода и к изменению электронного строения системы.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Федосеева Ю. В.

Компрессионная и температурная динамика структуры комплекса меди с нитроксильным радикалом

Летягин Г. А.

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

Важнейшей характеристикой твердых фаз всех соединений, содержащих парамагнитные центры, и особенно для молекулярных магнетиков, являются данные по температурной зависимости их магнитных свойств. Аномалии их поведения связаны со структурными перестройками и могут быть надежно интерпретированы только при наличии данных рентгеноструктурного анализа по температурной динамике структуры. Первые результаты по зависимости магнитных свойств молекулярных магнетиков от внешнего давления показали их высокую чувствительность к его изменению [1, 2]. Но данные по *компрессионной динамике структуры* для таких соединений в литературе практически отсутствуют.

Изучение трансформации структуры комплекса гексафторацетилацетоната меди(II) $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ со стабильным нитроксильным радикалом (L^{AlI}) $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{AlI}}]_{\infty}$ в диапазоне давления от 10^{-4} ГПа до 1 ГПа показало принципиальное различие температурной [3] и компрессионной динамики его структуры.

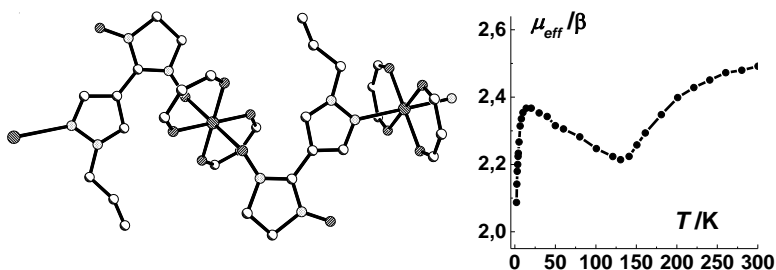


Рис. 1. Структура и магнитные свойства $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{AlI}}]_{\infty}$ при 10^{-4} ГПа

1. Maryunina K. et al. // J. Materials Chem. C., 2015, 3. С. 7788-7791.
2. Artiukhova N. et al. // J. Materials Chem. C., 2016, 4. С. 11157-11163.
3. Марюнина К. Ю. и др. // Изв. АН. Сер. хим., 2013. С. 2337–2345.

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

Автоматизация сравнительного метаболомного анализа

Мельников А. Д.

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

Метаболомика – постоянно растущая экспериментальная область для изучения патогенеза различных болезней, основанная на анализе низкомолекулярных соединений – метаболитов. Выделяют два основных подхода: прицельный подход и метаболомное профилирование. Прицельный подход сфокусирован на изучение малой группы известных специфичных метаболитов, которые обычно имеют схожие функции или вовлечены в один и тот же процесс. Профилирование же подразумевает под собой анализ максимально большого количества метаболитов. В результате охватывается почти полная метаболомная система. Однако профилирование влечет за собой и трудности, связанные с корректной обработкой полученной информации и правильным выявлением зависимостей между изучаемыми образцами.

Целью данной работы являлось создание метода, позволяющего сравнивать метаболомный состав двух прилегающих тканей. В качестве образцов использовались ткани глаза человека: водянистая влага и хрусталик. Исследование низкомолекулярной фракции тканей глаза проведено с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс спектроскопическим детектированием (ВЭЖХ-МС). В результате каждого ВЭЖХ-МС эксперимента получали трехмерный массив данных: по одной оси откладывалось время удерживания на хроматографической колонке, по другой отношение массы к заряду, по третьей интенсивность сигнала. Благодаря высокой чувствительности масс-спектрометра в данной работе обнаружено порядка нескольких тысяч ВЭЖХ-МС сигналов.

С использованием программного обеспечения с открытым кодом *R software* разработан метод обработки данных, позволяющий сравнивать метаболомный состав двух тканей. С помощью разработанного метода проведено полуколичественное сравнение концентраций большого числа метаболитов в обеих тканях и показана применимость профилирования при изучении метаболомного состава различных тканей. При сравнительном метаболомном анализе водянистой влаги и хрусталика обнаружены различия в концентрациях для некоторых классов метаболитов.

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

Изучение химической и тепловой структуры предварительно перемешанных пламен метилгексаноата и этилпентаноата

Осипова К. Н.

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

Сложные метиловые и этиловые эфиры жирных кислот входят в состав биодизеля. Истощение запасов нефти делает исследования таких топлив особенно актуальными. Биодизельные топлива могут быть использованы как индивидуально, так и в составе смесей с традиционным дизельным топливом. Такой подход позволяет уменьшить выбросы вредных химических соединений, таких как углекислый газ, окиси азота, сажа и др.

Основная задача состоит в изучении химической и тепловой структуры пламен эфиров, являющихся изомерами – метилгексаноата ($C_7H_{14}O_2$, МНе) и этилпентаноата ($C_7H_{14}O_2$, ЕРе) экспериментально и при помощи численного моделирования.

В работе изучалась структура следующих пламен предварительно перемешанных газообразных смесей стехиометрического состава: МНе/ O_2 /Ar и ЕРе/ O_2 /Ar. Пламена стабилизировались на плоской горелке при атмосферном давлении. Химическая структура пламени исследовалась методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Профили температуры измерялись с помощью микротермопар.

В ходе работы измерены профили концентраций реагентов (топлива и кислорода), основных продуктов горения (H_2O , CO_2 , CO , H_2), а также промежуточных соединений (CH_3 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , CH_2O и др.). Моделирование структуры пламен проводилось с помощью программы PREMIX из пакета CHEMKIN-II с использованием двух детальных химико-кинетических механизмов окисления эфиров: Dayma G. et al (Energy Fuel. 26 (2012) 6669) и Korobeinichev O. P. et al (Zeitschrift fur Physikalische Chemie. 229 (2015) 759). Экспериментальные данные сопоставлены с данными численного моделирования структуры пламени.

Установлено, что моделирование с удовлетворительной точностью описывает экспериментально измеренные профили основных стабильных соединений в пламенах. Анализ результатов численного моделирования структуры изученных пламен позволил провести анализ первичных путей превращения МНе и ЕРе в пламени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ по гранту №15-08-05553

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

Изучение химии горения тройных топливных смесей $\text{H}_2/\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8$ и $\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8/\text{C}_4\text{H}_{10}$

Осипова К. Н.

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

Использование природного газа в качестве топлива в электро- и теплоэнергетике, а также для транспорта значительно сокращает выбросы вредных веществ. Природный газ состоит в основном из метана, этана, пропана, бутана и других углеводородов и его состав существенно зависит от месторождения. Добавление H_2 к углеводородам позволяет управлять их горением. Поэтому горение многокомпонентных топливных смесей требует детального исследования.

Целью работы является изучение особенностей взаимного влияния процессов окисления компонентов тройной топливной смеси.

Изучены стехиометрические пламена двух горючих смесей: $\text{H}_2/\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2/\text{Ar}$ и $\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8/n\text{-C}_4\text{H}_{10}/\text{O}_2/\text{Ar}$. Пламена стабилизировались на плоской горелке при давлении 1 атм. Химическая и тепловая структура пламен изучалась методами зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии и микротермопар. Структура пламени рассчитывалась по механизму AramcoMech 2.0. Установлено, что данные эксперимента и моделирования согласуются удовлетворительно.

Хотя температура в зоне конечных продуктов горения в обоих пламенах отличается менее чем на 60К, ширина зоны пламени, содержащего H_2 , оказывается значительно больше. Атомы Н взаимодействуют с формальдегидом, метаном и пропаном ($\text{CH}_2\text{O}+\text{H}=\text{HCO}+\text{H}_2$, $\text{CH}_4+\text{H}=\text{CH}_3+\text{H}_2$, $\text{C}_3\text{H}_8+\text{H}=\text{H}_2+n\text{-C}_3\text{H}_7$, $\text{C}_3\text{H}_8+\text{H}=\text{H}_2+i\text{-C}_3\text{H}_7$) с образованием H_2 . То есть наличие углеводородов в пламени приводит к образованию из них H_2 , что увеличивает ширину зоны его расходования.

Горение топлива в двигателях происходит при давлениях выше 1 атм. На примере смеси $\text{H}_2/\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2/\text{Ar}$ ($\phi=1$) изучалось влияние давления. Так, при повышении давления от 1 до 3-5 атм ширина зоны пламени уменьшается в 4 раза. Моделирование проводилось по 4-м механизмам: AramcoMech1.3, AramcoMech2.0, Marinov и USCII. В случае реагентов (топлива и кислород), а также основных продуктов горения все модели достаточно точно описывают экспериментальные данные. Однако между собой использованные механизмы дают существенные различия для максимума мольной доли большинства интермедиатов.

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

**Конверсия спиновой намагниченности в долгоживущие спиновые состояния в многоспиновых системах.
Теоретический анализ спиновой динамики**

Родин Б. А.

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

Долгоживущие спиновые состояния – важная и относительно новая концепция в ядерном магнитном резонансе. Такие состояния находят применение в спиновой гиперполяризации, при изучении диффузии методами ЯМР, при исследовании медленных молекулярных движений и т. д. В настоящее время хорошо известны долгоживущие синглетные состояния в системах, где основным механизмом релаксации является дипольная релаксация, не способная вызывать синглет-триплетные переходы. Одним из методов генерации таких состояний может быть адиабатическое переключение радиочастотного поля.

Потенциально долгоживущие состояния не ограничиваются синглетным состоянием пары спинов. В связи с этим интерес представляют, например, синглет-синглетные состояния двух пар спинов, а также сравнительный анализ возможных долгоживущих состояний: их времена релаксации, зависимость данных времен жизни от молекулярного окружения.

В данной работе были предложены методы получения синглетных спиновых состояний для 4-спиновой системы типа $AA'XX'$. Были построены корреляционные диаграммы, а также определены условия отстройки радиочастотного поля от центра спектра, при котором состояние населенность T_+T_+ переходит в синглет-синглетное состояние под действием адиабатического переключения амплитуды радиочастотного поля. Также была определена максимальная возможная поляризация после последовательности включения-выключения радиочастотного поля для системы $AA'XX'$. Было проведено численное моделирование эффективности конверсии спиновой намагниченности в населенность синглет-синглетного состояния при линейной развертке поля при варьировании отстройки частоты поля от центра спектра, амплитуды поля и времени переключения. Также было предложено использовать так называемый метод GRAPE для вычисления оптимального профиля переключения (изменение поля B_1 медленно вблизи антипересечений спиновых уровней). Были предприняты попытки анализа пятиспиновых систем.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Иванов К. Л.,
канд. хим. наук Кирютин А. С.

Развитие метода МРТ для визуализации гиперполяризованных газов, полученных с использованием параводорода

Романов А. С.

Новосибирский государственный университет
Международный Томографический Центр СО РАН, г. Новосибирск

Индукцированная параводородом поляризация ядер (ИППЯ) – это один из перспективных методов усиления сигнала ЯМР, который находит применение в приложениях МРТ для катализа, медицины и др. В то же время, широкое использование гиперполяризованных методом ИППЯ газов ограничено их короткими временами релаксации (0,6 с для пропана в поле 7.4 Тл). Следовательно, исследование возможности сохранения поляризации на длительный промежуток времени представляет собой большой научный и практический интерес. В данной работе была продемонстрирована возможность увеличения времени жизни гиперполяризованного газа (пропан) с помощью растворения в дейтерированных органических растворителях (ацетон, метанол). Было обнаружено, что случае растворенного газа время релаксации увеличивается до 50 раз, так как в случае жидкой фазы преобладает диполь-дипольный механизм релаксации, в то время как в газе основным механизмом является спин-вращательная релаксация [1].

Измеренное время жизни гиперполяризации пропана (T_{HP}) составило 35 секунд, при этом времена T_1 пропана в ацетоне оказались равными 38,7 и 33,3 секунд для CH_2 и CH_3 групп соответственно. Стоит отметить, что T_{HP} сильно зависит от концентрации O_2 , который, будучи парамагнитным, значительно укорачивает время жизни гиперполяризации.

Также были получены МРТ изображения в плоскостях XY и XZ для 10 мм ЯМР ампулы с гиперполяризованным пропаном, растворенным в дейтерированном ацетоне. Время эксперимента составило 1,7 с, использовалась импульсная последовательность FLASH, TE – 14,8 мс.

В ходе проведенных исследований ключевым результатом является то, что гиперполяризованный газ удалось извлечь из растворителя обратно в газовую фазу с сохранением гиперполяризации для времен, значительно превышающих время релаксации пропана в газовой фазе. Таким образом, были получены 1H ЯМР спектры поляризованного пропана в газовой фазе извлеченного из растворителя через 4-5 секунд после растворения.

1. Burueva D. B. et al. Extending the Lifetime of Hyperpolarized Propane Gas through Reversible Dissolution // J. Phys. Chem. C. 2017. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00509.

**Исследование процесса образования синглетного кислорода $O_2(^1\Delta_g)$
при фотовозбуждении контактных комплексов
 TiO_2-O_2 , WO_3-O_2 и $C_{20}H_{28}O-O_2$**

Святова А. И.

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

В недавних исследованиях [1, 2] обнаружено, что молекулярное окружение сильно влияет на фотофизику молекулярного кислорода O_2 , например, появляются новые полосы поглощения, а также возникают новые каналы образования активных частиц, в числе которых синглетный кислород $O_2(^1\Delta_g)$. Такие условия реализуются в слабосвязанных комплексах $X-O_2$ (X – молекула партнер), образующихся при столкновении молекул в газовой фазе и при взаимодействии кислорода с молекулами растворителя в жидкости (контактные комплексы).

Синглетный кислород играет ключевую роль во многих природных фотопроцессах, т.к. обладает высокой реакционной способностью. Области применения синглетного кислорода расширяются, поэтому процесс его генерации из слабосвязанных комплексов $X-O_2$ представляет большой интерес. В предыдущих исследованиях в газовой фазе [1] и в молекулярных пучках [2] предположено, что образование $O_2(^1\Delta_g)$ из комплексов может происходить в любой среде, содержащей кислород.

Настоящая работа посвящена контактным комплексам. Целью является исследование влияния окружения на фотопроцессы O_2 в жидкости, в том числе с генерацией $O_2(^1\Delta_g)$. В качестве молекул окружения были выбраны: TiO_2 , WO_3 и $C_{20}H_{28}O$ (полностью-транс-ретиаль), т.к. они представляют интерес для задач фотокатализа и фотобиологии соответственно.

В работе был исследован процесс фотовозбуждения растворов и коллоидов. Получены их спектры поглощения в отсутствие и при насыщении кислородом; зарегистрированы сигналы люминесценции при фотовозбуждении выбранных растворов и коллоидов; получены спектры ИК-люминесценции, которые указывают на наличие $O_2(^1\Delta_g)$.

1. Pyryaeva A. P. et. al. UV-photoexcitation of encounter complexes of oxygen O_2 as a source of singlet oxygen $O_2(^1\Delta_g)$ in gas phase. J. Chem. Phys. Lett., 2010, 485, 11–15.

2. Baklanov A. V. et. al. Cluster-enhanced $X-O_2$ photochemistry ($X = CH_3I, C_3H_6, C_6H_{12}$, and Xe). J. Chem. Phys., 2007, 126, 124316.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Пыряева А. П.

Изучение рибосомных комплексов методами спиновых меток и дипольной ЭПР спектроскопии

Тимофеев И. О.

Международный Томографический Центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Дипольная ЭПР спектроскопия широко применяется для структурных исследований биологически важных систем, в тех случаях, когда невозможно установить структуру стандартным методом рентгеновской кристаллографии. Примером такой системы являются рибосомные комплексы, отвечающие за биосинтез белков из аминокислот на основе генетической информации, предоставляемой матричной РНК (мРНК). Считывания информации с мРНК происходит при помощи транспортных РНК молекул (тРНК), доставляющих аминокислоты к месту синтеза белка на рибосоме.

Недавно было показано [1], что с помощью ЭПР метода PELDOR/DEER (от англ. Pulse ELection DOuble Resonance/Double Electron Electron Resonance) можно извлекать информацию о структуре подобных комплексов. В данной работе исследовались дважды спин-меченые мРНК UGUGUUCGACA (матрица I) и UGUGUUCUAAA (матрица II) в комплексах с 80S рибосомами, различными тРНК и белком, участвующим в терминации. Было обнаружено, что комплексообразование значительно влияет на получаемые функции распределения по расстояниям.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-3214.2017.3

1. Alexey A. Malygin et al. 2015. Doubly Spin-Labeled RNA as an EPR Reporter for Studying Multicomponent Supramolecular Assemblies. Biophys. J. 109:2637–2643.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Крумкачева О. А.,
Кужелев А. А.

Определение свободной удельной поверхностной энергии наночастиц хлорида цезия

Трубачев С. А.

Новосибирский государственный университет

В последнее время активно изучаются свойства наночастиц. Важной величиной, характеризующей свойства наночастиц, является удельная поверхностная энергия или поверхностное натяжение γ . Прямое измерение γ наночастиц в настоящее время является невозможным, однако можно воспользоваться данными исследования процесса гомогенной нуклеации пересыщенного пара (скорость нуклеации, температура и пересыщение) и определить значение γ критических зародышей, используя строгую аналитическую формулу скорости нуклеации [1]. Известно, что [1] значение γ наночастиц может значительно отличаться от их поверхностного натяжения плоской поверхности γ_∞ . Экспериментально обнаружено, что для простых веществ металлов это различие может достигать 30-100%, для простых веществ неметаллов оно не превышает 5%. Из чего было выдвинуто предположение, что отношение γ/γ_∞ зависит от типа химической связи в молекуле. Поэтому, целью данной работы являлось исследование процесса образования наночастиц хлорида цезия из пара (обладает ионным типом связи) и определение их удельной поверхностной энергии.

Для достижения поставленной цели были экспериментально исследованы основные процессы, протекающие при гомогенной нуклеации пара CsCl в проточной камере: осаждение пара на стенки нуклеационной камеры, гомогенная нуклеация пара, конденсационный рост частиц, коагуляция.

В результате были определены значения средней скорости нуклеации $J = 10^{11} \text{ см}^{-3} \text{ сек}^{-1}$, среднего пересыщения $S = 1,6 \cdot 10^8$ и средней температуры $T = 918 \text{ К}$ в зоне нуклеации, что позволило определить поверхностное натяжение $\gamma = 143 \text{ дин/см}$ критических зародышей с радиусом $R_s = 3,9 \text{ А}$. Отношение γ/γ_∞ составило величину 1,25.

1. Experimental study of homogeneous nucleation from the bismuth supersaturated vapor. S. V. Vosel, *et al* // J. Chem. Phys. 136, 224506 (2012)

Научный руководитель – канд. хим. наук Валиулин С. В.

**Изучение эффектов фотопереключения медь-нитроксильных
молекулярных магнетиков вида $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{LR}$
методом ЭПР спектроскопии**

Туманов С. В.

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

Полимерные молекулярные магнетики $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^R]_\infty$, где hfac – гексафторацетилацетонат, L – пиразолил-замещенный нитроксильный радикал, претерпевают термо- и фотоиндуцируемые фазовые переходы, которым сопутствует существенное изменение магнитного момента. При данных переходах также значительно изменяется объем элементарной ячейки кристалла, из-за чего данные соединения называют «дышащими кристаллами». В последние годы возрос интерес к исследованию данных молекулярных систем, обусловленный демонстрируемыми ими эффектами переключения спинового состояния под действием внешних факторов. Фотоиндуцированные магнито-структурные переходы в дышащих кристаллах $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^R]_\infty$ были открыты в 2008 году и изучались в комплексах с мотивом цепи голова-голова, содержащих трехспиновые обменные кластеры. В 2015 году нами были впервые получены результаты, свидетельствующие о возможности фотопереключения двуспиновых обменных кластеров (мотив голова-хвост). Цель данной работы состояла в исследовании влияния структурных различий двух- и трехспиновых кластеров на магнитные свойства исследуемых соединений.

Важную информацию – как о фундаментальных процессах, лежащих в основе магнитных эффектов в дышащих кристаллах, так и о возможности их потенциального практического использования – можно получить, изучая релаксацию фотоиндуцированного метастабильного состояния. Предыдущие работы показали применимость метода ЭПР для данных исследований. Ранее методом ЭПР уже исследовалась скорость релаксации метастабильного состояния для соединений с трехспиновыми обменными кластерами. Оказалось, трехспиновым соединениям свойственна самозамедляющаяся релаксация с характерным временем порядка нескольких часов. В данной работе исследовались три различных соединения мотива голова-хвост. Были получены зависимости скорости релаксации от температуры. Было показано принципиальное отличие характера релаксации метастабильного состояния двуспиновых систем относительно трехспиновых аналогов.

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

Исследование подвижности углеводов в ZIF-8 методом ЯМР спектроскопии на ядрах дейтерия

Художитков А. Э.

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

В современной химической индустрии одно из центральных мест занимает химическое превращение углеводов. Для разделения различных углеводов, а так же их преобразования нужны материалы, обладающие хорошими сорбционными и каталитическими свойствами.

Одним из классов материалов, который обладает нужными физико-химическими свойствами, являются металл-органические-каркасы. Среди них одним из самых перспективных для практического применения материалом является каркас ZIF-8. Высокая стабильность этого материала позволяет использовать его в широком диапазоне экспериментальных условий. А структура этого материала позволяет использовать его как молекулярное сито, то есть разделять химические соединения, имеющие различное строение. Например, известно, что ZIF-8 способен разделять такие похожие по своему строению вещества, как изомеры ксилола. Причем селективность разделения орто-ксилола к пара-ксилолу достигает 3,9 при 383 К.

Способность этого материала разделять химические соединения из смеси основывается на том, что подвижность молекул этих соединений внутри каркаса различна. Так же может быть различен способ, которым гостевые молекулы взаимодействуют с каркасом. Для того, чтобы узнать, как различные молекулы двигаются в каркасе ZIF-8 мы применили метод ^2H ЯМР.

В качестве гостевых молекул брались 3 изомера ксилола (потому что экспериментально наблюдалась селективность их разделения), толуол, имеющий на одну метильную группу меньше, изобутан, имеющий значительно меньший кинетический диаметр, и бензол. Все гостевые молекулы были дейтерированы, чтобы было возможно применение ^2H ЯМР метода.

С помощью анализа ЯМР спектров при низких температурах и анализу температурной зависимости времен спиновой релаксации ядер дейтерия нам удалось определить модель движения гостевых молекул, а так же энергии активаций и предэкспоненциальные множители каждого движения. Было выяснено, что каждая гостевая молекула может находиться в одном из двух состояний с различной подвижностью, а так же определить их населенности и скорость обмена между этими состояниями.

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

Теоретическое исследование кинетики и механизмов термоллиза новых высокоэнергетических соединений

Шахова М. В.

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

Богатые азотом соединения представляют интерес для использования в составе энергетических материалов, так в процессе их разложения выделяется безвредный для окружающей среды азот. Для определения чувствительности и термической стабильности этих веществ, среди прочего, необходимы данные о кинетике и механизме первичных реакций их разложения. В свою очередь, чтобы рассчитать активационные барьеры и константы скоростей реакций, необходимо знать структуру и свойства реагентов и переходных состояний всех элементарных первичных реакций разложения. Эти величины с высокой точностью можно рассчитать современными квантовохимическими методами.

Основной задачей в этой работе является изучение первичных реакций разложения 3,3'-диамино-4,4'-азофуразана (DAAzF, см. рис. 1). Актуальность исследования обусловлена относительно низкой чувствительностью этого высокоэнергетического соединения, что представляет интерес для прикладных задач.

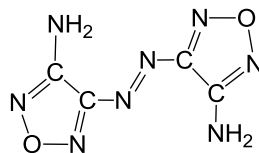


Рис. 1. DAAzF

В рамках поставленной задачи были проведены расчеты структуры и свойств этого соединения, его изомеров и ряда предполагаемых переходных состояний, предложены механизмы реакций распада. Предварительно были проделаны расчеты для более простых соединений со схожей структурой – фуразана и аминифуразана. Было выяснено, что оптимальной стратегией для изучения таких соединений является применение методов DFT для оптимизации геометрии и дальнейшее уточнение электронных энергий квантовохимическим методом CCSD(T)-F12.

Наиболее термодинамически выгодным является транс-изомер, а основным каналом разложения оказалась реакция концертного отрыва цианамиды от одного из циклических фрагментов с барьером лимитирующей стадии ~50 ккал/моль.

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

Моделирование ассоциатов глицирризиновой кислоты внутри липидной мембраны

Шелепова Е. А.

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

Известно, что глицирризиновая кислота (ГК) усиливает действие некоторых лекарственных препаратов. Механизм этого усиления может быть связан с влиянием ГК на проницаемость мембран. Данная работа посвящена изучению влияния ГК на модельные липидные бислои методом молекулярно-динамического моделирования.

Ранее мы исследовали поведение одной молекулы ГК вблизи липидного бислоя. Было показано, что молекула ГК, находящаяся в воде, способна переходить в липидный бислой. Однако существенного влияния одной молекулы ГК на мембрану обнаружено не было. В данной работе мы исследовали модели, в которых четыре молекулы ГК помещались внутрь липидного бислоя. Было показано, что молекулы ГК свободно диффундируют среди липидов бислоя и могут образовывать ассоциаты друг с другом. В случае менее упорядоченного и более подвижного бислоя, состоящего из молекул диолеилфосфатидилхолина (DOPC), ассоциаты ГК возникают счет формирования водородных связей между молекулами ГК. Однако такие ассоциаты неустойчивы и существуют обычно несколько наносекунд. Напротив, в более упорядоченном бислое из молекул дипальмитоилфосфатидилхолина (DPPC) могут возникать устойчивые долгоживущие ассоциаты. Стабилизации этих ассоциатов способствуют как водородные связи, так и имеющаяся упорядоченность липидов. Кроме того, в бислое DPPC наблюдается локальное уменьшение толщины мембраны вблизи ассоциата или группы молекул ГК, вызванное образованием водородных связей между молекулами ГК и головками липидов из обоих липидных слоев. Таким образом, молекулы ГК способны образовывать ассоциаты внутри мембраны, и связывать гидрофильные части противоположных слоев мембраны.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Медведев Н. Н.,
канд. физ.-мат. наук Ким А. В.

Исследование взаимодействия наночастиц золота с нуклеиновыми кислотами

Шторк А. С.

Новосибирский государственный университет

В настоящее время наночастицы золота (ЗНЧ) нашли широкое применение в биомедицинских исследованиях и медицинской практике. Преимуществом ЗНЧ являются их резонансные оптические свойства, способность связываться с белками и нуклеиновыми кислотами, постоянство диаметра, а также коллоидная стабильность. Однако взаимодействие ЗНЧ с нуклеиновыми кислотами изучено недостаточно.

Целью работы является исследование взаимодействия ЗНЧ диаметром 14 нм с 2'-дезоксиаденозин-5'-монофосфатом (pdA).

С помощью метода фотокорреляционной спектроскопии были измерены диаметр и дзета-потенциал растворов ЗНЧ с pdA. Результаты исследований образцов с различными концентрациями pdA показали, что диаметр ЗНЧ незначительно изменяется с ростом концентрации pdA. Достоверно дзета-потенциал определить не удалось за счет значительного увеличения электропроводности раствора при добавлении нуклеотида. Исследование диаметра ЗНЧ в растворе pdA в присутствии соли хлорида натрия (NaCl), вызывающего агрегацию ЗНЧ показало, что в течение первых часов при добавлении pdA возрастает коллоидная стабильность ЗНЧ в растворе.

Метод гель-электрофореза позволяет исследовать взаимодействие ЗНЧ и pdA за счет изменения заряда ЗНЧ при связывании с нуклеотидом и сохранении размера частиц. Результаты гель-электрофореза показали, что количество pdA, провзаимодействовавшего с ЗНЧ, возрастает с увеличением концентрации pdA до избытка $[ЗНЧ]:[pdA]=1:10000$, а затем остается постоянным. Методом УФ-спектрофотометрии было определено количество pdA, связавшегося с ЗНЧ и показано, что, начиная с определенной концентрации, это количество постоянно.

Таким образом, установлено, что: 1) добавление pdA препятствует агрегации ЗНЧ, вызванной хлоридом натрия; 2) количество pdA, связавшегося с ЗНЧ, увеличивается с ростом концентрации pdA; 3) при избытках концентрации pdA более чем 10000 происходит насыщение ЗНЧ нуклеотидом.

Работа поддержана грантом РФФ 16-15-10156.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Ломзов А. А.,
Перфильева О. А.

**Фотохимия смешанных диазидных комплексов Pt(IV),
перспективных для применения в фотодинамической терапии**

Шушаков А. А.

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

Комплексы Pt^{IV} тестируются в качестве пролекарств для противоопухолевой фотодинамической терапии (ФДТ), не требующей присутствия кислорода. Механизм действия основан на фотохимическом получении комплексов Pt^{II}, ингибирующих транскрипцию и репликацию ДНК аналогично цисплатину. Терапевтический эффект комплексов *cis,trans,cis*-[Pt^{IV}(N₃)₂(OH)₂(NH₃)₂] (**1**) и *trans,trans,trans*-[Pt^{IV}(N₃)₂(OH)₂(NH₃)₂] (**2**) не уступает эффекту цисплатина [1].

В работе методами стационарного фотолиза, наносекундного лазерного импульсного фотолиза и сверхбыстрой (временное разрешение ~ 100 фс) кинетической спектроскопии исследовались первичные фотохимические процессы для **1** и **2** в воде. Процесс является многостадийным. На первой стадии происходит замещение одного из азидных лигандов на молекулу воды; фотоакватация является цепной. В экспериментах по лазерному импульсному фотолизу наблюдается образование двух последовательно возникающих интермедиатов Pt^{III}, обеспечивающих протекание цепной реакции. Реакция диспропорционирования промежуточных комплексов Pt^{III} приводит к образованию конечных продуктов – комплексов Pt^{II}, обеспечивающих терапевтическое действие исходных соединений. В экспериментах по сверхбыстрой кинетической спектроскопии наблюдалось образование промежуточного поглощения, скорее всего принадлежащего нижнему электронно-возбужденному состоянию исходного комплекса. За время порядка 100 пс это поглощение трансформируется в спектры интермедиатов Pt^{III}, наблюдаемых в наносекундном временном диапазоне.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 15-13-10012).

1. Bednarski P. J., Mackay F. S., Sadler P. J. *Anti-Cancer Agents Med. Chem.*, 7 (2007) 75.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Глебов Е. М.

Твердотельная ЯМР-спектроскопия для исследования функциональных материалов на основе оксида алюминия

Яковлев И. В.

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

Оксид алюминия Al_2O_3 может существовать в виде нескольких кристаллических модификаций, но единственной термодинамически стабильной модификацией является $\alpha-Al_2O_3$. Именно в этой модификации он встречается в природе в виде минерала корунда. Все остальные модификации (γ , δ , θ , η , χ , κ) являются метастабильными (переходными) и при высоких температурах превращаются в $\alpha-Al_2O_3$. Переходные фазы Al_2O_3 обладают высокой удельной поверхностью, благодаря чему они нашли свое применение в качестве катализаторов и носителей. Повышения температурной стабильности переходных фаз можно добиться с помощью недавно разработанной методики нанесения углеродного покрытия, которое предотвращает спекание частиц при высоких температурах и замедляет образование корунда.

Целью данной работы было исследование влияния углеродного покрытия на стабильность переходных фаз оксида алюминия методом твердотельной ^{27}Al ЯМР спектроскопии при вращении образца под магическим углом.

В ходе работы были получены и проанализированы ^{27}Al ЯМР спектры двух серий образцов Al_2O_3 , прокаленных до различных температур. Первая серия представляла собой ряд образцов, полученных путем прокаливания исходного $\gamma-Al_2O_3$, в случае второй серии образцы получались прокаливанием $\gamma-Al_2O_3$ с нанесенным углеродным покрытием. Количественное определение фазового состава образцов проводилось путем анализа центрального перехода и разложения его на линии, соответствующие 4-, 5- и 6-координированному алюминию, с помощью программы Dmfit. Для определения фазы, полученные ЯМР параметры (изотропный химический сдвиг, константа квадрупольного взаимодействия, соотношение линий) сравнивались с литературными данными.

Было установлено, что углеродное покрытие позволяет предотвращать спекание частиц и стабилизировать переходные фазы алюминия вплоть до очень высоких температур (~ 1400 °C).

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

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 537.635, 612.824, 616.89-008.454

Оценка интенсивности и согласованности локальных изменений метаболизма головного мозга средствами фМРТ у пациентов с депрессией в ходе экспериментального лечения технологией адаптивной («биологической») обратной связи

Безматерных Д. Д.

Институт молекулярной биологии и биофизики, г. Новосибирск
Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Современный уровень развития функциональной магнитно-резонансной томографии (фМРТ) позволяет реализовать немедикаментозную методику лечения аффективных расстройств (депрессий) – адаптивное биоуправление. Пространственное разрешение фМРТ позволяет с точностью до нескольких миллиметров идентифицировать активные участки мозга по повышению потребления кислорода. График изменения интенсивности сигнала региона интереса – конкретной церебральной области – может практически в реальном времени предъявляться испытуемым в виде понятной метафоры, что позволяет им методом проб и ошибок научиться управлять динамикой локальной активности головного мозга. При этом эффективность биоуправления напрямую зависит от точной идентификации регионов мозга, активность которых связана с выраженностью симптомов депрессии.

Цель работы – изучение особенностей функциональной организации мозга у пациентов с депрессией средствами фМРТ. Были сформированы две эквивалентные по половому составу, возрасту и интеллекту группы: 1) условно здоровых испытуемых и 2) лиц с депрессией. Внутри томографа участникам предъявлялись визуальные стимулы для провокации эмоциональных реакций: определение пола людей на фотографиях (с эмоциональной мимикой); классификация изображений на понравившиеся и не понравившиеся; определение эмоций людей на фотографиях (выбор из двух вариантов). Также были получены записи в состоянии покоя. Для определения надежности результатов через 2-4 месяца проводилась повторная регистрация.

Анализ массива полученных фМРТ-изображений позволил определить достоверные различия между группами в а) распределении и интенсивности активации структур мозга в ответ на каждую из задач; б) силе функциональных связей между церебральными регионами; в) сетевой организации (анализ независимых компонент сигнала) в состоянии покоя. Таким образом, результаты исследования позволили выявить картину изменений функциональной организации мозга при депрессии и выбрать мишени для биоуправления.

Научные руководители – д-р биол. наук, акад. РАН Штарк М. Б.
канд. биол. наук, Мельников М. Е.

Изучения влияния токолитических препаратов на функциональные характеристики эритроцитов

Вражкина Л. А.

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

При диагностике патологий беременности существует проблема выявления на ранних стадиях гипоксии плода. Вместе с преждевременными родами данная патология имеет высокие показатели перинатальной заболеваемости и смертности. Нарушение функциональных свойств эритроцитов матери является одним из факторов риска развития гипоксических состояний. Одной из основных характеристик, определяющих скорость кислородного обмена в организме, является анионная проницаемость мембраны эритроцита. Однако, влияние токолитических препаратов, используемых для снижения риска преждевременных родов, на анионную проницаемость эритроцитов не полностью изучена.

Данная работа посвящена исследованию воздействия токолитических препаратов (сульфат магния, гинепрал) и препаратов предназначенных для снижения гипоксических состояний (пентоксифиллин, дипиридамола) на анионный обмен эритроцитов и эластичность мембраны. В качестве образцов бралась венозная кровь в растворе EDTA. Эксперименты проводились на сканирующем проточном цитометре, регистрирующем картины светорассеяния от одиночных клеток в широком угловом диапазоне. Регистрация кинетики лизиса эритроцитов осуществлялась в изотоническом растворе хлорида аммония. Измерения занимали не более 3 часов от забора крови при 22°C.

В ходе исследований было замечено увеличение анионной проницаемости эритроцитов в присутствии растворенного сульфата магния, построена молекулярно-кинетическая модель процесса активации. Впервые измерены константы реакции активации анионных обменников. Также было зарегистрировано что функциональные характеристики эритроцитов не изменяются в присутствии токолитического препарата – гексопреналина.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Мальцев В. П.,
Ястребова Е. С.

**Картирование адаптивных замен относительно
трехмерной структуры белков вируса клещевого энцефалита
при пассировании на различных культурах клеток**

Гладышева А. В.

Новосибирский государственный университет
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора, р. п. Кольцово

Клещевой энцефалит (КЭ) является одной из самых распространенных и опасных природно-очаговых инфекций. В тоже время, вопрос генетической тождественности адаптированных лабораторных штаммов ВКЭ с природными вариантами ВКЭ, циркулирующими в очагах этой инфекции, остается фактически не исследованным.

Нами было проведено полногеномное секвенирование ВКЭ, выделенного из мозговой суспензии погибшего человека. Адаптацию ВКЭ к культивированию выполнили путем последовательных пассажей на культурах клеток почки эмбриона свиньи (СПЭВ), обезьяны (293) и нейроклетах (Neuro-2a). После третьего пассажа на клетках СПЭВ в геноме ВКЭ С11-13 были выявлены первые изменения, а к шестому пассажиру произошло 25 нуклеотидных и 8 аминокислотных замен. Аминокислотные замены были обнаружены в белках Е (1 замена), NS1 (1), NS2a (1), NS3, (3) и NS5 (2). На культурах клеток 293 и Neuro-2a также были выявлены замены в генах кодирующих неструктурные белки ВКЭ. Ключевые аминокислотные замены были картированы относительно трехмерных моделей белков NS3 и NS5. Анализ моделей показал, что аминокислотные замены локализованы в активных центрах сериновой протеазы (NS3), геликазы и вирусной РНК зависимой РНК полимеразы (NS5). Было также обнаружено, что в гене NS3 замена гистидина на глутамин произошла со сменой заряда с положительного на отрицательный.

Исследование инфицированных клеток показало выраженную корреляцию эффективности репликации ВКЭ и накопления аминокислотных замен в NS3 и NS5 ВКЭ, в клетках при культивировании.

Пономарева Е. П., Терновой В. А., Е. В., Гладышева А. В., и др. Обнаружение множественных аминокислотных замен в белках ВКЭ при адаптации высокопатогенного для человека изолята к культурам клеток// Archives of Virology (in publish).

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

Исследование возможностей характеристики биомолекул методами эллисометрии в терагерцовом диапазоне

Гусев В. А.

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

Исследование биомолекул в терагерцовом диапазоне – перспективное направление современной спектроскопии. С одной стороны, поглощение излучения с субмиллиметровой длиной волны соответствует колебательным и вращательным спектрам нерегулярных биополимеров: нуклеиновых кислот и белков, а с другой, все измерения в данной области встречают трудности, такие как сильное поглощение водой (которая входит в состав большинства биологических образцов). На данный момент практически не существует методов, позволяющих измерить диэлектрическую проницаемость и гиротропию объемных водосодержащих растворов в данном диапазоне частот. В настоящей работе в качестве метода измерения показателей преломления и поглощения используется метод эллисометрии.

Эллисометрические измерения проводились на базе классической фотометрической схемы с вращающимся анализатором и использованием кремниевой призмы нарушенного полного внутреннего отражения для изучения сильнопоглощающих объектов. В качестве источника излучения был использован Новосибирский лазер на свободных электронах, генерирующий монохроматическое перестраиваемое по длине волны излучение в диапазоне от 5 до 240 мкм (60 – 1,25 ТГц).

Достигнута рекордная точность в измерении тестовых жидкостей (дистиллированная вода, стандартные растворители), а также проведены измерения гиротропии протеогликанов и ДНК.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Чопорова Ю. Ю.

Самоограниченные комплексы – перспективные ген-направленные агенты. Физико-химическое исследование.

Кизилова В. А.

Новосибирский государственный университет

Олигонуклеотиды – короткие синтетические фрагменты нуклеиновых кислот (НК), широко применяют для изучения молекулярно-биологических процессов. Благодаря их способности формировать комплементарные комплексы можно конструировать структуры со всевозможной пространственной геометрией (например, ДНК-оригами [1]). Линейные полимерные комплексы (конкатамеры), сформированные одним или несколькими олигонуклеотидами, являются примером таких структур. Ранее [2] было показано, что введение в центральную часть олигонуклеотида гибкого линкера приводит к значительному изменению размеров модифицированных конкатамеров относительно немодифицированных.

Мы предположили, что в данном случае возможно формирование самоограниченных комплексов. Для подтверждения этого была построена термодинамическая модель и произведена ее экспериментальная проверка методами термической денатурации с оптической регистрацией сигнала и задержки в геле. Показана возможность и определена эффективность формирования самоограниченных комплексов в зависимости от природы и размера линкеров. методом молекулярной динамики подтверждено образование таких самоограниченных структур. Впервые продемонстрировано, что самоограниченные комплексы могут быть использованы в качестве ген-направленных агентов, например, выступать в качестве искусственной рибонуклеазы в присутствии ионов Mg^{2+} . Экспериментальная проверка подтвердила предложенную гипотезу. Таким образом, проведено физико-химическое исследование формирования самоограниченных комплексов и показана их перспективность в качестве терапевтических агентов.

Работа поддержана грантами ФИМТ 154 и ПФНИ ГАН на 2017-2020 гг. (VI.62.1.4, 0309-2016-0004).

1. Kuzuya A., Komiyama M. DNA origami: fold, stick, and beyond // *Nanoscale*. 2010. Т. 2. №. 3. С. 309–321.

2. Филиппов Н. С., Ломзов А. А., Пышный Д. В. Влияние олигонуклеотида-стоппера на размер и термическую стабильность конкатамерных комплексов // *Вестник НГУ. Серия: Физика*. 2011. Т. 6. Вып. 4. С. 104–115.

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

Оценка протеомного профиля микровезикул В-лимфоцитов больных хроническим лимфолейкозом

Клюшова Л. С.

Новосибирский государственный университет

Внеклеточные везикулы играют ключевую роль в межклеточной сигнализации и являются специфичными признаками многих физиологических процессов – как нормальных, так и патологических, в том числе канцерогенеза. Хронический лимфолейкоз (ХЛЛ) – онкогематологическое заболевание, характеризующееся накоплением атипичных зрелых В-лимфоцитов. Выделяемые В-лимфоцитами везикулы могут выступать маркерами для диагностики и прогнозирования ХЛЛ. Они характеризуются различным протеомным составом, оценка которого имеет ряд методических трудностей.

Цель данной работы – подбор оптимальных условий пробоподготовки для масс-спектрометрического (МС) анализа микровезикул, включая выделение микровезикул, экстракцию белков, их ферментативный гидролиз и обессоливание проб, а также подбор условий для МС с предварительным разделением компонентов смеси на ВЭЖХ-системе.

На бычьем сывороточном альбумине было проведено сравнение условий для всех критических этапов протокола пробоподготовки In-solution Digestion. В качестве компонентов солюбилизации и денатурации белка сравнивались мочевины и дезоксихолат натрия (SDC). Было установлено, что протокол с мочевиной дает большее покрытие последовательности белка и большее количество пептидных идентификаций. Также была подобрана оптимальная концентрация трипсина для ферментативного гидролиза. Пробы обессоливали с помощью носиков ZipTip и экстрагирующих дисков C₁₈. Перед трипсинизацией использовали концентраторы для увеличения количества белка в пробе.

Микровезикулы были выделены из крови больных ХЛЛ последовательным центрифугированием и верифицированы методом вестерн-блот. С помощью МС/МС-анализа с предварительным разделением пептидов на ВЭЖХ-системе были получены масс-спектры. Белки, идентифицированные с использованием программы Mascot, согласно базе данных Gene Ontology принадлежат микровезикулам.

Таким образом, был получен протокол пробоподготовки, который позволяет качественно оценить протеомный состав микровезикул.

Научный руководитель – канд. мед. наук Воронцова Е. В.

**Влияние величины напряжённости электрического поля,
ёмкости и сопротивления на эффективность переноса
плазмидной ДНК в клетки эукариот с помощью электропорации**

Кошман В. Е., Неустроева А. А.

Новосибирский государственный университет

Институт молекулярной и клеточной биологии СО РАН, г. Новосибирск

В биологии и медицине широко распространены исследования, для которых необходима трансфекция – перенос ДНК в клетки эукариот. В настоящей работе исследуется один из физических методов проведения трансфекции – электропорация. В процессе электропорации импульсы электрического поля высокой напряженности и различной длительности воздействуют на клетку таким образом, что проницаемость её мембраны для ДНК сильно увеличивается. Если электрическая обработка не была чересчур интенсивной, после некоторого времени релаксации проницаемость мембран возвращается к исходному уровню. Одной из наиболее серьёзных проблем данного метода является высокая смертность клеток, которая закономерно приводит к понижению эффективности трансфекции. В поисках решения данной проблемы была проведена работа по оптимизации условий проведения электропорации на примере переноса плазмидной ДНК, кодирующей зелёный флуоресцентный белок в культивируемые клетки дрозофилы. Было исследовано влияние величины напряжённости электрического поля, ёмкости и сопротивления на эффективность трансфекции. Также, перед тем, как варьировать физические характеристики, был проведён ряд опытов, ставящих своей целью поиск оптимального буферного раствора для проведения основного эксперимента. В результате удалось значительно повысить эффективность трансфекции с 10% до 95% по сравнению с литературными данными [1, 2] и найти оптимальные условия для получения контролируемой экспрессии белка в клетке.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №16-14-10288.

1. Park, J. H. et. al. Optimization of Transfection Conditions for Expression of Green Fluorescent Protein in *Drosophila Melanogaster* S2 Cells // *Enzyme and Microbial Technology*. 1999. № 25. P. 558–563.

2. Cherbas, L., et. al. Transformation techniques for *Drosophila* cell lines // *Methods in Cell Biology*. – New York: Academic Press. 1994. Vol. 44. P. 161–179.

Научный руководитель – Яринич Л. А.

Изучение влияния геометрических параметров острия зонда атомно-силового микроскопа на результаты атомно-силовой спектроскопии одиночных молекул

Красулина А. Н.

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

Атомно-силовой микроскоп (АСМ) позволяет осуществлять прямые измерения сил, действующих между одиночными макромолекулами. Данную технику называют атомно-силовой спектроскопией (АСС). Для выполнения соответствующих измерений макромолекулы должны быть закреплены на острие зонда АСМ и на подложке, к которой многократно подводится и отрывается зонд. Первичным результатом АСС является массив силовых кривых – зависимостей силы, действующей на зонд, от расстояния до подложки. На данных кривых выделяют области, соответствующие растяжению и разрывам молекулярных пар, по которым определяют пиковые значения силы и скорость нагружения ($loading\ rate = \frac{dF}{dt}$).

Разработана оригинальная методика модификации зондов АСМ, основанная на технике селективного травления, которая позволяет обеспечить геометрическую локализацию одиночных макромолекул на острие зонда АСМ. Результаты модификации зондов контролировали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Был выполнен цикл силовых измерений для молекулярной системы авидин-биотин для двух вариантов функционализации зондов – разработанная методика и классический протокол ковалентной пришивки с использованием глутарового альдегида. Показана работоспособность предложенной методики.

Все зонды АСМ, использованные в силовых измерениях, были визуализированы методом ПЭМ. По снимкам оценены площади контактов и возможные количества взаимодействовавших молекулярных пар. Полученные данные сопоставлены с результатами силовых измерений.

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

**Компьютерно-экспериментальное исследование
ответа клеток человека на механический стресс,
вызванный повышенным давлением**

Кузин В. Ф.

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

Повышенное давление на ткани человека часто является механизмом возникновения и прогрессирования многих заболеваний. В частности, механический стресс приводит к разрушению зрительного нерва при глаукоме, повышению инвазивности раковых клеток твердых опухолей. В настоящее время не существует препаратов, специфически регулирующих ответ клеток на механический стресс. Одним из перспективных путей фармакологической регуляции ответа клетки на механический стресс является воздействие на белки или гены (мишени), одновременно участвующие в ответе клеток на механический стресс и клеточной гибели.

Решение данной проблемы с использованием компьютерно-экспериментальных методов является целью данной работы. Биоинформатическое исследование заключалось в построении генных сетей апоптоза и механического стресса в системе реконструкции генных сетей ANDSystem и в последующем анализе экспрессионного профиля клеток при различных механических воздействиях с целью поиска дифференциально экспрессируемых генов.

Для проведения экспериментальной работы был сконструирован специализированный прибор, предназначенный для культивирования клеток в условиях повышенного давления. Повышенное давление создавалось в герметичной камере при помощи мембранного компрессора с электродвигателем, камера регулярно продувалась для поддержания нужного уровня CO₂. Весь прибор собирался на базе платформы Arduino. Последующая оценка выживаемости клеток проводилась при помощи МТТ-теста.

В результате работы были построены генные сети ответа клетки на механический стресс и клеточной гибели и разработан метод выявления генов, связанных одновременно с механическими воздействиями на клетку и апоптозом; найдены дифференциально экспрессирующиеся гены при наложении механического стресса на клетку; разработан и построен прибор для культивирования клеток условиях повышенного давления.

Научный руководитель – канд. биол. наук, доцент Иванисенко В. А.

Морфологическая характеристика популяции тромбоцитов при помощи сканирующей проточной цитометрии.

Литвиненко А. Л.

Новосибирский государственный университет

Диагностика системы гемостаза является одной из актуальных проблем современной медицинской диагностики. Причиной может являться огромная сложность данной системы. Она включает в себя множество белков, а также специальные элементы крови – тромбоцитов. В следствии этого, возможные нарушения весьма разнообразны, но все они приводят к схожим внешним проявлениям.

Тромбоциты являются ключевыми элементами системы гемостаза, т. к. участвуют не только в механической закупорке повреждений в сосудах, но и в биохимическом ответе на данное событие. Сами тромбоциты способны находится в нескольких состояниях, характеризующихся как биохимическими, так и морфологическими признаками. Переход из одного состояния в другое является процессом непрерывным, а конечное состояние каждого тромбоцита зависит исключительно от его реакционной способности и связано с концентрацией ионов кальция в эндоплазматическом ретикулуме. Реакционная способность имеет прямое влияние на морфологии тромбоцитов.

Исследование морфологии тромбоцитов в данной работе проводилось с использованием сканирующего проточного цитометра. Данный прибор способен регистрировать сигнал светорассеяния от частицы в диапазоне углов от 10 до 70 градусов. После решения обратной задачи светорассеяния, можно получить данные о форме каждого измеренного тромбоцита с достаточной точностью. Достоинством этого метода является возможность исследовать большое количество тромбоцитов за сравнительно небольшое время.

В результате были получены распределения нативных тромбоцитов по индексу формы. Полученная информация может помочь в оценке рисков развития серьезных патологий гемостаза, связанных с тромбоцитами.

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

Поляризационные характеристики лазерного излучения отражённого кожным покровом человека: методика измерения

Ни Р. В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет

В настоящее время в биологии и медицине достаточно развит метод поляризационной диагностики, который реализуется путём облучения исследуемого участка биоткани линейно поляризованным излучением с последующей регистрацией рассеянного назад излучения. Интерес к этому методу обусловлен прежде всего простотой практической реализации и высокой чувствительностью поляризационных характеристик рассеянных оптических полей к оптическим свойствам рассеивающих сред. Анализ поляризационных характеристик рассеянного биотканями излучения в ряде случаев позволяет получить качественно новые результаты при исследованиях морфологического и функционального состояния биотканей, являющихся одним из важнейших направлений современной медицинской диагностики. Возможности поляризационной диагностики биологических структур продемонстрированы в работах по исследованию возможностей ранней диагностики катаракты хрусталика и оценки концентрации глюкозы в тканях больных диабетом [1].

Значительно больше информации о состоянии поверхностного слоя биоткани можно получить, если облучать участок исследуемой поверхности излучением с четырьмя различными поляризациями и, в каждом случае, измерять состояние поляризации рассеянного тканями излучения. Это позволит вычислить матрицу обратного рассеяния, которая содержит исчерпывающую информацию о исследуемой среде. В докладе анализируются особенности применения метода поляризационного лазерного зондирования для оперативной диагностики состояния кожного покрова. Этот метод разработан на кафедре оптико-электронных систем и дистанционного зондирования НИ ТГУ [2] и успешно используется для оперативной диагностики состояния атмосферных облаков.

1. Приезжев А. В. Лазерная диагностика в биологии и медицине / А. В. Приезжев, В. В. Тучин, Л. П. Шубочкин. М., Наука, 1989.

2. Самохвалов И. В., Насонов С. В., Брюханов И. Д., и др. // Известия высших учебных заведений. Физика. 2013. Т. 56, № 8/3. С. 281–283.

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

Разработка метода количественного определения рецепторной специфичности вирусов гриппа А

Онхонова Г. С.

Новосибирский государственный университет

Грипп – это острая вирусная инфекция, которая может заражать млекопитающих, птиц и людей, является одной из основных причин заболеваемости и смертности. В процессе жизненного цикла вирионы проходят обязательную стадию – прикрепление к поверхности клетки-мишени. Для каждого вируса имеется специфический рецептор на поверхности чувствительных клеток, у вируса же есть белок, посредством которого он связывается с клеточным рецептором. У вируса гриппа это белок – гемагглютинин, а рецепторы на поверхности клетки – это гликолипиды или гликопротеины, которые содержат терминальные сиалированные фрагменты. Структурное различие терминальных сиалированных фрагментов, прикрепленных к галактозидазе, является основой определения специфичности связывания рецепторов. Существует две основные химические формы сиаловой кислоты ($\alpha 2,3$ и $\alpha 2,6$) и разные штаммы вируса гриппа отличаются сродством к ним. Штаммы вируса птичьего гриппа используют в качестве рецептора сиаловые кислоты со связью $\alpha 2,3$. Штаммы вируса человеческого гриппа преимущественно прикрепляются к сиаловым кислотам со связью $\alpha 2,6$.

Целью данной работы является разработка и оптимизация количественного метода измерения рецепторной специфичности вируса гриппа. С помощью конкурентного и прямого иммуноферментного анализа была исследована рецепторная специфичность трех штаммов вируса гриппа: A/rook/Chany/32/2015 (H5N1), A/Anhui/01/2013 (H7N9), A/California/7/2009 (H1N1). В качестве моделей клеточных рецепторов были использованы белки муцин и фетуин. С помощью модифицированного метода Диксона были посчитаны константы диссоциации для данных белков.

В ходе исследования было получено, что аффинность связывания штаммов вируса птичьего гриппа субтипов H5N1 и H7N9 с $\alpha 2,3$ сиаловыми кислотами больше, чем с $\alpha 2,6$, а аффинность связывания штамма вируса человеческого гриппа субтипа H1N1 с $\alpha 2,6$ выше, чем с $\alpha 2,3$. Аффинность связи штаммов вируса птичьего гриппа H5N1 и H7N9 с муцином на 2 и 4 порядка, соответственно, выше, чем с фетуином. Для штамма вируса человеческого гриппа значения приблизительно одного порядка.

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

Гидродинамический расчет биологического реактора

Папаева Е. О.

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

Актуальной и не решенной на данный момент является проблема регенерации костной ткани с использованием тканеинженерных конструкций. Для решения этой задачи на данный момент ведется разработка методики ведения тканеинженерных конструкций в вихревом биореакторе. В качестве основы для заселения клетками предлагается полотно на основе поликапролактона. Полотно заселяется клетками, а затем помещается в биореактор для дальнейшего культивирования. Чтобы улучшить качество культивирования конструкций, важно знать распределение касательного напряжения на поверхности образца в зависимости от частоты вращения. Для его оценки было проведено моделирование реактора с помощью Ansys Fluent.

Математическая модель представляет собой два соосных цилиндра, заполненных жидкостью, вращающихся друг относительно друга. Внутренний полый цилиндр представляет собой держатель, на который закрепляется полотно скаффолда, заселенное клетками. Были промоделированы два случая: вращение или внутреннего, или внешнего цилиндра. Кроме того, была построена модель с той же конструкцией, но уменьшенной в два раза зазором между стенкой внутреннего и внешнего цилиндра. Для всех моделей было исследовано вращение на пяти частотах (угловые скорости 8, 15, 30, 45, 60 оборотов в минуту).

В результате проделанной работы были визуализированы потоки жидкости внутри биологического реактора при условии вращения внутреннего и внешнего цилиндра. Построены распределения статического давления, скоростей течения жидкости, а так же касательного напряжения на внутренней и наружной стенке внутреннего цилиндра. Показано, что при вращении внутреннего цилиндра вихри Тейлора образуются в зазоре между цилиндрами, а при вращении внешнего цилиндра – в полости внутреннего цилиндра. Также отмечена эволюция вихрей Тейлора при увеличении частоты вращения. Получена зависимость касательного напряжения на внешней и внутренней поверхности внутреннего цилиндра от частоты вращения, позволяющая предсказывать значения касательного напряжения и оптимизировать режим работы биореактора.

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

Фагоцитарная активность моноцитов в ответ на индукцию метициллиноустойчивыми штаммами *Staphylococcus aureus*

Тюменцева Д. И.

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Бактериальные инфекции являются серьезной проблемой здравоохранения. Развитие антибиотиков было значительным достижением в современной медицине. Однако, несмотря на это, бактериальные инфекции по-прежнему являются одной из основных причин смерти у людей. В настоящее время основными проблемными микроорганизмами являются β – лактамазы расширенного спектра (БЛРС), к которым относятся и золотистый стафилококк (MRSA). Однако, фагоцитоз играет важную роль при гнойно-воспалительных заболеваниях, особенно при стафилококковой инфекции.

Таким образом, целью исследования является изучение кислородозависимого и кислородонезависимого фагоцитоза моноцитов при воздействии метициллинрезистентных штаммов *Staphylococcus aureus*.

В результате проведенного исследования фагоцитоза было установлено, что моноциты крови усиливают продукцию активных форм кислорода в люминол-зависимой ХЛ при воздействии устойчивых штаммов *S.aureus* относительно MSSA. При этом интенсивность люцигенин-зависимой ХЛ снижена. Исследование люминол-зависимой ХЛ моноцитов крови при воздействии MRSA относительно MSSA увеличивается площадь под кривой, интенсивность и ИА, при этом эти показатели снижаются в люцигенин-зависимом процессе.

Исследования кислородонезависимого фагоцитоза популяций моноцитов показали, что фагоцитарное число классических, не классических, и промежуточных популяций моноцитов повышается при воздействии устойчивыми штаммами; а фагоцитарный индекс всех популяций, напротив, снижается при воздействии устойчивыми штаммами.

Таким образом, можно отметить, что классический тип моноцитов быстрее активируется в ответ на MRSA. При этом не классические и промежуточные моноциты при низкой скорости фагоцитируют эффективнее.

Научный руководитель – д-р биол. наук, доцент Коленчукова О. А.

Расширенная характеристика частиц при использовании индикатрисы обратного рассеяния

Фролов Л. Б.

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

Одним из наиболее востребованных применений метода проточной цитометрии является исследование клеток крови. Регистрация сигналов светорассеяния и флуоресценции позволяет получить информацию о морфологии исследуемых частиц быстро и статистически достоверно. Обычный метод цитометрии основан на получении двух сигналов светорассеяния (рассеяние вперед и вбок) и нескольких сигналов флуоресценции. Однако данный подход не всегда оказывается достаточным в изучении поведения клеток крови, в частности агрегации тромбоцитов.

Уникальная методика сканирующей проточной цитометрии, позволяющая получить индикатрису светорассеяния частицы в диапазоне углов $10-70^\circ$, давала надежду на подробное исследование ранней кинетики агрегации тромбоцитов. В ходе исследования было показано, индикатриса светорассеяния в переднюю полусферу является недостаточно информативной для исследования агрегации. Математическое моделирование выявило, что дополнительный сигнал светорассеяния в заднюю полусферу ($110-170^\circ$), то есть обратная индикатриса, является удовлетворительным и достаточным.

Ранее обратная индикатриса в методе сканирующей проточной цитометрии не регистрировалась. Для её получения прибор был доработан: изменению подверглись оптическая кювета и система гидрофокусировки струи пробы. В ходе работы были проведены испытания данной системы и показана её применимость в исследовании агрегации тромбоцитов.

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

Исследование обратной связи в системе “организм человека – внешний нагреватель” методом инфракрасной термографии высокого разрешения

Шепелин А. В.

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

Эффективным способом изучения свойств физических объектов является воздействие на них, получение ответной реакции, систематизация выходных данных и построение теории на основе результатов отклика. Данный алгоритм использует концепцию *обратной связи*, где в роли изучаемого объекта чаще всего выступает “чёрный ящик”, то есть объект, детальное устройство которого неизвестно и, часто, очень сложно [1].

В настоящей работе “чёрным ящиком” служил человек. Входными сигналами являлись локальные нагрев и охлаждение его конечностей, реализуемые с помощью плоского нагревателя и модуля Пельтье, а также модуляция дыхания, заданная метрономом. Выходными – температура кожи и частота спонтанного дыхания. В качестве оптимального средства, позволяющего измерить оба этих отклика одновременно, был применен метод скоростной инфракрасной термографии – матричное тепловидение.

Из графика рис. 1 видно, что при нагреве правого предплечья температура пальцев обеих рук понижается, а по окончании нагрева начинает повышаться, что демонстрирует отрицательную обратную связь. Доказана состоятельность и перспективность подхода обратной связи для изучения системных реакций организма человека физическими методами.

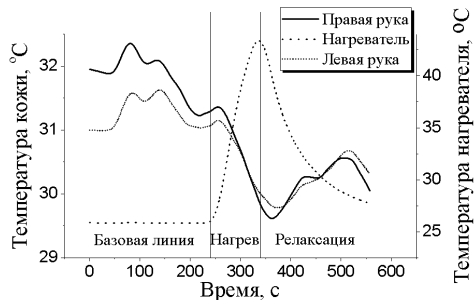


Рис. 1. Температурная реакция обеих конечностей при нагреве одной

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-02-070680).

1. Vainer B. G. In: QIRT-2012. E-Book Proc. 2012, Naples. Paper ID-340.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Вайнер Б. Г.

Исследование механизмов транспорта твердых частиц из носовой полости в головной мозг методами МРТ

Щербаков И. С.

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

Зональная организация обонятельной системы определяется не только особенностями экспрессии генов ольфакторных рецепторов, но и геометрией носового хода, где рецепторы к наиболее мукоорастворимым соединениям сосредоточены в области с максимальной скоростью воздушного потока (дорсальная часть), а рецепторы к менее летучим соединениям - в вентральной части носа. Увеличение скорости потока в носовой полости позволяет, с одной стороны, увеличить чувствительность ольфакторного эпителия к запаховым стимулам, с другой, увеличивает риск воздействия различных патогенов из воздушного потока, вследствие большей интенсивности их осаждения. В данном исследовании с помощью марганец-усиленной магнитно-резонансной томографии (МРТ) было установлено, что при интраназальном введении, нивелирующем влияние геометрии носовой полости, коллоидного раствора наночастиц оксида марганца (НОМ, Mn_3O_4) в вентральной части ольфакторного эпителия мышей происходит более интенсивный захват частиц, чем в дорсальной. Совместное введение НОМ и специфических блокаторов аксонального транспорта и эндоцитоза показало, что именно эти процессы играют ведущую роль в перемещении наночастиц из носовой полости в ольфакторные луковицы. При этом в дорсальной части ольфакторного эпителия, в отличие от вентральной, основной вклад в захват НОМ вносит клатрин-зависимый эндоцитоз. Ключевое значение эндоцитоза в дифференцировании дорсальной и вентральной областей подтверждает исследование транспорта из носовой полости в мозг ионов марганца, которые поступают в нервные окончания через кальциевые каналы и которые накапливаются с одинаковой интенсивностью в разных отделах ольфакторных луковиц. Таким образом, две области ольфакторного эпителия мыши демонстрируют реципрокные отношения между интенсивностью осаждения субмикронных аэрозолей и эффективностью их захвата и транспорта в головной мозг, что позволяет ограничивать инфекционные и токсические воздействия наноаэрозолей на клетки ольфакторного эпителия и головной мозг.

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

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Антонова В. С.	5	Кузнецов В. А.	34
Анфилофьев В. В.	12	Курганский И. В.	56
Афанасьева Е. Ф.	40	Кучумова И. Д.	18
Ашкарин И. Н.	41	Лазарева С. К.	57
Барсуков А. В.	6	Лаптева Л. Л.	58
Баскакова К. И.	7	Летягин Г. А.	19, 59
Безматерных Д. Д.	75	Литвиненко А. Л.	84
Бийбосунов А.	42	Лоскина К. С.	20
Боброва И. А.	8	Львова С. А.	21
Бойко Е. В.	9	Лю Цзючжао.	22
Бурцева Е. К.	10	Марьин А. П.	23
Валуев И. А.	43	Марьина У. А.	23
Волкова М. Б.	11	Мельников А. Д.	60
Вражкина Л. А.	76	Меркулова И. Е.	24
Герт С. С.	12	Неустроева А. А.	81
Гладышева А. В.	77	Ни Р. В.	85
Глазнев Р. К.	44	Ноговицын С. И.	25
Гольшев В. М.	45	Олесов С. С.	20
Гольшева Е. А.	46	Онхонова Г. С.	86
Гусев В. А.	78	Осипова К. Н.	61, 62
Данюкина И. С.	13	Папаева Е. О.	87
Дозморов Н. В.	47	Паулиш Н. А.	26
Дятлов М. Г.	48	Пельменев К. Г.	27
Ершов К. С.	49	Петенев И. В.	28
Жуков И. В.	50	Резванова А. Е.	29
Жураева Б. С.	13	Родин Б. А.	63
Зайцева И. В.	14	Романов А. С.	64
Зайцева Ю. В.	51	Саламатов И. Н.	30
Закусилов В. В.	15	Святова А. И.	65
Ишкиняева В. Р.	16	Семерикова А. И.	31
Кадиленко Е. М.	52	Смирнова А. В.	32
Кадцын Е. Д.	53	Сологуб С. А.	33
Кизилова В. А.	79	Стефанюк А. Я.	34
Клюшова Л. С.	80	Сыроквашин М. М.	27
Козиненко В. П.	54	Тимофеев И. О.	66
Коняев Е. С.	17	Трубачев С. А.	67
Кошман В. Е.	81	Туманов С. В.	68
Красулина А. Н.	82	Тюменцева Д. И.	88
Крестина М. С.	55	Файзулин Р. Р.	35
Кузин В. Ф.	83	Фаст С. С.	36

Фролов Л. Б.	89	Шепелин А. В.	90
Хамитова Г. Ю.	37	Шторк А. С.	72
Хрипунков М. Н.	8	Шушаков А. А.	73
Художитков А. Э.	69	Щербаков И. С.	91
Цэндсүрэн Цог-Очир	38	Южаков В. В.	39
Шахова М. В.	70	Яковлев И. В.	74
Шелепова Е. А.	71		

ОГЛАВЛЕНИЕ

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ.....5

Антонова В. С.	5
Барсуков А. В.	6
Баскакова К. И.	7
Боброва И. А., Хрипунков М. Н.	8
Бойко Е. В.	9
Бурцева Е. К.	10
Волкова М. Б.	11
Герт С. С., Анфилофьев В. В.	12
Данюкина И. С., Жураева Б. С.	13
Зайцева И. В.	14
Закусилов В. В.	15
Ишкиняева В. Р.	16
Коняев Е. С.	17
Кучумова И. Д.	18
Летягин Г. А.	19
Лоскина К. С., Олесов С. С.	20
Львова С. А.	21
Лю Цзючжао	22
Марьина У. А., Марьин А. П.	23
Меркулова И. Е.	24
Ноговицын С. И.	25
Паулиш Н. А.	26
Пельменев К. Г., Сыроквашин М. М.	27
Петенев И. В.	28
Резванова А. Е.	29
Саламатов И. Н.	30
Семерикова А. И.	31
Смирнова А. В.	32
Сологуб С. А.	33
Стефанюк А. Я., Кузнецов В. А.	34
Файзулин Р. Р.	35
Фаст С. С.	36
Хамитова Г. Ю.	37
Цэндсүрэн Цог-Очир	38
Южаков В. В.	39

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА 40

Афанасьева Е. Ф.	40
Ашкарин И. Н.	41
Бийбосунов А.	42
Валуев И. А.	43
Глазнев Р. К.	44
Гольшев В. М.	45
Гольшева Е. А.	46
Дозморov Н. В.	47
Дятлов М. Г.	48
Ершов К. С.	49
Жуков И. В.	50
Зайцева Ю. В.	51
Кадиленко Е. М.	52
Кадцын Е. Д.	53
Козиненко В. П.	54
Крестина М. С.	55
Курганский И. В.	56
Лазарева С. К.	57
Лаптева Л. Л.	58
Летягин Г. А.	59
Мельников А. Д.	60
Осипова К. Н.	61
Осипова К. Н.	62
Родин Б. А.	63
Романов А. С.	64
Святова А. И.	65
Тимофеев И. О.	66
Трубачев С. А.	67
Туманов С. В.	68
Художитков А. Э.	69
Шахова М. В.	70
Шелепова Е. А.	71
Шторк А. С.	72
Шушаков А. А.	73
Яковлев И. В.	74

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА	75
Безматерных Д. Д.	75
Вражкина Л. А.	76
Гладышева А. В.	77
Гусев В. А.	78
Кизилова В. А.	79
Ключова Л. С.	80
Кошман В. Е., Неустроева А. А.	81
Красулина А. Н.	82
Кузин В. Ф.	83
Литвиненко А. Л.	84
Ни Р. В.	85
Онхонова Г. С.	86
Папаева Е. О.	87
Тюменцева Д. И.	88
Фролов Л. Б.	89
Шепелин А. В.	90
Щербаков И. С.	91
АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ	92
ОГЛАВЛЕНИЕ	94

МАТЕРИАЛЫ
55-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

МНСК–2017

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы конференции публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 31.03.2017

Офсетная печать

Заказ № _____

Формат 60x84/16

Уч.-изд. л. 8,6. Усл. печ. л. 10,6.

Тираж 140 экз.

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