

Материалы секции
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ



14-19 апреля 2019
НОВОСИБИРСК

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МНСК-2019

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы
57-й Международной научной студенческой конференции

14–19 апреля 2019 г.

Новосибирск
2019

УДК 33
ББК Б.в672я431
Ф 505

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

Экспертный совет секции

Экспертный совет подсекции «Биомедицинская физика»:

д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Мальцев, д-р хим. наук Н. Э. Поляков,
канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин, канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов,
канд. физ.-мат. наук В. В. Яньшолле, канд. физ.-мат. наук Д. И. Строкотов,
канд. физ.-мат. наук А. Г. Марьясов, канд. физ.-мат. наук Ю. И. Глазачев,
канд. физ.-мат. наук В. М. Некрасов

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

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

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:

д-р физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН Н. В. Суровцев,
д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан,
д-р хим. наук Ю. П. Центалович, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер,
канд. физ.-мат. наук Д. И. Колоколов, канд. физ.-мат. наук Е. А. Зеленцова,
канд. физ.-мат. наук А. Е. Москаленский, канд. хим. наук А. С. Кирютин,
канд. физ.-мат. наук А. С. Богомолов, А. М. Дмитриев

Ф 505 Физические методы в естественных науках: Материалы 57-й Междунар.
науч. студ. конф. 14–19 апреля 2019 г. / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск :
ИПЦ НГУ, 2019. – 78 с.

ISBN 978-5-4437-0866-9

УДК 33
ББК Б.в672я431

ISBN 978-5-4437-0866-9

© СО РАН, 2019
© Новосибирский государственный
университет, 2019

NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY
SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

ISSC-2019

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

Proceedings
of the 57th International Students Scientific Conference

April, 14–19, 2019

Novosibirsk
2019

УДК 33
ББК Б.в672я431
Ф 505

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

Section scientific committee

Section scientific committee «Biomedical Physics»:

Dr. Phys. Math., Prof. V. P. Maltsev, Dr. Chem. N. E. Polyakov,
Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin, Cand. Phys. Math. A. A. Lomzov,
Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole, Cand. Phys. Math. D. I. Strokov, Cand. Phys.
Math. A. G. Maryasov, Cand. Phys. Math. Yu. I. Glazachev
Cand. Phys. Math. V. M. Nekrasov

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

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

Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:

Dr. Phys. Math., Assoc. Prof. N. V. Surovtsev,
Dr. Chem., Prof. A. V. Baklanov, Dr. Chem., Prof. N. P. Gritsan,
Dr. Chem. Yu. P. Tsentalovich, Cand. Phys. Math. S. L. Veber,
Cand. Phys. Math. E. A. Zelentsova, Cand. Phys. Math. D. I. Kolokolov,
Cand. Phys. Math. A. E. Moskalenskiy, Cand. Chem. A. S. Kiryutin,
Cand. Phys. Math. A. S. Bogomolov, A. M. Dmitriev

Ф 505 Physical methods in natural sciences : Proceedings of the 57th International Students Scientific Conference. April, 14–19, 2019 / Novosibirsk State University. – Novosibirsk : IPC NSU, 2019. – 78 pp.

ISBN 978-5-4437-0866-9

УДК 33
ББК Б.в672я431

ISBN 978-5-4437-0866-9

© SB RAS, 2019
© Novosibirsk State University, 2019

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 621.3

Разработка аппаратно-программного комплекса для нагрузочного тестирования с неинвазивным контролем анаэробного порога

Д. А. Буянов

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

При высокой нагрузке мышцы работают без кислорода. Они сжигают АТФ (аденозинтрифосфат), используя глюкозу и гликоген для топлива, а как побочный продукт выделяют молочную кислоту (лактат). Порог анаэробного обмена (ПАНО) – это граница, где достигается баланс между скоростью выделения мышцами лактата и скоростью его утилизации. Границе соответствует индивидуальный уровень интенсивности нагрузки и пульса. Упражнение в анаэробной зоне, когда оно выполнено правильно и безопасно, приводит к более высокой лактатной толерантности (мышечной выносливости).

Существующие аналоги не в полной мере удовлетворяют потребности пользователя. Как правило, ПАНО определяют в ходе теста с линейно возрастающей нагрузкой, во время которой многократно забираются пробы крови, преимущественно артериальной, для определения концентрации лактата. Метод позволяет получить точные значения, однако сопровождается потерей времени на забор крови и не может быть использован в режиме реального времени.

Разработанный комплекс с биологической обратной связью позволяет определить ПАНО неинвазивно, по точке на сглаженной кривой, отражающей динамику изменения интенсивности ЭМГ-активности во время выполнения теста, которая соответствует положению точки перегиба на графике зависимости усредненного значения содержания дезоксигенированной формы гемоглобина в мышечной ткани, измеряемой с помощью ИК-спектроскопии, от усредненного значения ее ЭМГ-активности.

Изготовлен прототип, реализующий аппаратную составляющую прибора, разработано программное обеспечение и проведены функциональные тесты, подтверждающие выполнимость заложенных технических требований и сформирован ряд дальнейших улучшений.

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

**Новые возможности широкоперестраиваемого лазерного прибора
на базе нелинейных кристаллов LiGaS_2 и LiGaTe_2
для неинвазивной диагностики заболеваний**

С. А. Гражданников, В. А. Лисицкий
Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск
Институт химической биологии и фундаментальной медицины
СО РАН, Новосибирск

На сегодняшний день важным аспектом является выявление заболевания еще до появления первых симптомов, поскольку это позволит не допустить прогрессирования заболевания, перехода его в хроническую стадию и уменьшить риск развития сопутствующих заболеваний. Известно, что в выдыхаемом человеком воздухе содержатся тысячи различных молекул, идентификация которых возможна лазерными спектрометрами. В настоящее время ведущими мировыми учеными ведутся активные работы по составлению библиотек молекулярных веществ выдыхаемого воздуха, соответствующих им спектров и состоянием организма. В то же время остается нерешенной проблема поглощения излучения водяным паром, содержание которого в воздухе на порядки выше, чем других газов. Именно поэтому ученым требуется «сдвинуться» в дальний ИК-диапазон, где существуют «безводные окна», которые позволят более точно исследовать интересующие газы.

Целью настоящей работы является поиск технического решения для получения перестраиваемого в спектральном диапазоне 3–14 мкм источника излучения на базе комплекса из кристаллов LiGaS_2 (LGS) и LiGaTe_2 (LGT). В ходе работ было найдено техническое решение, позволяющее получить перестраиваемый в спектральном диапазоне 3–8 мкм источник излучения на базе кристалла LiGaS_2 (LGS). Для демонстрации возможности использования подобного источника излучения при решении задач газового анализа записан спектр поглощения ацетилена, взятый в качестве модельного газа.

Для демонстрации возможности использования подобного источника излучения при решении задач оценки динамики изменения содержания молекулярных зондов с флуоресцентным красителем ИК-диапазона в организме человека в дальнейшем будут зарегистрированы спектры поглощения конъюгатов человеческого сывороточного альбумина и красителей ближнего ИК-диапазона, используемых для флуоресцентной томографии глиобластомы человека на мышах.

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ 18-32-00499.

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

**Изучение воздействия различных индукторов на кровь
методом импедансометрии**

В. А. Гусев

ООО «МБС-Технология», Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Определение характеристик крови человека имеет колоссальное значение в медицине. Какие изменения происходят в крови при воздействии на нее различными индукторами агрегации тромбоцитов, а также при лизировании и других процессах с точки зрения электрохимии? Метод, представленный в данной работе, позволяет ответить на поставленные вопросы.

Принцип данного метода заключается в регистрации изменения импеданса в процессе реакции крови с каким-либо индуктором агрегации: АДФ или ристомидином. Прибор для определения свойств крови был построен на основе схемы высокоинтегрированного однокристалльного сканера импеданса AD5933, представляющего собой прецизионную систему измерения импеданса. Разработана конструкция картриджей для данного прибора, в которые введены контрольные вещества (индукторы агрегации, детергенты и проч.). Прибор регистрирует изменение импеданса и детектирует либо положительный результат – реакцию агрегации тромбоцитов, либо отрицательный – отсутствие связывания.

Исследована возможность детекции различных процессов в крови при разных частотах переменного электрического тока, температурах для разных конструкций картриджей (форм-фактор ячеек, геометрические размеры каналов и т. п.).

Разработанный метод, основанный на прецизионном измерении импеданса, является очень чувствительным, позволяет регистрировать изменения в несколько процентов и требует очень малых затрат реактивов без потери точности.

Научные руководители – А. В. Тронин,
канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов

Анализ характеристик диффузии воды в тканях головного мозга

К. В. Журавлёва

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Целью данной работы является проверка предположения о диагностической значимости характеристик диффузии, получаемых методом диффузионно-куртозисной МРТ (ДК МРТ). ДК МРТ включает в себя получение томографических изображений, контраст которых определяется скоростью диффузии в выбранном направлении, и их последующую обработку с получением карт характеристик диффузии. Метод чувствителен к различным нарушениям структуры биологических тканей, что делает его перспективным для ранней диагностики заболеваний головного мозга.

В качестве испытуемых были выбраны здоровые люди и люди, ранее перенесшие инсульт. Для получения диффузионно-взвешенных изображений использовался томограф Philips Ingenia 3.0 T. Измерения проводились для трех b -факторов: 0, 1500, 2500 [с/мм²] и 32 направлений дополнительных диффузионных градиентов поля. Обработка полученных данных проводилась в программе Diffusion Kurtosis Estimator (DKE), которая позволяет получать диффузионные карты из диффузионно-взвешенных изображений.

Для проведения сегментации – отнесения каждой области изображения к определенному классу ткани (белое вещество, серое вещество, спинномозговая жидкость, глиоз) –, были получены томографические изображения методами FLAIR и MPRAGE. Сегментация изображений проводилась с использованием программного обеспечения SPM12. Измерение характеристик для глиоза проводилось вручную в программе ImageJ.

На данном этапе работы были получены результаты для четырех испытуемых с инсультом и одного здорового испытуемого. Различия в характеристиках диффузии для разных тканей мозга согласуются с различиями в строении этих тканей. Для получения достоверной статистики планируется привлечение большего количества испытуемых. С целью оценки достоверности результатов выполнены измерения характеристик диффузии чистой воды. Согласно полученным данным, погрешность измерения среднего измеряемого коэффициента диффузии $< 2\%$, средний эксцесс $0,04 \pm 0,03$.

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

**Влияние фосфорилгуанидиновых модификаций
на формирование самоограниченных комплексов
нуклеиновых кислот**

А. А. Замосковцева

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии и фундаментальной медицины

Нуклеиновые кислоты (НК) способны образовывать различные вторичные структуры, в том числе самоограниченные комплексы – замкнутые циклические структуры. Такие конструкции могут найти применение в качестве элементов биологически активных конструкций, например, в антисенс- и антиген-терапии. Проведенные предварительные исследования показали преимущество такого рода комплексов над другими, в том числе дуплексами. Вместе с тем, существует ряд препятствий связанных с применением искусственных терапевтических агентов в физиологических условиях. Например, известно, что заряженные олигонуклеотиды практически не могут пассивно проникать через клеточные мембраны; внутри клетки присутствуют нуклеазы – ферменты, расщепляющие нуклеиновые кислоты. Для увеличения эффективности функционирования комплексов нуклеиновых кислот в их структуру вводят модификации. В данной работе использованы производные нуклеиновых кислот, несущие фосфорилгуанидиновые модификации.

Целью работы является исследование эффективности формирования самоограниченных комплексов олигонуклеотидами, содержащими фосфорилгуанидиновые модификации. Методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала показано формирование самоограниченных структур и раскрытых структур с «липкими» концами. Исследование подвижности комплексов НК методом задержки в геле в неденатурирующих условиях подтвердило формирование самоограниченных комплексов. Методом атомно-силовой микроскопии подтверждена формируемая геометрия комплексов. Исследование методом кругового дихроизма позволило охарактеризовать вторичную структуру нативных и модифицированных комплексов. Результаты работы могут быть применены к созданию биологически активных соединений на основе нуклеиновых кислот.

Работа поддержана ПФНИ ГАН на 2017–2020 гг. (VI.62.1.4, 0309-2016-0004).

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

Структура, эффективность формирования и применение самоограниченных комплексов нуклеиновых кислот – триплексов

В. А. Кизилова

Новосибирский государственный университет

Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН

Олигонуклеотиды могут быть использованы для воздействия на живые системы путем влияния на различные молекулярно-биологические процессы. Эффективность взаимодействия олигонуклеотидов с биологическими объектами определяется нуклеотидной последовательностью, наличием химических модификаций и вторичной и третичной структуры олигомеров и их комплексов. Нами обнаружен новый тип вторичной структуры нуклеиновых кислот, которые состоят из одного, двух или большего количества олигонуклеотидов и представляют собой два параллельно расположенных дуплексных фрагмента. Мы предположили, что они могут иметь биологическую роль и быть использованы в качестве элементов биологически активных соединений. Например, выступать в качестве элементов искусственных рибонуклеаз – структур, способных эффективно расщеплять фосфодиэфирные связи в молекулах РНК. Целью работы было исследовать физико-химические свойства таких структур и определить возможность их использования в качестве элементов искусственных рибонуклеаз.

Для доказательства формирования таких структур построена теоретическая физико-химическая модель и проведена ее экспериментальная проверка. Исследовано влияние элементов структуры олигонуклеотидов на эффективность образования триплексов. Методами задержки в геле, атомно-силовой микроскопии и методами молекулярной динамики установлено, что эффективность формирования самоограниченных комплексов зависит от природы и размера линкеров, соединяющих дуплексные фрагменты, а также от размера дуплексных участков. Для проверки возможности использования данных структур в качестве искусственных рибонуклеаз исследовали кинетику гидролиза олигорибонуклеотидов в структуре самоограниченного комплекса в растворе 2 М имидазола. Было показано увеличение скорости расщепления одноцепочечного участка РНК в структуре комплекса в сравнении с одноцепочечным олигонуклеотидом.

Результаты показывают перспективность применения триплексов для создания высокоэффективных и специфичных РНК-направленных агентов.

Работа поддержана ПФНИ ГАН на 2017–2020 гг. (VI.62.1.4, 0309-2016-0004).

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

**Исследование влияния глицирризиновой кислоты
на молекулярную подвижность липидов
в одно- и многокомпонентных мембранах методом ЯМР**

П. А. Кононова

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

Поскольку большинство используемых лекарственных препаратов обладают низкой растворимостью и биодоступностью, актуальна проблема доставки лекарственных соединений. Глицирризиновая кислота (ГК), благодаря своей амфифильности и биологической активности, является перспективным агентом для доставки лекарств. Цель работы – изучить процесс взаимодействия ГК с мембраной.

Исследование молекулярной подвижности проводилось с помощью метода ядерного магнитного резонанса на модели однослойных липосом. Этот метод позволяет наблюдать за различными функциональными группами липидов и рассчитать времена релаксации. Времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации очень чувствительны к изменению подвижности молекул, поэтому по их изменению можно судить об изменениях в молекулярной организации липидного бислоя.

В экспериментах исследовалась зависимость подвижности липидов от концентрации ГК и роль протонирования ГК при взаимодействии с мембраной в бислоях различного состава (DOPC, POPC, DPPC, смесь фосфолипидов). Наблюдалось уменьшение времен релаксации при увеличении концентрации ГК, что свидетельствует об уменьшении молекулярной подвижности. Установлено, что ГК в мицеллярной форме оказывает более сильное воздействие на подвижность липидов POPC, чем в немиецеллярной. Для DOPC наблюдается влияние только на подвижность полярных голов внешнего полуслоя липосомы. Для POPC значительный эффект проявляется для всех функциональных групп липидов. Это может быть связано с образованием ассоциатов ГК в мембране POPC и отсутствием стабильных ассоциатов в мембране DOPC.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук О. Ю. Селютина

Особенности концентрирования вирионов для электронно-микроскопических исследований с использованием наночистот

В. Е. Кошман

Новосибирский государственный университет

Концентрировать и очищать вирус необходимо для повышения качества его визуализации методом электронной микроскопии. Концентрирование и очистка выполняются пропусканием суспензии с исследуемым вирусом через специальные фильтры, с порами, соизмеримыми с размерами вирионов, с применением центрифугирования.

Целью и задачами данной научной работы является исследование особенностей концентрирования вирионов посредством наночистот, изучение зависимости качества очистки вируса от морфологии фильтров, увеличение точности определения физического титра вирионов в растворе. Знание вирусного титра важно и актуально в вирусологии в связи с тем, что он пропорционален инфекционности.

Для реализации поставленной цели были проведены эксперименты с растворами вирусов в нескольких концентрациях и с набором наночистот с разной морфологией. Визуализация вируса осуществлялась посредством электронной трансмиссионной микроскопии с помощью метода негативного контрастирования. В роли контрастирующего вещества использовались тяжелые металлы, в частности, было применено неорганическое соединение ацетат уранила. Исследования вирионов осуществлялись при помощи электронного микроскопа Jeol JEM 1400, обладающего высокими рабочими характеристиками и высококонтрастной электронной оптикой и имеющего максимальное ускоряющее напряжение 120 кВ.

Методика очищения и концентрирования вирионов была изучена и оптимизирована, что позволило увеличить точность определения физического титра раствора с вирусом и повысить качество визуализации вирионов.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Б. Н. Зайцев

Оценка димеризации глюкокортикоидных и минералокортикоидных рецепторов методом FRET

Т. А. Лагунов

Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Глюкокортикоидные гормоны вырабатываются в организме человека при стрессе или получении физической травмы, притупляя чувство боли и уменьшая стресс. На клеточном уровне глюкокортикоидные гормоны взаимодействуют с глюкокортикоидными рецепторами (GR) внутри клетки, вследствие чего GR димеризуются, образуя комплексы по два, и транспортируются в ядро клетки, влияя на транскрипцию определенных генов, содержащих респонсивные элементы в своих промоторах. Помимо GR, средство к этим лигандам имеют и минералокортикоидные рецепторы (MR), которые также димеризуются, причем образуются как гомодимеры (GR-GR, MR-MR), так и гетеродимеры (GR-MR). Для оценки количества образующихся димеров удобно использовать метод флуоресцентного резонансного переноса энергии (FRET).

Метод FRET используется для выявления взаимодействий между белками путем пришивания к ним флуоресцирующих белков с перекрывающимися спектрами испускания (донора) и поглощения (акцептора). FRET является безызлучательным методом переноса энергии, эффективность которого обратно пропорциональна расстоянию между белками, возведенному в шестую степень, так что между невзаимодействующими белками такого эффекта не возникает.

В работе использовались следующие мутанты флуоресцирующего белка GFP: mCerulean (донор) и mVenus (акцептор). На основании имеющейся информации о параметрах этих белков была решена задача количественной оценки числа димеров в клетке. Используя полученную теорию, была произведена оценка димеризации GR- и MR-рецепторов в живых клетках PC12.

Научный руководитель – канд. биол. наук Д. А. Ланшаков

Одновременная регистрация ЭЭГ и функциональной МРТ данных

С. Б. Муравлёв

Новосибирский государственный университет

В последнее время быстрыми темпами развиваются различные методы нейровизуализации. Сейчас особенно востребованными являются методы динамической нейровизуализации. Совмещая преимущества методов регистрации биоэлектрической активности (ЭЭГ) и методов функциональной магнитно-резонансной томографии (фМРТ), можно определить точную пространственную локализацию и зарегистрировать временную динамику нейрофизиологических процессов в головном мозге. ЭЭГ позволяет определить временную динамику процесса в миллисекундном разрешении, а решение обратной задачи ЭЭГ по поиску источников дает множество предположительных точечных пространственных положений источников активности. фМРТ, благодаря хорошей пространственной точности, позволяет выбрать наиболее вероятные источники.

Целью работы является проведение синхронизированной одновременной регистрации ЭЭГ и фМРТ данных для определения точных пространственных источников активности в головном мозге. Был проведен сбор данных, удаление шумов и артефактов, возникающих при одновременном использовании двух методов, а также совместный анализ двух наборов данных. Для очистки шумов в фМРТ данных использовался метод *Retroicor*. Для обнаружения начала артефакта сканера в данных ЭЭГ использовался градиентный метод. Далее для расчета шаблона артефакта сканера и его удаления применялся метод скользящего среднего. Для корреляции наборов данных использовался метод совместного анализа временных независимых компонент для ЭЭГ и фМРТ. Данная стратегия анализа отличается от предыдущих тем, что объединенный набор данных анализируется одновременно, а не последовательно.

Точное пространственное определение источников активности головного мозга и сопутствующий анализ динамической изменчивости конфигурации функциональной сети режима работы мозга по умолчанию (*Default Mode Network*) позволяют оптимизировать стратегии терапии некоторых заболеваний, например, оперативно контролировать ответ на терапию при лечении депрессии.

Научный руководитель – канд. биол. наук И. В. Брак

Технология Ленгмюра – Блоджетт на биосенсоре КНИ-транзистора

Д. С. Оскоро, Н. А. Филатова

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

В последние годы количество отраслей использования биосенсоров возросло, благодаря их универсальности, высокой чувствительности и селективности. В медицинских целях с помощью биосенсора удобно выполнять измерения в случае антител ввиду их специфичности. Быстрое взаимодействие антигенов и антител является важным направлением диагностики инфекционного процесса. В связи с этим актуальна разработка небольших, быстрых и чувствительных систем индикации. Основой такой системы индикации может послужить электронный чип с массивом сенсорных элементов, устройством для транспортировки образца и встроенной схемой управления, такой как нанопроволочный биосенсор. В качестве сенсоров в нем используется нанопроволока, сформированная на основе тончайших слоев кремния на изоляторе (КНИ) толщиной до десятка нанометров.

Целью работы является нахождение метода для увеличения чувствительности КНИ-нанопроволочного биосенсора.

Закрепление биологически активных молекул антител на твердых субстратах лежит в основе создания многих биосенсоров. Упорядоченное распределение молекул увеличивает вероятность процесса взаимодействия антиген антитело. В результате изучения и сравнения технологий создания мономолекулярных пленок установлено, что наиболее оптимальной является технология Ленгмюра – Блоджетт.

Дальнейшей целью работы является экспериментальное подтверждение возможности применения технологии Ленгмюра – Блоджетт на биосенсоре КНИ-транзистора.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, проект №18-29-02091\18.

Научный руководитель – д-р техн. наук В. М. Генералов

Локализация источников биоэлектрической активности сетей покоя методом beamformer

А. Д. Пичуев

Новосибирский государственный университет
Институт физиологии и фундаментальной медицины

В данное время существует множество методов локализации источников биоэлектрической активности головного мозга, имеющих свои преимущества и недостатки. Одним из перспективных методов решения обратной задачи ЭЭГ является локализация методом beamformer, в основе которого лежит принцип линейно ограниченной минимальной дисперсии.

Целью работы является локализации положения сетей покоя, используя выбранный метод. С дальнейшим анализом корреляции с различными участками мозга в разных частотных диапазонах, построение карт связности для реконструкции функциональных сетей головного мозга, например, сети режима работы мозга по умолчанию (Default Mode Network – DMN)

Был проведен сбор данных ЭЭГ здоровых испытуемых в состоянии физиологического покоя, проведена предобработка полученных данных с дальнейшим удалением артефактов. Для удаления артефактов использовался анализ независимых компонент.

Конфигурация сети режима работы мозга по умолчанию (DMN) позволяют оптимизировать стратегии терапии некоторых заболеваний, например, депрессии, а также отслеживать изменения состояния человека при нейродегенеративных заболеваниях.

Научный руководитель – канд. биол. наук И. В. Брак

Использование синхротронного излучения ускорительного комплекса ВЭПП-4М для моделирования радиотерапии в экспериментах с животными

М. О. Политко, А. И. Прокаева, А. Ю. Цидулко

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

Новосибирский государственный университет

Институт молекулярной биологии и биофизики ФИЦ ФТМ, Новосибирск

В данный момент радиотерапия является необходимым общепринятым методом лечения онкологических заболеваний. В случае глиобластомы – злокачественной агрессивной опухоли головного мозга – применяется адьювантная радиохимиотерапия. Однако эффективность существующей схемы лечения остается недостаточной, а заболевание – неизлечимым. Для изучения побочных эффектов радиотерапии на выживаемость пациентов требуется проведение экспериментов по облучению животных на клинических или подобных им источниках излучения. Целью данной работы является исследование применимости синхротронного излучения ускорительного комплекса ВЭПП-4М (ИЯФ СО РАН) для моделирования клинической радиотерапии в экспериментах с животными *in vivo*.

Стандартным режимом лечения глиобластомы является схема, включающая в себя 30 сеансов облучения опухоли пациента в суммарной дозе 60 Гр. Для облучения головного мозга мышей линии C57BL/6 нами была подобрана доза 7 Гр, облучение усыпленных животных проводили на оборудовании ИЯФ СО РАН, контроль дозы осуществляли с использованием дозиметрической пленки Gafchromic EBТ3, точность дозы облучения составляла 20 %. Морфологию ткани головного мозга экспериментальных животных и экспрессию генов, кодирующих основные внеклеточные компоненты ткани головного мозга (протеогликаны), определяли через 17 и 40 часов после облучения. Было показано, что подобранная доза 7 Гр не вызывает очевидных изменений в морфологии ткани головного мозга, но при этом влияет на уровень экспрессии протеогликанов в коре и подкорке головного мозга (снижение и увеличение, соответственно).

Таким образом, показана возможность применения ускорительного комплекса ВЭПП-4М ИЯФ СО РАН для облучения экспериментальных животных терапевтическими дозами синхротронного излучения.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ (проект № 18-29-01036/18), поддержано стипендией Президента Российской Федерации для молодых ученых (SP-5435.2018.4).

Научные руководители – д-р биол. наук Э. В. Григорьева,
канд. физ.-мат. наук К. Э. Купер

**Исследование кинетики связывания лигандов
в многорецепторной системе методом проточной цитометрии**

А. А. Свинцова

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

Исследование лиганд-рецепторного взаимодействия широко используется в иммунологии, клеточной и молекулярной биологии. Актуальностью данной работы является проблема определения иммунного статуса человека. В литературе часто встречаются результаты исследований, которые нельзя воспроизвести из-за того, что калибровки измерений проходят с материалами от разных производителей. К тому же сейчас иммунный статус определяют по количеству клеток в популяциях крови. Для выделения субпопуляций используют специальные реагенты, которые влияют на характеристики клеток, что отражается на конечном результате. Поэтому нужно искать другие способы исследования и определения иммунного статуса.

Проточная цитометрия хорошо зарекомендовала себя, так как позволяет исследовать связывание лигандов с рецепторами на поверхности клеток, используя многоцветный анализ. В нашей лаборатории был разработан бескалибровочный метод определения числа рецепторов на поверхности клеток, который основан на эволюции цитограмм во времени.

Целью данной работы является исследование кинетик связывания лигандов с рецепторами и усовершенствование одноцветного анализа до системы с несколькими видами рецепторов. В процессе работы были учтены автофлуоресценция клеток, возможные нестабильности работы лазеров, перекрытие спектров излучений.

Метод был опробован на двух видах антител для проверки теории. Результаты для смеси совпали с теми, что получили для каждого антитела по отдельности. Данный метод был применен для одновременного исследования числа рецепторов CD14, CD16, CD45, HLA-DR в клинических исследованиях на лейкоцитарных клетках 20 здоровых доноров и 20 больных атеросклерозом. Было посчитано среднее число рецепторов на поверхности клетки.

Разработанный метод позволяет определять не только количество рецепторов на поверхности клеток, но и константы скоростей реакций без калибровки в условиях малых концентраций антител.

Научный руководитель – И. В. Хало

УФ-А-индуцированные повреждения белков хрусталика

С. А. Сеницын

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Прямое поглощение света белками ($\lambda < 315$ нм), как правило, приводит к необратимым изменениям в их структуре, включая их агрегацию и потерю растворимости. Недавно было показано, что излучение УФ-А-диапазона (315–400 нм) вносит вклад в общую модификацию белков посредством радикальных реакций между хромофорами живых тканей и аминокислотными остатками белков (триптофан и тирозин). Эти реакции важны для ткани хрусталика глаза, поскольку агрегация и потеря водорастворимости белков приводит к образованию светорассеивающих областей (катаракта). В настоящее время детальные механизмы этих процессов остаются малоизученными.

Целью работы было исследование устойчивости к фотоиндуцированной агрегации белков хрусталика (кристаллинов). Белки животного происхождения были подвергнуты анаэробному УФ-А-фотолизу в присутствии хромофора хрусталика – кинуреновой кислоты. Анализ модификаций белков был проведен методами гель-электрофореза и масс-спектрометрии.

По способности образовывать динамические мультимерные комплексы в водных растворах белки хрусталика разделяют на семейства: α -, β - и γ -кристаллины – мультимеры, димеры и мономеры соответственно. Относительная устойчивость к УФ-А индуцированным модификациям для γ -кристаллинов уменьшается в ряду $\gamma S > \gamma A > \gamma B > \gamma D > \gamma F > \gamma C$; для β -кристаллинов: $\beta B2 > \beta B3 > \beta A2 > \beta B1$; для α -кристаллинов разница не существенна. Скорость распада белков коррелирует с наличием и доступностью остатков триптофана, тирозина и цистеина для атаки триплетными состояниями кинуреновой кислоты.

Устойчивость к фотоиндуцированной агрегации возрастает в следующем ряду: γ -, β - и α -кристаллины. На основании этих данных можно предположить, что образование мультимерных комплексов белков направляет фотоиндуцированные радикальные реакции по пути модификации мономерных форм, нежели способствует образованию ковалентных сшивок между белками. Высокие концентрации белков в хрусталике могут рассматриваться в качестве защитного механизма, препятствующего широкой агрегации белков внутри ткани.

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

Исследование динамики кальциевой сигнализации в одиночных тромбоцитах

Д. В. Спирёва

Новосибирский государственный университет

На сегодняшний день необходимо изучать активацию тромбоцитов, так как этот процесс дает большой вклад в развитие сердечно-сосудистых заболеваний. Чтобы понять механизмы и закономерности активации, необходимы методы ее индукции и регистрации у одиночных клеток. На сегодняшний день существуют работы по изучению активации одиночных тромбоцитов, прикрепленных к субстрату. Цель данного исследования – исследовать активацию тромбоцитов, свободно плавающих в суспензии.

Разработан метод наблюдения динамики внутриклеточной концентрации кальция у одиночных плавающих тромбоцитов. Активацию вызывали вспышками УФ-излучения с помощью фототабильного аналога эpineфрина (Caged Epinephrine). Основная идея представленного подхода заключается в том, что Caged Epinephrine превращается под действием излучения в обычный адреналин и вызывает активацию тромбоцитов. При этом отсутствуют гидродинамические потоки, как при добавлении обычного адреналина в суспензию.

Наблюдение производили на флуоресцентном микроскопе с использованием кальциевого зонда Fluo-4. Динамика флуоресценции регистрировалась с помощью камеры AxioCam 503 Mono со скоростью три кадра в секунду. Интенсивность флуоресценции плавающих клеток отслеживали с помощью плагина ImageJ TrackMate [1].

Измерения показали резкий всплеск флуоресценции у плавающих клеток при активации. Также исследование показало различие в реакциях, прикрепленных к поверхности и плавающих клеток на активатор.

1. Tinevez, J. Y., Perry N., Schindelin J. et al. TrackMate: An open and extensible platform for single-particle tracking. 2017. № 1(15). P. 80–90.

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

Использование усовершенствованной оптической модели тромбоцита для решения задач светорассеяния

И. Г. Чеблакова

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

Тромбоциты крови играют важную роль в таких процессах, как тромбоз, воспаление, кровоизлияние. Основной функцией тромбоцитов является образование тромбоцитарной пробки в ответ на повреждение стенки сосуда. Это достигается путем активации тромбоцитов. Каркас тромбоцитов состоит из кольца микротрубочек, которое в спокойном состоянии растягивает клетку и делает ее дисковидной, а при активации переходит в трехмерную свернутую структуру. Знание о форме тромбоцитов может помочь адекватно диагностировать заболевания кровеносной системы.

Одним из возможных методов определения формы тромбоцита является измерение сигнала светорассеяния. Сравнение экспериментальных сигналов светорассеяния с теоретическими позволяет получить параметры формы тромбоцита. На текущий момент самой распространенной моделью тромбоцита является сплюснутый сфероид. Из-за изменчивости кривизны кольца микротрубочек сфероид (модель с постоянной кривизной) не соответствует биологической форме тромбоцитов. Поэтому от самой упрощенной модели в этой работе было принято решение отказаться.

Для получения теоретических сигналов реальной формы тромбоцита мы использовали специальные программные пакеты, в которых задается объем и кривизна кольца микротрубочек, а после рассчитывается поверхность минимальной энергии, соответствующая мембране тромбоцита. Данная модель является гиперпараметризованной, поэтому она также была упрощена. Новая модель приближена к биологической форме тромбоцита, но при этом позволяет определить параметры частицы.

В данной работе показана применимость разных теоретических моделей: сплюснутого сфероида и усредненной биологической модели, а также представлена экспериментальная применимость.

1. Moskalensky A. E. et al. Accurate measurement of volume and shape of resting and activated blood platelets from light scattering // Journal of Biomedical Optics. 2013. № 1 (18). P. 17001.

Научный руководитель – А. Л. Литвиненко

**Исследование влияния нуклеотидного состава
фосфорилгуанидиниевых олигонуклеотидов
на их гибридизационные свойства**

А. С. Шторк

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии и фундаментальной медицины

Фосфорилгуанидиновые олигонуклеотиды (ФГО), разработанные в ИХБФМ СО РАН, обладают высоким потенциалом для использования в молекулярно-биологических исследованиях в качестве терапевтических агентов и в системах геномной диагностики. Наиболее важными свойствами ФГО являются способность специфично связываться с комплементарными последовательностями нуклеиновых кислот, устойчивость к действию нуклеаз, а также умение проникать внутрь клеток. Вместе с тем их свойства изучены недостаточно.

Цель работы – исследовать влияния нуклеотидного состава, числа и положения фосфорилгуанидиниевых модификаций на гибридизационные свойства и структуру ФГО и их дуплексов с ДНК при различных ионных силах раствора. В качестве модельных были выбраны следующие комплексы нативных и модифицированных олигонуклеотидов: d(AAGAGAGAGG) / d(CCTCTCTCTT) и d(GAAAAAAAAAAC) / d(GTTTTTTTTTTC). Методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала исследована термическая стабильность комплементарных комплексов при различных концентрациях олигонуклеотидов и ионной силе раствора. Термодинамические параметры формирования комплексов были определены методом оптимизации кривых плавления согласно модели двух состояний, а также концентрационным методом. Для установления природы наблюдаемого эффекта охарактеризована структура олигонуклеотидов и их комплексов методом спектроскопии кругового дихроизма. Было показано, что термодинамическая стабильность комплексов при различных ионных силах раствора значительно зависит от нуклеотидного состава цепи, в которую введена модификация.

Полученные результаты будут использованы для дизайна структуры комплексов олигонуклеотидов, содержащих фосфорилгуанидиновую модификацию.

Работа поддержана ПФНИ ГАН на 2017–2020 гг. (VI.62.1.4, 0309-2016-0004) и РНФ (18-14-00357).

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

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 531

Выбор заполнителя торкретбетона для ремонтных работ в условиях Севера

И. Н. Андреев, П. В. Васильев, Д. В. Васильева, А. Д. Егорова
Северо-Восточный федеральный университет
им. М. К. Аммосова, Якутск

В Республике Саха (Якутия) все здания и сооружения возводятся на свайных фундаментах, так как большая ее часть находится на вечной мерзлоте. Постепенное истечение срока службы объектов требует за собой проведение работ по усилению несущих конструкции, однако сложность и дороговизна усиления несущих конструкции сильно затрудняют работу по обеспечению эксплуатируемых объектов необходимым обслуживанием как по времени проводимых работ, так и по их качеству. Прилагая к этому особые климатические условия, влияющие на все стадии подобных работ, можно объяснить высокий процент ветхого жилья.

Коррозия конструкций происходит вследствие воздействия деятельного слоя грунтов (межсезонное оттаивание на глубину двух метров) и суровых климатических условий. Вывод – необходимо подобрать менее затратный, но не менее эффективный метод восстановления несущих конструкции. Для этого хорошо подходит технология торкретирования.

Торкретирование – метод бетонных работ, при котором бетонная смесь послойно наносится на бетонируемую поверхность под давлением сжатого воздуха (Большая Советская Энциклопедия. М., 1977. Т. 26).

Отличие торкретирования от оштукатуривания, которое также нередко производится механизированным способом, – высокая степень уплотнения за счет использования специального оборудования и сжатого воздуха давлением не менее 4 атм и объемом не менее 3 м³/мин. Также различают торкретбетон (максимальный диаметр заполнителя до 10 мм) и шприц-бетон или набрызг-бетон (фракция более 10 мм).

По сравнению с ручным нанесением торкретирование позволяет получить слой с такими характеристиками, как:

- высокая плотность;
- высокая механическая прочность, в том числе сразу после нанесения;
- низкое водопоглощение, высокая водонепроницаемость и морозостойкость;
- высокий уровень адгезии (сцепления) к различным основаниям;
- высокая производительность работ, снижение себестоимости при больших объемах;

- долговечность;
- повышенная стойкость к химическому, огневому и физическому воздействиям.

А так как актуальность использования местного сырья в строительстве все возрастает, на стадии математического планирования решено было сделать половину образцов с горным песком ближайшего месторождения в качестве мелкого заполнителя для изготавливаемых растворных составов. Было произведено сравнение речного и горного песка по следующим параметрам:

- модуль крупности;
- зерновой состав;
- насыпная плотность;
- химический состав.

Затем был произведен отсев мелкой фракции горного песка (были отделены глинистые и пылеватые остатки на дне, меньше сита номер 0,14), рассчитаны два основных состава. Образцы балочки 4x4x16 набирали прочность во влажной среде в течение 28 и 56 суток, затем прошли испытание на прочность при изгибе и прочность при сжатии в возрасте 67 и 79 суток. Первичные результаты приведены в таблице.

Образцы составов с речным и горным песком в качестве заполнителей были сравнены по прочности для выявления наилучшего состава для использования в качестве торкрет-раствора для укрепления фундаментов.

Физико-механические свойства мелкозернистого бетона

Вид заполнителя	Средняя плотность, кг/м ³	Прочность при сжатии, МПа, в возрасте, сут.		Примечания
		28	56	
Речной песок	1983,5	11,9	13,4	Месторождение: пойма реки Лены, Мк = 1,2
Горный песок	1414,0	11,8	13,1	Месторождение: Кильдямское, Мк = 2,2

Анализ полученных результатов показывает, что мелкозернистый бетон на основе речного песка имеет большую среднюю плотность по сравнению с составом на горном песке (на 29 %). Это можно объяснить тем, что модуль крупности речного песка меньше, чем горного, вследствие чего упаковка и плотность бетона увеличиваются. При этом можно предположить, что долговечность такого бетона будет больше, несмотря на то, что их прочностные показатели практически одинаковы. Для дальнейших исследований можно рекомендовать речной песок.

Научный руководитель – д-р техн. наук А. Е. Местников

**Исследование оптических свойств наночастиц диоксида церия
для биомедицинского применения**

И. Н. Бажукова, Е. О. Бакшеева, В. В. Касьянова,
М. А. Машковцев, А. В. Мышкина

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

Поиск и исследование наноматериалов, которые потенциально могут быть использованы для решения различных биомедицинских задач, являются одной из актуальных задач современных нанотехнологий. Все больший интерес среди ученых в данной области привлекает нанокристаллический диоксид церия. Биологическая активность наночастиц CeO_2 обусловлена присущей им высокой кислородной нестехиометрии [1].

Важной проблемой при синтезе наночастиц для биомедицинского применения является токсичность получаемых нанопорошков. В данной работе наночастицы CeO_2 были синтезированы с использованием в качестве стабилизатора нетоксичного биосовместимого мальтодекстрина, что делает возможным использование их в медицине. Целью данной работы является исследование оптических свойств полученных наночастиц CeO_2 , а также изучение проявляемой ими ферментативной активности.

Спектр оптического поглощения суспензии нанопорошка CeO_2 был измерен с помощью спектрофотометра Helios Alpha. Широкая интенсивная полоса поглощения, наблюдаемая в области 200–450 нм, может быть обусловлена фотоиндуцированными оптическими переходами с переносом заряда с $2p$ -орбитали кислорода на незаполненную $4f$ -орбиталь иона Ce^{4+} [2]. Методом Тауца была рассчитана ширина запрещенной зоны нанокристалла.

Исследование антиоксидантной активности синтезированных наночастиц CeO_2 было проведено с использованием в качестве окислителя пероксида водорода H_2O_2 (3 %). Обнаружено, что после добавления H_2O_2 оптическое поглощение суспензии наночастиц в области 300–450 нм увеличивается, что, вероятно, связано с образованием ионов Ce^{4+} при взаимодействии H_2O_2 с ионами Ce^{3+} .

1. Sun C., Li H., Chen L. Nanostructured ceria-based materials: synthesis, properties, and applications // Energy Environ. Sci. 2012. Vol. 5(9). P. 8475–8505.

2. Medalia A., Byrne B. Spectrophotometric determination of cerium (IV) // Anal. Chem. 1951. Vol. 23. P. 453.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доц. И. Н. Бажукова

Изучение $[\text{NiEn}_3]\text{MoO}_4$ на станции высокого разрешения СИ

П. С. Бунеева

Новосибирский государственный университет

Биметаллические комплексные соли рассматриваются как возможные предшественники для синтеза металлических сплавов, а также сложных карбидных и оксидных материалов в нанокристаллическом состоянии. При переходе к более сложным солям (твердым растворам, содержащим три и более металлов) требуется контролировать состав, что удобно делать по параметрам элементарной ячейки (ПЭЯ). В геометрии Брэгга – Брентано эта точность ограничена полушириной дифракционных отражений. При больших и близких между собой значениях ПЭЯ отражения начинают перекрываться и часто возникает ситуация, когда невозможно выделить достаточно большое количество одиночных отражений для применения метода наименьших квадратов. При использовании синхротронного излучения ширина дифракционных отражений существенно меньше, а их интенсивность гораздо выше.

Поликристаллический образец $[\text{NiEn}_3]\text{MoO}_4$ предварительно изучен на лабораторном дифрактометре SHIMADZU 7000 (схема Брэгга – Брентано, $\text{CuK}\alpha$ -излучение, внешний эталон SRM 640). Полуширины дифракционных пиков (FWHM) $\sim 0,2^\circ$. На полученной дифрактограмме удалось выбрать лишь 11 одиночных линий в интервале от 8,00 до 2,582 Å. По их межплоскостным расстояниям методом наименьших квадратов были определены ПЭЯ: $a = 9,2243(7)$, $c = 9,9532(2)$ Å, пр. гр. $P-31c$, $Z = 2$.

Дифрактограмма высокого разрешения была получена на станции ID22 ($\lambda = 0,354395$ Å, внешний эталон Si640). Существенное уменьшение FWHM (до $0,05^\circ$) позволило увеличить число одиночных рефлексов до 24 и расширить область d до 1,562 Å. Методом наименьших квадратов было проведено уточнение ПЭЯ: $a = 9,2440(5)$, $c = 9,9607(6)$ Å, пр. гр. $P-31c$, $Z = 2$. Высокая интенсивность первичного пучка СИ позволила обнаружить в образце микропримеси: $\text{Na}_2\text{MoO}_4(\text{H}_2\text{O})_2$, $\text{NiEn}_3(\text{NO}_3)_2$ и NaNO_3 .

Автор выражает благодарность канд. хим. наук В. Ю. Комарову за проведение эксперимента на станции ID22 ESRF.

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

**Измерение температуры поверхности вольфрама
во время импульсного нагрева лазерным излучением**

Л. А. Вайгель

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

Импульсная плазменная нагрузка в термоядерном реакторе приводит к импульсному нагреву поверхности стенки дивертора. Из-за неоднородного распределения температуры в материале стенки появляются упругие и пластические деформации и механические напряжения. Это приводит к увеличению накопления водорода, механическому разрушению конструкций и другим вредным для реактора факторам.

Диагностика облучаемого материала проводится методом быстрой дифрактометрии; используется рассеяние синхротронного излучения из накопителя ВЭПП-4 в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения. Динамика деформаций материала наблюдается по изменению формы и положения дифракционного пика при импульсном нагреве его поверхности лазерным излучением. Тепловая нагрузка соответствует плазменной нагрузке в термоядерном реакторе. В качестве материала для экспериментов был выбран вольфрам как один из перспективных материалов для стенок реактора.

Для нормировки измерений деформации необходимо знать распределение температуры поверхности материала. Для измерения зависимости температуры от времени нагрева разрабатывался пирометр.

Пирометр состоит из фотодиода, трансимпедансного усилителя и оптической системы, которая собирает рассеянное тепловое излучение с нагретой области на поверхности образца и направляет его на фотодиод. Также разработана система прицеливания, которая позволяет точно попадать лазером в нужную область на поверхности вольфрамового образца и сильно экономит время для подготовки к эксперименту.

При импульсном нагреве вольфрама лазерным излучением происходит смещение дифракционного пика рассеянного синхротронного излучения. Измеренная пирометром температурная зависимость позволила оценить удельное смещение дифракционного пика.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. С. Аракчеев

***In situ* дифракционные исследования
мембранного материала состава $\text{SrCo}_{0,9}\text{Ta}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$**

Б. В. Волошин

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

Нестехиометрические оксиды со структурой перовскита обладают смешанной кислород электронной проводимостью (СКЭП) за счет наличия кислородных вакансий и переходных металлов в кристаллической решетке. Это позволяет использовать СКЭП оксиды в качестве кислородопроницаемых мембран и электродов в твердооксидных топливных элементах, а эти устройства находят широкое применение в областях каталитического риформинга углеводородов и водородной энергетики.

Одним из перспективных материалов является перовскит состава $\text{SrCo}_{0,9}\text{Ta}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$ (далее SCT10), который не только обладает сравнительно высокими транспортными характеристиками, но также является стабильным в присутствии углекислого газа в окружающей среде.

Целью данной работы является нахождение зависимости параметров кристаллической решетки SCT10 от кислородной стехиометрии.

Исследования проводили на порошковом дифрактометре Bruker D8 Advance. В ходе работы образец SCT10 нагревали в термокамере, при этом подавали в реактор газовую смесь кислорода с гелием. Запись дифрактограммы осуществляли после наступления равновесия, которое определяли по отсутствию изменений в положении рефлексов. Эксперименты проводили при трех температурах и четырех составах газовой смеси. Использованные температуры – 700, 800, 900 °С. Использованные парциальные давления кислорода $p\text{O}_2$ – 0,005, 0,023, 0,11, 0,5 атм.

Уточнение параметров решетки провели методом Ритвельда с использованием программы Toras 4.2 и базы данных PDF-4.

Полученные зависимости параметров решетки от температуры, парциального давления кислорода и кислородной стехиометрии позволяют заключить, что параметр решетки a кубического перовскита SCT10 линейно возрастает с увеличением температуры и линейно убывает с увеличением парциального давления кислорода в окружающей среде.

Научный руководитель – д-р хим. наук А. П. Немудрый

**Исследование микроструктуры Ni3Al
методами просвечивающей электронной микроскопии**

С. С. Герт, Я. А. Трекова, В. Ю. Тружников
Восточно-Казахстанский государственный университет
им. С. Аманжолова, Усть-Каменогорск

Сплав Ni3Al широко известен как материал, у которого напряжение течения растет с увеличением температуры.

Цель данной работы – исследование структурных изменений в интерметаллиде Ni3Al в условиях нагрева образца методом *in situ* в просвечивающем электронном микроскопе после одноосного растяжения до разрыва. Область разрыва была подвергнута утонению методом струйной электрополировки до появления отверстия в диске, диаметром 3 мм.

После растяжения до разрыва в образцах в ПЭМ видны линии межзеренной границы, на которой сосредоточены области концентраций напряжений. Линии межзеренной границы представлены параллельными друг другу периодическими волнами пластической деформации разной длины.

Согласно работам В. Е. Панина, структурное превращение происходит при прохождении волн пластической деформации. В условиях формирования регулярной структуры имеют место градиенты давления. Градиенты давления являются основной причиной движения зон сдвиговой трансформации, т. е. зон, в пределах которых имеет место большой скачок молярной плотности вещества.

В физической мезомеханике деформируемое твердое тело рассматривается как многоуровневая нелинейная иерархически организованная система. Любое деформируемое тело следует рассматривать как тело, которое состоит из двух подсистем: трехмерного трансляционно-инвариантного кристалла и ротационных сдвигов, возникающих за счет искривления поверхностных слоев и всех внутренних границ раздела.

В зонах высокой кривизны кристаллической решетки первичной фазы обнаружено возникновение кластерных зародышей атомно-упорядоченной вторичной фазы Ni3Al. Появление регулярной атомно-упорядоченной структуры Ni3Al после растяжения на разрыв в волнах пластической деформации и дополнительного нагрева является результатом движения деформационных дефектов на разных масштабных уровнях.

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

Функциональные композитные материалы на основе полиэтилена и многослойных углеродных нанотрубок, модифицированных наночастицами Со для электромагнитных приложений

Г. В. Голубцов

Новосибирский государственный университет
Институт катализа СО РАН, Новосибирск

Разработка новых композиционных материалов на основе широко используемых полимеров и многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) является одним из перспективных направлений современного материаловедения. Добавление небольших количеств МУНТ в состав композитных материалов на основе полиэтилена позволяет существенным образом улучшить их механические и электрофизические свойства. Добавление еще одной составляющей, такой как магнитные частицы металлов, в композитный материал на стадии приготовления позволит контролируемо изменять электрофизические свойства материала за счет варьирования диэлектрических свойств МУНТ и магнитных свойств металлов. Таким образом, создание подобных «тройных композитов» открывает целый спектр возможностей по получению легких и эластичных композитных материалов, эффективно экранирующих или поглощающих электромагнитное излучение. Данная работа направлена на исследование зависимостей «строение – свойства» тройных композитных материалов на основе полиэтилена и МУНТ, модифицированных наночастицами Со.

Предложенная в работе методика получения Со/МУНТ-ПЭ-композитов за счет предварительного распределения Ti-содержащего катализатора полимеризации на поверхности Со/МУНТ позволяет получить композиты с равномерным распределением добавки в полиэтилене. Были получены композитные материалы Со/МУНТ-ПЭ с содержанием добавки (3,5–34 масс. % Со/МУНТ) около 10–15 масс. %. Общее содержание металлов в композитных материалах варьировалось с 0,33 до 3,8 масс. %. Охарактеризование Со/МУНТ-ПЭ-композитов проводили комплексом физико-химических методов: ПЭМ, *in situ* РФА, ⁵⁹Со ЯМР, ФМР, ДСК. Было показано, что тройные композитные материалы с различным содержанием и соотношением добавки (Со:МУНТ) представляют интерес для создания покрытий эффективно взаимодействующих с электромагнитным излучением.

Научный руководитель – канд. хим. наук М. А. Казакова

Исследование эффектов влияния обработки интенсивной пластической деформацией технически чистого алюминия на изменение физико-механических свойств

Д. Б. Даутбаева, А. Е. Матвеев, А. П. Хрусталеv
Томский государственный университет

В электротехнических приложениях к сплавам чистого алюминия предъявляются требования высоких показателей электропроводности и прочности. В отлитом состоянии алюминиевые сплавы обладают высокой пластичностью и низкими показателями прочности, что неприемлемо при использовании электротехнических изделий даже в нормальных условиях эксплуатации. Поэтому для повышения физико-механических свойств алюминиевые сплавы подвергают деформационной обработке, после чего в материале повышаются значения твердости, условного предела текучести, временного сопротивления и уменьшается пластичность.

Целью данной работы явилось исследование эффектов влияния обработки интенсивной пластической деформацией (ИПД) технически чистого алюминия на изменение его физико-механических свойств. В работе предложен метод обработки ИПД заготовок из технически чистого алюминия по схеме равноканального углового прессования (РКУП) [1].

Методом РКУП [2] обрабатывались заготовки из литого алюминиевого сплава. Для исследований физико-механических свойств исходного и обработанного сплавов использовали комплекс экспериментальных методов, включающих в себя измерение микротвердости по Виккерсу; одноосное растяжение плоских образцов; измерение электропроводности.

Результаты проведенных исследований показали положительное влияние ИПД на изменение физико-механических свойств. Установлено, что наибольшей электропроводностью (63 % IACS) при повышенных механических свойствах (микротвердость 54 HV, предел текучести 100 МПа, временное сопротивление 149 МПа и максимальном удлинении 10 %) обладает сплав, подвергнутый четырехкратной обработке РКУП.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-38-20081мол_a_вед.

1. Zhukov I. A., Kozulin A. A., Khrustalev et al. The impact of particle reinforcement with Al₂O₃, TiB₂, and TiC and severe plastic deformation treatment on the combination of strength and electrical conductivity of pure aluminum // *Metals*. 2019. Vol. 9(1). P. 65.

2. Krasnoyeikin V. A., Kozulin A. A., Skripnyak V. A. Detection of structural changes and mechanical properties of light alloys after severe plastic deformation // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2017. Vol. 919. P. 012012.

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

Моделирование структурных превращений при спекании бериллиевой керамики

Е. В. Захарова, Р. В. Насибуллин, А. В. Павлов, Д. Н. Сапрыкин
Восточно-Казахстанский государственный университет
им. С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан
Сибирский федеральный университет, Красноярск
Томский государственный университет

Керамика состава ($\text{BeO}+\text{TiO}_2$) используется в радиоэлектронной технике в качестве эффективных поглотителей СВЧ-излучения и в других областях современной техники.

Экспериментально обнаружено появление ферромагнетизма в бериллиевой керамике, имеющей структуру перовскита BeTiO_3 . Для объяснения причины появления обнаруженных магнитных и электрических свойств рассмотрен вариант моделирования кластерной ячейки для прослеживания структурных изменений.

Целью данной работы является объяснение причины появления намагниченности и проводимости в бериллиевой керамике, полученной спеканием с нанопорошковыми добавками TiO_2 с использованием 3D-моделирования структурных превращений.

Известно, что основные физико-химические свойства вещества становятся сильно зависимыми от размеров частиц порошков (менее 100 нанометров) за счет дополнительного вклада энергии поверхности и дефектов структуры в общую энергию частиц.

Наночастицы TiO_2 , соединяясь с кластерами BeO , создают кристаллическую структуру перовскита, отличную от классической структуры (икосаэдрическую). Икосаэдрическая фаза определена из расшифровки спектров рентгеновской дифракции.

Благодаря кластерным моделям, представляется возможность проследить изменения размеров структурной единицы перовскита. Модельно представлено изменение кислородных октаэдров и их расположения относительно друг друга. В работе показано, что:

1) особенности физических свойств бериллиевой керамики связаны с особенностями электронной структуры перовскита BeTiO_3 ;

2) икосаэдрический ближний порядок может создавать высокую электронную плотность, приводящую к появлению намагниченности в бериллиевой керамике;

3) модели электронной структуры построены на основе реальных экспериментальных данных, полученных из расшифровки спектров рентгеновской дифракции.

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

**Использование кластерных моделей
для разработки композиционных материалов (Ni-Al, Ti-Al)**

А. М. Казначеева, С. Ю. Шелепова
Восточно-Казахстанский государственный университет
имени С. Аманжолова, Усть-Каменогорск

Данная работа посвящена получению образцов композиционных материалов систем Ni-Al, Al-Ti с помощью механохимических процессов.

Многослойный порошковый композит Ni-Al получен методом сварки давлением 13 МПа многослойного пакета пластин. Из итогов фазового анализа видно, что метод сварки давлением позволяет получать фазу Ni₃Al, имеющую уникальные физические свойства [1].

Композит Ti-Al – отличный конструкционный материал. Получен методом сварки взрывом. Титан имеет ГПУ решетку, [2] устойчивую до температуры 882°C, при более высокой температуре переходит в устойчивую ОЦК решетку. Образец подвергли термической обработке – отжиг в два этапа. После отжига обнаружены фазы Ti₂Al и Ti₃Al с ОЦК решетками. Т. е. этот материал сможет работать в широком диапазоне температур. TiAl₂ обладает хорошими свойствами при низких температурах, TiAl₃ – при высоких температурах.

1. Lu J., Hultman L., Holmström E. et al. Stacking fault energies in austenitic stainless steels. 2016. V. 111. P. 39–46.

2. Бульёнков Н. А. Модульный дизайн икосаэдрических металлических кластеров / Н. А. Бульёнков, Д. Л. Тытик // Известия АН (сер хим.). 2001. № 1. 213 с.

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

Электродуговой синтез и структура Sn-композита для анодов в литий-ионных аккумуляторах

Д. А. Козлачков

Новосибирский государственный университет

Институт теплофизики им. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

На сегодняшний день литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) являются наиболее распространенным типом устройств для накопления и хранения электрической энергии в портативной электронике. Графит (массовая емкость заряда 372 мАч/г) является типичным анодным материалом в ЛИА, он стабилен в процессе заряда-разряда, поскольку имеет низкое объемное расширение (~10 %). Другой пример анодного материала – олово – имеет гораздо большую емкость (до 994 мАч/г), однако значительное объемное расширение (~254 %) приводит к разрушению оловянного анода и нестабильности слоя межфазного твердого электролита. Наночастицы менее подвержены разрушению при уменьшении объема в процессе заряда-разряда. Кроме того, они должны быть изолированы для предотвращения их контакта и коагуляции. Использование наночастиц олова открывает новые возможности в создании анодных материалов для ЛИА. Синтез методом электродугового распыления позволяет получать однородные металлические наночастицы олова в углеродной матрице.

В данной работе были синтезированы мезопористые углеродные материалы с инкапсулированными наночастицами олова методом электродугового распыления при постоянном токе разряда 120 А и напряжении 25 В в атмосфере гелия при давлении от 0 до 200 Торр с использованием комплексного анода, состоящего из графитового стержня и смеси порошков графита и олова (масса олова от 5 % до 30 %) в аноде. В результате был синтезирован порошкообразный материал, состоящий из аморфных углеродных слоев, модифицированных наночастицами олова, диаметром 2–30 нм (средний размер 10 нм). Электрохимические ЛИА с использованием синтезированного композита в качестве анодного материала были исследованы методами циклической вольтамперометрии, импедансной спектроскопии и заряд-разрядного циклирования. Удельная емкость анодного материала составила до 1800 мАч/г на 1-м цикле, 800 мАч/г на 2-м цикле и почти 600 мАч/г после 120 циклов. Это свидетельствует о высокой эффективности и стабильности при циклировании синтезированного материала.

Научные руководители – канд. хим. наук Е. О. Федоровская,
канд. физ.-мат. наук А. В. Зайковский

Измерение распределения массы вдоль потока микрочастиц

С. И. Кременко

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

При сильном ударном воздействии на металлическую пластину с ее свободной поверхности (СП) выбрасывается поток частиц разных размеров (ударно-волновое «пыление»). Выход ударной волны на СП вещества приводит к развитию микровозмущений на СП металлов и последующему образованию мелкодисперсной фракции (пылевого облака), распределенной в пространстве по размерам и скоростям. Развитие процесса роста неустойчивости на СП металла и, соответственно, характеристики пылевого облака зависят от фазового состояния материала, условий нагружения и т. д. Диапазон размеров частиц в облаке – от единиц мкм до сотен мкм. Предполагается, что в потоке есть и более мелкие частицы, но существующие методики их пока разрешить не могут. Для исследования процесса пыления используются разные методики, такие как фото- и рентгенография, пьезодатчики, лазерные методики [1, 2].

В СО РАН для исследования пыления используются ускорительные методики: рентгенографию и метод малоуглового рентгеновского рассеивания (МУРР).

В ИЯФ СО РАН на ускорительном комплексе ВЭПП-3 – ВЭПП-4М построены две станции для исследования быстрых (в том числе взрывных) процессов. На станциях есть возможность измерять как проходящее излучение (поглощение), так и малоугловое рентгеновское рассеяние синхротронного излучения (СИ) [2]. В качестве детектора используется прецизионный быстродействующий детектор DIMEX [3]. С помощью регистрации проходящего СИ были проведены исследования потоков микрочастиц со свободной поверхности из меди и олова. Получены распределения массы вдоль микроструй, образующихся из канавок микронного размера. С помощью МУРР определялось наличие наночастиц в пылевом потоке.

УВ создавалась с помощью детонации мощных прессованных энергетических материалов.

1. Михайлов А. Л., Огородников В. Л., Сасик В. С. и др. Экспериментально-расчетное моделирование процесса выброса частиц с ударно-нагруженной поверхности // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. Вып. 5. С. 892–905.

2. Тен К. А., Пруэлл Э. Р., Кашкаров А. О. и др. Регистрация выброса частиц из ударно-нагруженных металлов методами синхротронного излучения // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54, № 5. С. 103–111.

3. Shekhtman L. I., Aulchenko V. M., Kudryavtsev V. N et al. Upgrade of the Detector for Imaging of Explosions // Physics Procedia. 2016. Vol. 84. P. 189–196.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук К. А. Тен

Исследование однородности импактных алмазов с помощью СИ

А. В. Курчев

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

Изучение импактных алмазов (ИА) геологического происхождения сопряжено с множеством трудностей, в первую очередь, это неоднородность алмазов на макро- и микроуровнях. Например, ИА Попигаевой астроблемы представлены частицами размером до 2 мм, которые даже визуально отличаются формой и цветом (от бесцветных до черных). Независимо от вида частиц дифракционные картины могут разительно отличаться. На них, кроме непосредственно рефлексов алмаза (D), чаще всего проявляются широкие линии, связанные с наличием лонсейлитных дефектов (далее ЛД). В ряде случаев проявляются линии графита (чаще всего в черных частицах) и других минералов.

Микродифракционное исследование проведено с использованием сфокусированного пучка СИ (ID13 ESRF, Гренобль, Франция, платформа Гью-Стюарта «гексапод», $\lambda = 0,8463 \text{ \AA}$, детектор Eiger X 4M) диаметром 0,3 мкм. Образец фиксировали на SiN-мембране (Silicon Ltd). В ходе эксперимента (геометрия «на просвет») проводили сканирование образца (или отдельных зон) с помощью прецизионного трехкоординатного пьезопривода (область 200×200 мкм, шаг 1 мкм). В каждой точке параллельно записывали спектры EDX (energy-dispersive X-ray spectroscopy, Si-детектор Vortex-EM).

Переход от двумерных фреймов к дифрактограммам осуществлен при помощи программы Diortas. Для визуализации соотношения (D/L) была написана оригинальная программа на языке C++. В ее основу положено условное деление алмазно-лонсейлитного дифракционного триплета (D/L) на три области: 100_L (красный), $111_D + 002_L$ (зеленый) и 101_L (синий). Таким образом, розовые области соответствуют зонам с наличием ЛД, зеленые – алмазу, выбросы (резко выделяющиеся точки) соответствуют микровключениям. Показано, что цветовые отличия связаны не только с неоднородностью распределения ЛД по образцу, также возможны эффекты, связанные с текстурой.

Проведено сопоставление данных микродифракции и EDX.

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

Исследование свойств модифицированной азотистой стали ВНС53

Д. С. Кушнерева

Удмуртский государственный университет, Ижевск

В связи с высокими темпами развития промышленности у многих предприятий возникает потребность в материалах, обладающих повышенными эксплуатационными характеристиками. Стали и сплавы, применяемые для изготовления ответственных изделий и деталей машин, должны обладать высокими механическими характеристиками в широком интервале температур, быть немагнитными, жаропрочными и коррозионностойкими.

Одним из перспективных направлений современной металлургии является производство азотистых сталей. Возможность применения таких сталей довольно обширна. Азот является сильным аустенитообразующим элементом, он повышает прочность стали, увеличивает ее пластичность, коррозионную стойкость и жаростойкость в агрессивных средах.

В настоящей работе в качестве объекта исследования была выбрана новая высокопрочная азотистая сталь типа ВНС53, разработанная в ОАО «НИИМТ». С целью получения еще более высоких характеристик стали была проведена ее модификация Nb и другими элементами. В результате в структуре образовались высокоэнтропийные соединения (ВЭС) на основе карбонитридов ниобия и хрома (Fe-Cr-Nb-N-C-Mn).

Была отработана технология и изготовлена опытная партия трубной продукции из модифицированной стали. Для оценки влияния ВЭС на свойства стали было проведено исследование ее микроструктуры, механических свойств при различных температурах, проведены испытания на межкристаллитную коррозию и коррозионную стойкость в морской воде.

Химический состав образцов определяли на многоканальном опико-эмиссионном спектрометре ДФС-500 и анализаторе газа МЕТЭК-200. Исследования механических свойств проводились на универсальной испытательной машине 1958У-10-1 фирмы «Точприбор» в соответствии с требованиями ГОСТ 1497-84, 9651-84. Микроструктурные исследования проводили на оптическом микроскопе «Альтами МЕТ» и сканирующем электронном микроскопе Inspect S50. Испытания на стойкость к коррозии выполняли в соответствии с ГОСТ 9.905-2007, 6032-2017.

Основываясь на полученных результатах, был сделан вывод о целесообразности проведенного высокоэнтропийного легирования. Модифицированная сталь обладает более высокими прочностными характеристиками и коррозионной стойкостью, что делает ее крайне перспективной для промышленного применения.

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

**Эллипсометрическое исследование тонких пленок
простых HfO_2 , TiO_2 , Sc_2O_3
и двухкомпонентных Hf-Sc-O и Sc-Ti-O оксидов**

И. Б. Мищенко, Д. Е. Петухова

Новосибирский государственный технический университет

Новосибирский государственный университет

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева

СО РАН, Новосибирск

Тонкие пленки активно используются в оптической и микроэлектронной технике. Варьируя химический состав слоев, их количество и толщину, появляется возможность регулировать важные свойства структур.

Один из самых точных и чувствительных методов контроля тонких пленок является эллипсометрический метод. Целью работы является исследование оптических свойств пленок оксидов скандия Sc_2O_3 , титана TiO_2 и гафния HfO_2 , а также двухкомпонентных оксидов на их основе методами монохроматической нулевой и спектральной эллипсометрии.

Тонкие пленки простых HfO_2 , TiO_2 , Sc_2O_3 и двухкомпонентных Hf-Sc-O и Sc-Ti-O оксидов получены методом атомно-слоевого осаждения (АСО) из летучих соединений металлов. Эллипсометрическим методом проведены измерения толщины и описаны оптические свойства тонкопленочных структур.

В случае двухкомпонентных оксидных пленок происходит снижение эффективной величины прироста толщины за 1 реакционный цикл АСО, что указывает на чувствительность реагентов к типу поверхности.

Для описания оптических свойств исследуемых структур использовали дисперсионные модели Коши, Таука – Лоренца и Бруггемана. Показано, что модель Коши хорошо описывает дисперсии показателя преломления $n(\lambda)$ пленок с низкой концентрацией Ti. Пленки TiO_2 и Sc-Ti-O с высокой концентрацией Ti следует описывать моделями, учитывающими поглощение света (например, моделью Таука – Лоренца). Зафиксировано снижение показателя преломления пленок с ростом концентрации Sc.

Модель Бруггемана использована для оценки химического состава двухкомпонентных пленок. Для системы Sc-Ti-O полученные оценки хорошо согласуются с условиями получения. Для системы Hf-Sc-O применение модели Бруггемана затруднено тем, что HfO_2 и Sc_2O_3 имеют близкие значения показателя преломления.

Научный руководитель – канд. хим. наук М. С. Лебедев

Построение и верификация параметрической модели коллимированного рентгеновского пучка

А. А. Паулиш

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

В современном материаловедении метод рентгеноструктурного анализа является основным для изучения строения периодических структур с пространственным разрешением $\approx 1 \text{ \AA}$. Появление в начале 2000-х гг. автоматических рентгеновских дифрактометров с CCD-детекторами и разработка программного обеспечения для обработки и интерпретации экспериментальных данных делает задачу построения атомных моделей периодических структур рутинной. Исследование материалов с нарушением периодичности строения на основании данных рентгеновской дифракции также возможно, однако для этого необходима их более полная обработка, требующая учета искажений, вносимых экспериментальным оборудованием, в частности, отличиями источника рентгеновского излучения от идеального монохроматического параллельного пучка.

Интенсивность дифрагировавшего с образцом излучения регистрируется двухмерным детектором. Размытие профиля дифракционных пиков определяется степенью и характером несовершенства образца и может быть использовано для определения реальной структуры, если корректно учесть неидеальность источника излучения, поэтому актуальным является построение модели излучателя.

В настоящей работе реализован алгоритм, позволяющий численно вычислять распределение интенсивности пятна от коллимированного первичного пучка на двухмерном детекторе для модели дифрактометра, описываемой набором параметров: длиной и радиусом коллиматора, расстоянием до детектора и гладкой функцией плотности интенсивности, заданной предварительно в двумерном пространстве с дальнейшим обобщением на пространство большого числа измерений по угловым и пространственным переменным. Получены теоретические профили распределения интенсивностей для модельных излучателей. Уточнены параметры для функции плотности интенсивности, описывающие экспериментальные данные (дифрактометр Bruker APEX Duo, источника рентгеновского излучения FCC Mo 2K-90).

Научные руководители – канд. хим. наук В. Ю. Комаров,
д-р физ.-мат. наук А. А. Ломов

Кристаллохимический дизайн и экспериментальное исследование ионных клатратных гидратов семейства ГС-1 – ТС-2

Н. А. Паулиш

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

Ионные клатратные гидраты (ИКГ) – соединения, родственные газовым гидратам. Они состоят из водородносвязанного водно-анионного каркаса (хозяина), включающего в свои полости ионы гостя. Эти соединения имеют структуру каркаса хозяина, родственную газовым гидратам, однако из-за более сильного взаимодействия между гостем и хозяином они имеют более высокие температуры плавления. В связи с этим соединения могут использоваться для хранения и транспортировки природного газа в виде смешанных гидратов, а также для ускорения нуклеации газовых гидратов.

Исследование структуры ИКГ до сих пор является нетривиальной задачей, что обусловлено широким разнообразием возможных способов нарушения дальнего порядка, характерным для их структур. Применение стандартных протоколов получения и обработки экспериментальных данных РСА, основанных на анализе интенсивностей брэгговских отражений, дают сведения лишь об усредненной структуре. Для понимания особенностей локального упорядочения ИКГ актуальна разработка алгоритмов построения масштабных структурных моделей и оценка их практической реализуемости теоретическими (молекулярная динамика) и практическими (анализ небрэгговской дифракции) методами.

В качестве объектов исследования выбрано гомологическое семейство ИКГ, реализующееся в системах $R_4XBr - H_2O$ ($R = C_4H_9$, $i-C_5H_{11}$; $X = N, P$), с тремя экспериментально обнаруженными членами (каркасы типа ГС-1, РС-5, ТС-2 по номенклатуре [1]). В настоящей работе проведено топологическое моделирование каркасов данного семейства, а также рассмотрены возможные способы размещения частиц гостя в каркасах данного типа. Экспериментально исследована возможность образования дополнительных членов данного ряда в системах $R'_4X'Br - R_4XBr - H_2O$ с применением данных по дифракции синхротронного излучения на поликристаллических образцах.

1. Manakov A. Y., Kosyakov V. I., Solodovnikov S. F. Structural Chemistry of Clathrate Hydrates and Related Compounds // Supramolecular Engineering: Designing the Solid State, Elsevier Inc. 2017. Vol. 7. P. 161–206.

Научные руководители – канд. хим. наук В. Ю. Комаров,
канд. хим. наук Т. В. Родионова

**1D–2D-нанокомпозиты с одностенными углеродными нанотрубками,
методы получения и упрочнения композитов**

И. В. Петенев

Новосибирский государственный университет

В настоящее время создание материалов с высокими удельными характеристиками является одной из приоритетных задач науки. Наибольший интерес представляют композитные материалы, содержащие наноаддитивы. Одними из перспективных наноаддитивов являются одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), обладающие уникальными физико-механическими свойствами.

Известно, что для равномерного распределения напряжения в материале от внешнего воздействия через матрицу всем частицам наполнителя необходимо прочное сцепление на границе раздела матрица-наполнитель, а также высокая прочность самого наполнителя. В связи с этим необходимо изучить взаимодействие отличных друг от друга матриц с различными модификациями наполнителя. В качестве матриц были выбраны термопластичные полимеры поливинилиденфторид (ПВДФ) и поливинилхлорид (ПВХ), а за наполнитель брались ОУНТ. На основе выбранных компонентов изготавливались 2D-нанокомпозит, называемый buckypaper, а также 1D-нанокомпозит – полимерное волокно с ОУНТ. Неотъемлемой частью диагностики на этапе разработки и тестирования композитных материалов является использование различных методик анализа материалов, например, EDХи Рамановской спектроскопии.

Представленная работа посвящена изучению прочностных и электрофизических свойств термопластичных композитов на основе ПВДФ и ПВХ с содержанием ОУНТ в зависимости от обработки композита микроволновым излучением [1], качества диспергации ОУНТ, концентрации и функционализации ОУНТ. Показано влияние количества частиц железа, содержащегося в ОУНТ на прочностные характеристики нанокompозитов. Кроме того, получена зависимость прочностных характеристик от объемной концентрации полимера в композите. Получена оптимальная концентрация ОУНТ в полимерных волокнах, при которой текучесть композита позволяет вытягивать полимерные волокна с ОУНТ до толщины, сравнимой с полимерными волокнами без ОУНТ. Показано влияние обработки микроволновым излучением нанокompозитных материалов с ОУНТ на прочностные и проводящие свойства композита.

1. Qu B., Zhuo D., Wang R., Wu L., Cheng X. Compos // Sci. Technol. 2018. Vol. 164. P. 313–318.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук В. О. Сайк, М. С. Галков

Исследования структуры пучков одностенных углеродных нанотрубок методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии

И. Н. Саламатов

Новосибирский государственный университет

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) имеют уникальные физико-химические свойства и являются перспективным технологическим материалом. Для их практического применения и контролируемого синтеза необходимы данные о структуре.

Известно, что ОУНТ представляют из себя свернутый графеновый лист с диаметром от 0,5 до 3 нм и длиной порядка микрометров. В результате сил Ван-дер-Ваальса нанотрубки самоорганизуются в пучки, образующие двумерную плотнейшую упаковку [1]. От такой наноструктуры в области малых углов до $25^\circ 2\theta$ появляется межчастичная дифракция. По данным просвечивающей электронной микроскопии в образцах ОУНТ наблюдается широкое распределение нанотрубок по диаметрам и дефекты их упаковки в пучки. Это приводит к трудностям в применении стандартных подходов рентгеноструктурного анализа. Для того чтобы понять, как влияют параметры трубок на дифракционную картину, необходимо привлечь численные расчеты.

По этой причине в работе используется метод DFA (Debye Function Analysis) [2], позволяющий рассчитать полный профиль дифрактограммы от любой совокупности атомов. Главной трудностью данного метода является построение атомной модели для сложных систем. В рамках представленной работы предлагается алгоритм построения модели пучков ОУНТ с распределением нанотрубок по диаметрам. Для этого было разработано программное обеспечение, позволяющее выполнять построение атомной модели и расчет дифрактограмм по формуле Дебая одиночных ОУНТ и МУНТ, пучков идентичных нанотрубок и пучков, состоящих из нанотрубок разных диаметров, соответствующих выбранной функции распределения. Проведен анализ влияния параметров модели на дифрактограмму. На основании полученных данных предложена методика, позволяющая определить функцию распределения нанотрубок по диаметрам для реальных образцов ОУНТ.

1. Thess A., Lee R., Nikolaev P. et al. Science. 1996. Vol. 273. P. 5274.

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

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Д. А. Яценко,
д-р хим. наук А. А. Хасин

Синтез кубической модификации гидрида платины при давлении 60 ГПа

А. И. Семерикова

Новосибирский государственный университет

Гидриды платины, образующиеся при высоких давлениях, представляют большой интерес как сверхпроводники с высокой критической температурой перехода в сверхпроводящее состояние. Однако система гидридов платины остается малоизученной – из различных теоретически предсказанных структур [1] экспериментально зафиксированы лишь две гексагональных фазы PtH-I и PtH-II в диапазоне давлений 20–42 ГПа и 30–45 ГПа соответственно при комнатной температуре [2]. При давлении выше 70 ГПа предсказана стабильность ГЦК гидрида платины [3], однако экспериментальных подтверждений опубликовано не было.

Для синтеза и исследования ГЦК гидрида платины был выполнен эксперимент с использованием СИ (DESY, Petra-III) *in situ* в алмазных ячейках высокого давления. Платиновая проволока сжималась в среде метана, который был выбран в качестве источника водорода. Рентгеновский пучок ($\lambda = 0,2892 \text{ \AA}$) фокусировался на платиновой проволоке, дифракционная картина записывалась на двухкоординатном детекторе. Интегрирование дифрактограмм производилось в программе Diortas. Для получения высоких температур использовался двухсторонний лазерный нагрев ($\lambda = 1064 \text{ нм}$). Температура образца оценивалась по аппроксимации планковских спектров излучения в программе T-Rax.

Фазовый анализ дифракционных данных показал, что при комнатной температуре и давлении примерно 60 ГПа до нагрева образец представляет собой платину. При повышении температуры до 2500 К происходит появление пиков теоретически предсказанного ГЦК гидрида платины с увеличенным параметром решетки $a \approx 3,87 \text{ \AA}$ (при 293 К). Параметр решетки ГЦК гидрида платины по данным *abinitio* моделирования составляет $3,991 \text{ \AA}$ при 50 ГПа [1]. При снижении температуры до комнатной обе фазы (платина и ГЦК гидрид платины) сосуществуют. Таким образом, впервые экспериментально установлено существование ГЦК гидрида платины и условия его формирования.

-
1. Gao G. et al. // The Journal of Physical Chemistry C. 2012. Т. 116. № 2. P. 1995–2000.
 2. Scheler T. et al. // Physical Review B. 2011. Т. 83. № 21. P. 214106.
 3. Kim D. Y. et al. // Physical review letters. 2011. Т. 107. № 11. P. 117002.

Научный руководитель – канд. геол.-минерал. наук С. В. Ращенко

Влияние функциональных добавок на свойства армированных композитов на основе политетрафторэтилена

А. А. Ушканов

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

ПТФЭ и его композиты привлекают внимание трибологов в течение вот уже шести десятков лет благодаря низкому коэффициенту трения, широкому интервалу рабочих температур и химической инертности. Такие недостатки, как низкая износостойкость, ползучесть успешно устраняются введением наполнителей. Однако выбор эффективных наполнителей, способствующих формированию наиболее оптимального комплекса свойств в ПТФЭ, остается актуальной задачей современных трибологов.

Целью работы является исследование комбинированного влияния наполнителей различной природы на свойства ПТФЭ.

В работе проведены исследования физико-механических и триботехнических характеристик полимерных материалов на основе ПТФЭ, армированных углеродными волокнами (УВ) или базальтовыми волокнами (БВ), нанодисперсным порошком ФОРУМ® и активированным оксидом алюминия (Al_2O_3). Композиты получали сухим смешением навесок компонентов с последующим формованием, методом холодного прессования. Полученные образцы спекали в муфельной печи при температуре $375^{\circ}C$. Прочность при сжатии (ГОСТ 4651-2014) и модуль упругости (ГОСТ 9550-81) определяли на испытательной машине «AUTOGRAF» (Shimadzu, Япония) при комнатной температуре. Триботехнические характеристики (скорость массового изнашивания и коэффициент трения ГОСТ 11629-2017) исследованы по схеме трения «палец – диск» (образец-столбик с радиусом 5 мм от центра, контртело – стальной вал из стали 45 с твердостью 45–50 HRC) при удельном давлении 2 МПа, скорости скольжения 0,2 м/с. Время испытания три часа.

Введение наполнителей способствовало значительному улучшению износостойкости материалов. Скорость изнашивания снижается до 1500 раз. Самую высокую износостойкость имеет композит, содержащий 18 % масс. БВ и 0,5 % масс. Al_2O_3 . Предел прочности на сжатие материалов при установленной деформации 10 % увеличивается на 80 %, при установленной деформации 20 % увеличивается на 40 % относительно исходного ПТФЭ.

Научный руководитель – канд. техн. наук, доц. С. А. Слепцова

**Аккуратное измерение времени пребывания (dwelltime)
на поверхности монокристаллического сапфира**

С. Чжан

Новосибирский государственный университет

Процессы рассеяние атомов при столкновении с поверхностью чрезвычайно интересны как с академической точки зрения, так и с точки зрения многочисленных приложений, и, в той или иной мере, они обсуждается в огромном числе работ. Хорошо известно, что когда атомы сталкиваются с поверхностью твердого тела, они испытывает силу притяжения Ван-дер-Ваальса, величина которой зависит от электронной структуры атомов и поверхности. Часть подающих на поверхность атомов может быть захвачена в приповерхностной потенциальной яме (образованной силой притяжения и силой отталкивания в непосредственной близости поверхности) в результате физической адсорбции. Через некоторое время адсорбированные атомы могут покинуть поверхность в случае, если они получают достаточно энергии для преодоления поверхностного потенциального барьера. Это время получило название “sticking or residence time” в англоязычной литературе, которое можно перевести как «время прилипания или время пребывания».

Целью данной работы является изучение процесса столкновения атомов рубидия с поверхностью сапфира, измерение времени пребывания атомов на его поверхности, изучение влияния различных факторов (как состояние поверхности сапфира) и т. д. на время пребывания. Интерес к этому исследованию состоит в том, что температура стеклования сапфира очень высока (2054°C), и поэтому аномальное возрастание времени пребывания, которое наблюдалось при использовании стекла, должно проявиться при гораздо более высоких температурах поверхности сапфира. Мы ожидаем того, что в диапазоне температур от 100°C вплоть до 600°C зависимость времени пребывания от температуры поверхности будет описываться чистой формулой Аррениуса, и аномальное возрастание времени пребывания, которое наблюдалось в стекле, при преодолении температуры стеклования будет отсутствовать.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. Н. Атутов

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 536.46

Исследование влияния фосфорорганического ингибитора на горение диметилового эфира

Н. В. Альянова

Новосибирский государственный университет

Диметиловый эфир ($\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$, ДМЭ) является многоцелевым экологически чистым топливом. ДМЭ – перспективный заменитель дизельного топлива ввиду высокого цетанового числа (более 55), отсутствия соединений серы и азота в выхлопных газах, а также благодаря практически полному отсутствию дымности отработанных газов и сажи в продуктах его сгорания. Кроме того, ДМЭ обладает низкой температурой кипения ($-24,8\text{ }^\circ\text{C}$), что делает его пригодным для использования в условиях низких температур. По этой причине изучение химии ингибирования ДМЭ представляет значительный интерес. Химия горения ДМЭ имеет характерные отличия от химии горения традиционных углеводородных топлив, например, в пламени ДМЭ образуется много формальдегида и пероксидов, поэтому процесс ингибирования его горения может также в значительной степени отличаться.

Основной целью работы является исследование влияния добавки триметилфосфата (ТМФ) на структуру пламен богатых и стехиометрических смесей ДМЭ/ O_2 /Ar, стабилизированных на плоской горелке при атмосферном давлении. В ходе работы методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии были измерены профили мольных долей основных компонентов, интермедиатов, радикалов и фосфорсодержащих соединений. Методом термопар измерены профили температуры в пламенах. Проведенное численное моделирование изученных пламен с применением детальных механизмов химических реакций показало, что используемая модель хорошо описывает измеренные профили мольной доли основных радикалов в пламени, основных фосфорсодержащих продуктов, включая PO, PO_2 , НОРО , НОРО_2 . Однако обнаруженное несоответствие рассчитанных и экспериментальных данных по концентрациям C_2 -компонентов пламени, что указывает на необходимость дальнейшего совершенствования модели.

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

Оптимизация метода дискретных диполей при моделировании оптических свойств частиц вблизи плоской поверхности

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

Изучение оптических свойств частиц вблизи поверхности представляет интерес для множества научных и технических приложений. С одной стороны, многие сложные наночастицы или плоские структуры конструируются непосредственно на подложке, с другой – подложка может предоставлять новые возможности, как в микроскопии полного внутреннего отражения. Метод дискретных диполей (МДД) позволяет моделировать оптические свойства частиц произвольной формы и структуры как в однородной среде, так и вблизи поверхности [1]. Он основан на дискретизации объемного интегрального уравнения Максвелла для электрического поля, а название отражает физическую аналогию с представлением частицы в виде набора точечных диполей.

Использование МДД вблизи поверхности осложняется необходимостью численного вычисления четырех интегралов Зоммерфельда для всех возможных расстояний между двумя диполями. Данные интегралы входят в выражения для компонент рассеянного поля точечного диполя, они зависят от комплексной диэлектрической проницаемости поверхности ϵ и от ρ , z_1 – координат радиус-вектора из точки, где находится диполь-изображение, в точку наблюдения.

Целью данной работы является оптимизация алгоритмов вычисления интегралов Зоммерфельда и их реализация в программе с открытым исходным кодом ADDA, реализующей МДД (<https://github.com/adda-team/adda>). При малых и при больших значениях параметров ρ и z_1 мы использовали асимптотические разложения интегралов, дающие достаточную точность. В оставшейся области значений параметров интегралы не имеют резких особенностей и вычисляются с помощью интерполяции. Данная оптимизация позволяет значительно ускорить моделирования оптических свойств частиц вблизи поверхности, что может сразу использоваться многочисленными пользователями программы ADDA по всему миру.

1. Yurkin M. A., Huntemann M. Rigorous and fast discrete dipole approximation for particles near a plane interface // J. Phys. Chem. C. 2015. Vol. 119. P. 29088–29094.

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

Разработка цифрового квантового симулятора на основе ультрахолодных атомов в массивах оптических дипольных ловушек

И. Н. Ашкарин

Новосибирский государственный университет

Институт физики полупроводников

им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Применение квантовых вычислений к решению задачи эффективной симуляции квантовых систем в настоящее время вызывает значительный интерес научного сообщества. Цифровые квантовые симуляторы (DQS) демонстрируют существенное превосходство над классическими симуляторами и находят широкое применение в квантовой химии и материаловедении. Основой подобных симуляторов является алгоритм оценки фазы, предложенный Абрамсом и Ллойдом, а также его модификации.

Одним из перспективных подходов к реализации квантовых симуляторов является использование ультрахолодных нейтральных атомов в массивах оптических дипольных ловушек. Однокубитовые вентили с холодными атомами могут быть реализованы с использованием микроволнового излучения или двухфотонных рамановских переходов между сверхтонкими подуровнями основного состояния. Ввиду сложности создания масштабного регистра холодных атомов при разработке алгоритма реализации DQS на их основе необходимо ориентироваться на схемы, требующие вовлечения минимально возможного числа кубитов. Подобные схемы, основанные на модифицированных алгоритмах Аспуру-Гузика и КРЕА (ПРЕА), были рассмотрены в работах [1] и [2].

Целью данной работы является разработка универсального алгоритма симуляции двухатомных молекул и схемы его реализации с использованием ультрахолодных нейтральных атомов в массивах оптических дипольных ловушек.

В результате работы был разработан универсальный кроссплатформенный квантовый алгоритм оценки фазы на основе итерационной схемы Китаева. Точность алгоритма произвольна и ограничивается только числом итераций. Для 56 итераций алгоритма составила $\sim 4.4 * 10^{-16}$. При моделировании схемы реализации алгоритма с применением холодных атомов точность сохраняется.

1. Du J. et al. NMR implementation of a molecular hydrogen quantum simulation with adiabatic state preparation // Physical review letters. 2010. Т. 104, № 3. P. 030502.

2. Dobšíček M. et al. Arbitrary accuracy iterative quantum phase estimation algorithm using a single ancillary qubit: A two-qubit benchmark // Physical Review A. 2007. Т. 76, № 3. P. 030306.

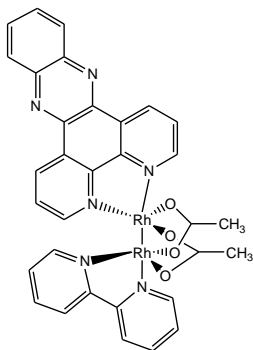
Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук И. И. Бетеров

Первичные процессы в фотофизике и фотохимии диродиевого комплекса, обладающего светоиндуцированной цитотоксичностью

О. Д. Бакулина

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

Некоторые комплексы платиновых металлов обладают светоиндуцированной цитотоксичностью. Такие комплексы перспективны для применения в фотохимиотерапии (ФХТ), которая, в отличие от традиционной фотодинамической терапии (ФДТ), не требует наличия кислорода в тканях. Комплекс $cis\text{-}[\text{Rh}_2(\mu\text{-O}_2\text{CCH}_3)_2(\text{bpy})(\text{dppz})]^{2+}$, где bpy – бипиридил, dppz – дипиридофеназин (комплекс 1, рис.) обладает комбинированной токсичностью (ФХТ + ФДТ) [1]. Фотохимия комплекса 1 не исследовалась, нашей задачей было восполнить этот пробел.



Структура комплекса 1

В экспериментах по стационарному фотолизу было выяснено, что комплекс фотохимически стабилен. В экспериментах по лазерному импульсному фотолизу было обнаружено промежуточное поглощение, время жизни которого увеличивается при удалении кислорода из раствора. Это поглощение принадлежит триплетному состоянию лиганда dppz, что было подтверждено в экспериментах со свободным лигандом. Таким образом, можно предположить, что светоиндуцированная цитотоксичность комплекса обусловлена лигандом и объясняется образованием синглетного кислорода при тушении триплетов dppz растворенным кислородом (типичный механизм действия ФДТ). Причины светоиндуцированной токсичности комплекса 1 в анаэробных условиях на данный момент не определены.

1. Angeles-Boza A. M., Bradley P. M., Fu P. K.-L. et al. Photocytotoxicity of a new Rh₂(II,II) complex: increase in cytotoxicity upon irradiation similar to that of PDT agent hematoporphyrin // *Inorg. Chem.* 2005. Vol. 44. P. 7262–7264.

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

Исследование влияния размеров горелки на структуру пламени жидкого метилметакрилата

А. С. Беспалова

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения

им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Изучение диффузионного горения жидких горючих веществ важно как с точки зрения фундаментального значения, так и практического применения. Возгорание небольшой площади разлитого топлива может привести к пожару большой территории. В литературе практически отсутствует информация о малоразмерном горении жидкого топлива, в частности соединений, входящих в состав полимеров, в открытой горелке с экспериментальным исследованием структуры пламени, что в будущем может позволить прогнозировать развитие пожаров и находить эффективные способы борьбы с ними.

Объектом исследования в данной работе являлся метилметакрилат (ММА, $C_5H_8O_2$, $\rho = 950 \text{ кг/м}^3$) – жидкое вещество, используемое для изготовления твердых пластин полиметилметакрилата, находящих широкое применение в строительстве и внутренней отделке жилых и производственных помещений. Изучение горения жидкого ММА происходило в открытой сверху горелке (режим «pool fire») цилиндрической формы. Были поставлены и проведены эксперименты с разными диаметрами горелок. Для каждого из диаметров с помощью Pt-PtRh (10 %) термопары (диаметр 50 мкм) с покрытием SiO_2 (толщина 10 мкм), предотвращающим каталитические процессы на поверхности термопары, и программируемой сканирующей системы трехмерного позиционирования была получена двумерная тепловая структура пламени ММА (поле температур) в газовой фазе. С помощью зондовой масс-спектрометрии и того же сканирующего механизма была получена химическая структура пламени (профили концентрации химических веществ в пламени). Также была измерена скорость горения и тепловые потоки из пламени к поверхности топлива.

Установлена зависимость массовой скорости расходования ММА от диаметра горелки и от расстояния между краем горелки и поверхностью топлива в ней.

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

Разработка плазмохимической модели для описания процесса взаимодействия холодной плазменной струи с окружающим воздухом

С. А. Вагапов

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

При контакте с окружающим воздухом ионы и возбужденные атомы и молекулы, образованные в плазменной струе, порождают огромное количество активных радикалов, благоприятно воздействующих на живые клетки. В то же время температура плазменных струй близка к комнатной, что делает их безопасными для биологических тканей. Сейчас плазменные струи используются в дерматологии, стоматологии, косметологии и онкологии.

Для медицинских приложений возникает необходимость в максимизации генерации определенных радикалов. Состав воздуха у поверхности после обработки плазменной струей сильно зависит от многих параметров, таких как величина прикладываемого напряжения, скорость прокачки рабочего газа, влажность воздуха и т. д. Наиболее рациональным способом определения оптимальных параметров является численное моделирование.

Для получения равновесных концентраций радикалов и ионов вблизи обрабатываемой поверхности численно решалась система уравнений химической кинетики и уравнение для энергии электронов. Использовался метод Розенброка первого порядка с адаптивным шагом по времени. Задача решалась в «нуль-мерной» постановке, где все величины рассматриваются как усредненные по характерному объему. Отсутствие пространственных производных позволяет расширить схему химических реакций и выявить механизмы сложных химических процессов. В химическую модель включены 81 реагент и 1268 химических реакций. Начальное распределение концентрации электронов и их энергии у поверхности задавались постоянными.

В работе исследовалась зависимость конечных концентраций наиболее важных для медицинских приложений радикалов и ионов (O_2^- , OH , H_2O_2 , O_3 , O , NO) от влажности воздуха и скорости прокачки рабочего газа (гелий).

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-08-00510.

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

Изучение стабильности нитроксильных радикалов как параметра, определяющего их применение для биологических исследований

П. Д. Гладких
Новосибирский государственный университет
Институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН, Новосибирск

Метод ЭПР широко применяется в различных областях науки, включая биологию и медицину. При изучении биологических систем методом ЭПР используются спиновые зонды и метки, в качестве которых выступают нитроксильные радикалы (НР) и их производные, позволяющие получать информацию о микроокружении метки по ее спектру ЭПР. Стабильность НР обуславливает область их применимости в биологических исследованиях. Так, НР с высокой стабильностью используют для определения рН, оксиметрии, изучения накопления НР в органах. НР, характеризующиеся временем восстановления 5–15 мин, применяются для исследования окислительно-восстановительного статуса тканей организма. Таким образом, важной задачей является получение стабильных НР, а также подбор НР с оптимальными характеристиками для изучения окислительно-восстановительного статуса.

Метод ЭПР дает возможность изучить кинетику восстановления НР и определить их константу восстановления. Радикалы исследовались в реакции с аскорбиновой кислотой, в результате которой НР восстанавливается до гидроксилamina при различных концентрациях аскорбиновой кислоты и в различных органах мыши.

В данной работе изучались различные НР, в том числе пространственно затрудненные. Для них были получены кинетики восстановления при различных концентрациях аскорбиновой кислоты, соответствующие кинетике псевдопервого порядка. Из зависимости эффективной константы восстановления НР от концентрации аскорбиновой кислоты были получены значения константы бимолекулярного процесса восстановления. Была продемонстрирована высокая стабильность пространственно затрудненных НР в крови, гомогенатах мозга и сердца мышей.

НР, не имеющие пространственных затруднений, были использованы для исследования окислительно-восстановительного статуса в мозгу мышей и крыс.

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

Влияние антипиренов на термическое разложение полимеров

Р. К. Глазнев

Новосибирский государственный университет

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

Современный человек окружен полимерными материалами. Они используются при изготовлении мебели, элементов фурнитуры, тепло- и гидроизоляции, бытовых приборов и т. д. Широкое распространение полимеров накладывает особые требования на их пожаробезопасность. Одним из эффективных методов понижения горючести полимеров является добавление в их состав антипиренов. Механизм действия антипиренов является комплексным и не изучен до конца. Важным этапом горения полимера является его термическое разложение.

Цель работы – определение влияния антипиренов (трифенилфосфат, красный фосфор) на кинетику термического разложения полиоксиметилена (ПОМ) с различными среднечисловыми молекулярными весами (320 и 70000 г/моль) и образцов полиметилметакрилата (ПММА), приготовленных методами горячего прессования и экструзии.

Скорости реакций термического разложения полимеров (с добавкой антипирена и без) в инертной среде при низком темпе нагрева (0.17 К/с) были получены методом термогравиметрического анализа (ТГА), при высоком темпе нагрева (10–60 К/с) – методом динамического масс-спектрометрического термического анализа (ДМСТА) [1].

Кинетические параметры одностадийных реакций были получены построением зависимости логарифма константы скорости реакции от обратной температуры. Кинетика многостадийных реакций была определена методом расчета оптимальной модельной скорости разложения в предположении параллельных реакций с помощью генетического алгоритма [2].

Полученные данные были использованы при создании модели горения полиоксиметилена и полиметилметакрилата.

1. Коробейничев О. П. Динамическая зондовая масс-спектрометрия пламен и процессов разложения конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 1987. Vol. 5. P. 64–76.

2. Rein G. et al. Application of genetic algorithms and thermogravimetry to determine the kinetics of polyurethane foam in smoldering combustion // Combustion and flame. 2006. Vol. 146. № 1–2. P. 95–108.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук А. А. Палецкий

**Влияние функционального состава
на диэлектрические свойства оксида графита**

М. А. Гребёнкина

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

Оксид графита (ОГ) является слоистой структурой, образованной графеновыми слоями с ковалентно связанными кислородсодержащими функциональными группами. В настоящее время предложено несколько методов синтеза ОГ, главными из которых являются методы Хаммерса, Броди и Штаудинмайера. Структура и свойства ОГ зависят от метода и параметров синтеза, а также от содержания интеркалированных молекул воды H_2O , образующих водородные связи с окисленными слоями. Актуальной задачей является сравнение свойств и структурных моделей оксида графита, синтезированного разными методами. Исследование диэлектрических характеристик ОГ позволит расширить список потенциальных приложений вещества.

В данной работе были исследованы частотные и температурные зависимости диэлектрической проницаемости ОГ, синтезированного методами Хаммерса и Броди. Методика параллельных пластин была использована для измерений методом импедансной спектроскопии. Частотный диапазон составлял от 1 Гц до 7 МГц, температурный – от $-10^\circ C$ до $150^\circ C$. Импедансы образцов анализировались на основе моделирования эквивалентных электрических схем.

Показано, что при увеличении количества интеркалированной воды в ОГ, синтезированного методом Хаммерса, возникают ионные диффузионные процессы на низких частотах (меньше 24 кГц). Влажный ОГ, синтезированный методом Броди, при тех же условиях демонстрирует возникновение дополнительного механизма поляризации на частотах ниже 73 Гц. По нашему мнению, отличие связано с отсутствием эпоксидных групп у ОГ, синтезированного методом Броди. Продемонстрировано возникновение агломератов молекул воды в межслоевом пространстве при повышении влажности ОГ и представлены структурные модели вещества для каждого метода синтеза.

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

Изучение механизма фотогенерации синглетного кислорода в системе кислород – двуокись титана

А. В. Демьяненко

Новосибирский государственный университет

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

Двуокись титана TiO_2 является фотокатализатором, наиболее широко используемым в фотоэлектрохимии, фотокаталитическом разложении воды для получения водорода, для преобразования солнечной энергии, фотохимической очистки воды и воздуха. Одной из основных активных форм кислорода, участвующих в процессах фотоокисления на поверхности TiO_2 , является синглетный кислород $^1\text{O}_2(a^1\Delta_g)$. Дополнительный интерес к образованию синглетного кислорода вызван недавно полученными результатами квантово-химических расчетов, указывающими на наличие безбарьерного канала взаимодействия синглетного кислорода с TiO_2 , приводящего к образованию пероксидов титана, которые, предположительно, играют важную роль в фотокатализе. Понимание механизма фотогенерации $^1\text{O}_2$ также важно и в связи с широким распространением процессов с участием синглетного кислорода в природе и использованием его в практических приложениях, таких как фотодинамическая терапия.

В работе изучен механизм фотогенерации синглетного кислорода $^1\text{O}_2$ в системе кислород – двуокись титана TiO_2 с помощью детектирования люминесценции $^1\text{O}_2$ в ближнем ИК-диапазоне.

ИК-люминесценция, возникающая в результате фотовозбуждения суспензии TiO_2 в растворителях CCl_4 , D_2O и H_2O , содержащих растворенный кислород, излучением импульсного Nd-YAG лазера с длиной волны 355 нм детектировалась с помощью InGaAs фотодетектора (Hamamatsu), установленного на выходе монохроматора. Результаты измерения временного профиля и спектра люминесценции позволили сделать вывод о том, что наблюдаемая люминесценция обусловлена синглетным кислородом, адсорбированным на поверхности TiO_2 . Степенная зависимость сигнала люминесценции от энергии лазерного импульса указывает на образование синглетного кислорода в результате фотоотщепления электрона от супероксид аниона O_2^- , также образующегося при фотокатализе. Основные результаты работы опубликованы в статье [1].

1. Demyanenko A.V. et al. Singlet Oxygen $^1\text{O}_2$ in Photocatalysis on TiO_2 . Where Does It Come from? // Journal of Physical Chemistry C. 2019. Vol. 123(4). P. 2175–2181.

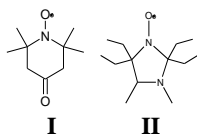
Научный руководитель – д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов

Формирование наноструктур гостевыми молекулами в молекулярных стеклах по данным ЭПР спиновых зондов

Н. М. Дудышева

Новосибирский государственный университет

Известно, что в биологических мембранах встроенные в них гостевые молекулы (белки, холестерин и др.) могут образовывать наноструктуры. Например, молекулы спин-меченного аналога холестерина могут образовывать нанокластеры, в которых эти молекулы либо отталкиваются между собой, либо притягиваются друг к другу. Целью настоящего исследования было выяснить, является ли образование наноструктур гостевыми молекулами исключительным свойством биологических мембран, или же данное явление обусловлено просто неупорядоченным характером таких сред.



Зонды двух типов

В работе методом импульсного ЭПР спиновых зондов изучалось взаимное пространственное расположение спиновых зондов – стабильных нитроксильных радикалов – в матрице застеклованного орто-терфенила. Данная матрица является структурно неупорядоченной средой с межмолекулярным ван-дер-ваальсовым взаимодействием и с этой точки зрения хорошо моделирует гидрофобную внутрен-

ность мембраны. Импульсный ЭПР позволяет получать информацию о кластеризации парамагнитных молекул на расстояниях порядка нескольких нанометров.

Исследованы образцы с различной концентрацией показанных на рисунке зондов двух типов. Обнаружено, что при малых концентрациях зонда **I** в образце (<2 мМ) его молекулы на расстояниях, меньших некоторого $R_{\text{крит}}$ (~7 нм), отталкиваются друг от друга и образуют таким образом сверхрешетку. Для зонда **II** наблюдается противоположный эффект – его молекулы имеют тенденцию к сближению, формируя нанокластеры с повышенной локальной концентрацией – порядка $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, для молекулярных стекол впервые обнаружено формирование наноструктур гостевых молекул, причем эти наноструктуры могут быть двух типов – сверхрешетка с взаимным отталкиванием гостевых молекул и нанокластеры с взаимным их притяжением.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба,
Е. А. Гольшева

Влияние химических свойств среды на фотофизические свойства кинурунина

Д. Е. Жагупаров

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Кинурунин (KN) и его производные считаются молекулярными УФ-фильтрами хрусталика человеческого глаза. Ключевой особенностью этих молекул является малый выход реакционно-активных состояний, которые способны вступать в реакции с аминокислотными остатками белков, тем самым приводя к необратимым модификациям белков хрусталика. Накопление таких модификаций может быть причиной развития катаракты. В настоящее время фотофизические свойства KN хорошо изучены только для модельных растворов, однако остается неизвестным, насколько эффективно KN функционирует в качестве УФ-фильтра в ткани хрусталика.

Данная работа посвящена изучению фотофизических свойств молекулы KN в модельных системах (бинарные смеси вода – спирты в различных пропорциях). Основной целью изысканий является установление влияния среды на релаксацию фотовозбужденных состояний KN. Исследования были проведены с помощью времязрешенной и стационарной оптической спектроскопии. В ходе работы были получены значения квантового выхода и времени жизни флуоресценции KN, проведен анализ их зависимостей от мольной доли растворителей в смеси.

В результате проведенного исследования было установлено, что эффективность KN в качестве молекулярного УФ-фильтра определяется следующими ключевыми свойствами растворителя: 1) свойством быть донором межмолекулярной водородной связи; 2) вязкостью растворителя. В случае отсутствия межмолекулярных водородных связей KN перестает быть эффективным УФ-фильтром. Интересным явлением оказалось то, что вязкость окружающей среды также существенно ухудшает функцию KN как молекулярного УФ-фильтра. Полученные данные показывают, что ранее предложенная модель взаимодействия KN с окружающей средой только лишь посредством межмолекулярных водородных связей не является достаточной, поэтому требуется пересмотр механизма ультрабыстрого перехода $S_1 \rightarrow S_0$ -состояния. В данной работе обсуждаются альтернативные механизмы быстрой гибели фотовозбужденных состояний в молекуле KN.

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

Исследование начальных стадий формирования катализаторов Ni/SiO₂ методом электронного магнитного резонанса в режиме *in situ*

И. Т. Кандаракова
Новосибирский государственный университет

Катализаторы на основе нанесенных наночастиц никеля широко применяются в химической промышленности [1]. Ранее в Институте катализа был предложен современный метод синтеза Ni-содержащих каталитических систем при помощи метода сверхкритического антирастворения (SAS) [2]. Было показано, что в ходе восстановления в токе водорода в таких системах наблюдается образование наночастиц с размером < 10 нм с узким распределением частиц по размерам.

В то же время при формировании дисперсной наноразмерной фазы в ходе восстановления оксидных частиц водородом могут наблюдаться процессы массопереноса и агломерации частиц, что приводит к нарушению однородного распределения наночастиц по размерам и ухудшению параметров катализатора.

В этой связи особенно важным становится исследование начальных стадий образования активной фазы катализатора. Именно изучение зародышеобразования новой фазы в ходе восстановления может дать новое знание о характере протекающих в ходе синтеза процессов.

Метод электронного магнитного резонанса (ЭМР) является современным методом исследования для изучения магнитоупорядоченных материалов, обладающим высокой чувствительностью и возможностью проведения экспериментов в режиме *in situ* в условиях контролируемой атмосферы. При изучении систем на основе суперпарамагнитных наночастиц высокая чувствительность метода еще возрастает. Это делает метод ЭМР уникальным инструментом для исследования начальных стадий образования магнитоупорядоченных фаз.

В данной работе методом ЭМР в режиме *in situ* исследован процесс формирования и эволюции частиц Ni/SiO₂, образующихся в ходе восстановления нанесенных оксидных предшественников в токе водорода.

1. Jalama K. Carbon dioxide hydrogenation over nickel-, ruthenium-, and copper-based catalysts: Review of kinetics and mechanism // Catal. Rev. Sci. Eng. Taylor & Francis. 2017. Vol. 59, № 2. P. 95–164.

2. Nesterov N. S. et al. The facile synthesis of Ni–Cu catalysts stabilized in SiO₂ framework via a supercritical antisolvent approach // J. Supercrit. Fluids. Elsevier B.V. 2016. Vol. 112. P. 119–127.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук С. С. Якушкин

Новые методы переноса индуцируемой параводородом поляризации ядер в сильных магнитных полях

В. П. Козиненко

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метод ИППЯ (индуцируемая параводородом поляризация ядер) является одним из наиболее эффективных и широко применяемых методов создания гиперполяризации в системах ядерных спинов. Усиление сигнала ИППЯ происходит за счет неравновесной заселенности ядерных спиновых состояний в молекуле пара-водорода. Данный метод не требует дорогого оборудования и позволяет получать усиления сигналов ЯМР порядка 10^4 , что делает его идеальным вариантом для изучения реакций каталитического гидрирования, наблюдения короткоживущих промежуточных состояний и создания гиперполяризованных контрастных агентов для МРТ. Важным приложением метода является перенос ИППЯ с протонов на такие магнитные ядра, как ^{13}C , ^{15}N и т. д.

В данной работе исследуется процесс переноса ИППЯ на ядра ^{13}C в сильных полях. Для успешной конверсии ИППЯ используется схема с резонансным РЧ возбуждением на ЯМР частотах протонов и гетероядра. РЧ поле на частоте протонов поддерживается постоянным, в то время как поле на частоте гетероядра адиабатически уменьшается от максимального значения до нуля для реализации антипересечения спиновых уровней (АПУ) во вращающейся системе отсчета.

В ходе работы исследуется зависимость эффективности переноса ИППЯ от частоты РЧ возбуждения ядра ^{13}C . Предлагается метод эффективного подавления сигнала от термических поляризованных ядер. Проводится оптимизации схемы с использованием профиля с постоянной адиабатичностью для выключения РЧ возбуждения гетероядра. Демонстрируется эффективность оптимального профиля выключения по сравнению с линейным профилем.

Использование схемы с двухчастотным РЧ возбуждением позволяет эффективно переносить ИППЯ на гетероядра, в том числе с подавлением сигналов термических ядер. Конверсия ИППЯ в намагниченность гетероядра позволяет значительно повысить эффективность многих химических и биологических ЯМР исследований.

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

**Селективная МРТ-визуализация
селективной реакции гидрирования параводородом**

Е. С. Кононенко

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Магнитно-резонансная томография (МРТ), несмотря на широкий спектр применений, обладает рядом недостатков, а именно неоднородностью магнитного поля вблизи объекта исследований, что влияет и на без этого низкую интенсивностью сигнала ЯМР, которая обусловлена малой энергией взаимодействия ядерных спинов с внешним магнитным полем. Более того, низкая спиновая плотность реагирующих и образующихся веществ в газовой фазе приводит к большим трудностям использования МРТ для визуализации газов. Повысить чувствительность метода можно за счет использования параводорода (спинового изомера водорода с нулевым магнитным моментом) путем использования его в реакции гидрирования – речь идет о так называемом методе индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ). Данный метод позволяет усилить сигнал на несколько порядков величины, что приводит к возможности МРТ-визуализации процессов гидрирования в газовой фазе и делает его уникальным по исследованию работающих реакторов.

Целью данной работы является исследование селективной реакции гидрирования ненасыщенных газообразных углеводородов: 1,3-бутадиена и 1-пропина методом ^1H МРТ. Для уменьшения возмущения однородности магнитного поля использовались каталитические реакторы, представляющие собой стеклянные трубки с наночастицами палладия, платины, иридия или родия, нанесенные на тонкий слой TiO_2 , CeO_2 , SiO_2 или Al_2O_3 .

В результате проведения исследований впервые был разработан ^1H МРТ-подход, позволяющий селективно визуализировать не только образование продуктов частичного гидрирования, но и получить пространственную информацию об их образовании. Установлено, что наибольшей селективностью обладает трубка с нанесенным металлическим палладием. В то время как использование иридиевых и родиевых катализаторов приводит к наиболее интенсивным поляризованным линиям.

Научный руководитель – канд. хим. наук К. В. Ковтунов

Магнитные свойства нитроксил-вердазильных бирадикалов – новых поляризующих агентов для ДПЯ

И. В. Курганский

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Динамическая поляризация ядер (ДПЯ) – важный метод усиления сигнала ядерного магнитного резонанса (ЯМР). С ее помощью сигнал ЯМР может быть усилен на несколько порядков, что позволяет применять его в таких ранее недоступных областях, как определение структуры белков, исследование поверхностей материалов и изучение короткоживущих биологических структур. Один из перспективных механизмов ДПЯ основан на применении бирадикалов в качестве поляризующих агентов. Для эффективной генерации ДПЯ в этом подходе спектроскопические свойства бирадикалов должны быть тонко настроены; в частности, одним из условий успешной реализации является большое время электронной релаксации радикальных фрагментов. В связи с этим разработка бирадикалов для ДПЯ – ЯМР невозможна без исследования их свойств методами ЭПР-спектроскопии.

Цель данной работы – изучение магнитных свойств новых бирадикалов, в состав которых входят различные нитроксильные и вердазильные радикальные фрагменты.

Методами стационарного и импульсного ЭПР в X-диапазоне (9 ГГц) была исследована серия бирадикалов нитроксил-вердазил, соединенных линкерами различной длины и жесткости. Для сравнения также были исследованы отдельные радикальные фрагменты с соответствующими заместителями-линкерами. Все исследования проведены в стекле толуола при 80 К. Анализ стационарных спектров ЭПР отдельных радикальных фрагментов и численное моделирование показали, что спектры бирадикалов с хорошей точностью являются суммой спектров соответствующих нитроксильных и вердазильных фрагментов. Следовательно, конформации бирадикалов в растворе препятствуют сближению радикальных фрагментов, и обменные взаимодействия малы. Методами импульсного ЭПР были изучены времена продольной (T_1) и поперечной (T_2) релаксации бирадикалов и отдельных радикальных фрагментов, проанализирована их зависимость от температуры. На основании проведенных работ сделаны выводы о перспективности данного типа бирадикалов для применения в качестве поляризующих агентов ДПЯ.

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

Поиск метаболомных биомаркеров диабетической язвы и разработка методов прогнозирования этого осложнения

А. Д. Мельников

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Больные сахарным диабетом имеют высокую вероятность развития осложнений, одним из которых является диабетическая язва, которая диагностируется в более чем в 15 % случаев. В настоящее время не существует эффективного метода лечения данного осложнения, как и не существует способа оценки риска развития язвы у пациентов. Прогнозирование диабетической язвы на ранней стадии могло бы способствовать заблаговременному применению профилактических и лечебных мер, что повысило бы вероятность выздоровления (на данный момент более чем в 6 % случаев врачи вынуждены прибегать к ампутации конечности).

Целью данной работы являлось выявление значимых отличий в метаболомном составе плазмы крови пациентов больных сахарным диабетом 2-го типа с осложнениями в виде диабетической язвы по сравнению с контрольной группой – пациентами с диабетом, но без осложнений (всего более 80 образцов). Следующим этапом работы являлось создание предсказательной модели наличия диабетической язвы на основе полученных данных. Для более полного покрытия метаболома использовались два различных метода жидкостной хроматографии – гидрофильной и обращенно-фазовой – в сочетании с масс-спектрометрическим детектированием высокого разрешения. Создание предсказательной модели осуществлено с помощью алгоритмов машинного обучения, а оценка эффективности модели проведена с использованием ROC-кривой.

В результате данной работы изучены основные изменения в метаболомном составе плазмы крови при развитии диабетических язв. Предложена модель классификации для предсказания наличия или отсутствия диабетической язвы у пациента с сахарным диабетом. Предполагается, что исследование является первым шагом для дальнейшего исследования и создания модели раннего прогнозирования язв.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ №18-33-20097.

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

Влияние внешнего электрического поля на температуру магнитоструктурного перехода в комплексном соединении на основе железа (II) с 2,6-бис[пиразол-1-ил]пиридином

О. В. Минакова

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Явление спинового кроссовера (СКО) сопровождается значительными изменениями магнитных, оптических и структурных свойств координационного соединения, делая такое соединение перспективным для потенциального применения в области высоких технологий, а именно при создании устройств хранения информации, коммутационных аппаратов, датчиков и дисплеев. Наиболее практичным и удобным в реализации способом контроля спиновых состояний СКО-центров является воздействие на соединение внешним электрическим полем. Возможность такого контроля позволит значительно упростить технологию создания новых электронных устройств на базе СКО-соединений.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния внешнего электрического поля на температуру магнитоструктурного перехода в комплексе железа(II). Исследование проводилось на монокристалле $[\text{Fe}(\text{1-bpp})_2][\text{BF}_4]$, где 1-bpp – 2,6-бис[пиразол-1-ил]пиридин. Контроль магнитоструктурного состояния монокристалла осуществлялся методом Фурье-ИК-микроскопии. Для возможности воздействия на образец внешним электростатическим полем был модернизирован терморегулируемый предметный столик Linkam FTIR600 ИК-микроскопа. Были проведены три серии экспериментов: (i) без приложения электрического поля, (ii) при приложении поля напряженности 14 кВ/см (соответствует приложенному напряжению – 1.0 ± 0.2 кВ) и (iii) 64 кВ/см (соответствует приложенному напряжению – 4.5 ± 0.2 кВ). Было показано, что внешнее электрическое поле сдвигает температуру магнитоструктурного перехода в область меньших значений. Кроме того, была показана квадратичная зависимость температуры спинового перехода от напряженности электрического поля. Полученные результаты согласуются с ранее опубликованным теоретическим обоснованием возможности влияния электрического поля на температуру спинового перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-13-01412.

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

Изучение динамики основной цепи и структурных особенностей RL2 методом ЯМР

С. С. Овчеренко

Новосибирский государственный университет
Институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
СО РАН, Новосибирск

Фрагмент человеческого каппа-казеина – рекомбинантный белок RL2 – способен к прямому проникновению сквозь плазматические клеточные мембраны и индуцированию апоптоза раковых клеток. На основе RL2 был разработан терапевтический агент «Лактаптин», и для него были успешно проведены доклинические испытания.

Казеины относятся к IDP-белкам, для изучения которых используются специальные методы исследования ввиду отсутствия у них упорядоченной структуры. При этом одним из наиболее информативных методов исследования IDP является метод ЯМР [1].

Ранее было показано, что в растворе рекомбинантного белка RL2 наблюдается смесь отдельных мономеров, ковалентных димеров, получающихся за счет образования S-S-связи по единственному остатку цистеина в полипептидной цепи и агрегатов большого размера. В настоящей работе установлено, что в мономерных частицах содержится остаток β-меркаптоэтанола, присоединенный к цистеину путем образования S-S-связи. Образующийся аддукт предотвращает димеризацию RL2 и именно он наблюдается в спектрах ЯМР, в то время как ковалентные димеры находятся преимущественно в агрегатах.

Для однородно меченого образца [¹³C, ¹⁵N]-RL2 было сделано отнесение сигналов в спектрах ЯМР в условиях ацетатного буфера (pH = 3.9) до и после добавления восстановителя ТСЕР, способного восстанавливать S-S до S-H. Также был проведен эксперимент по усилению спиновой релаксации (PRE) с введенной спиновой меткой MTSL в положение 8Cys. Сопоставление полученных данных позволяет выделить более упорядоченный участок в основной цепи белка, находящийся на N-конце (1–43 остатки), внутри которого находится область (30–41 остатки) со склонностью к образованию альфа-спирали. Известно, что этот участок также необходим для цитотоксического действия RL2.

1. Felli I. C., Pierattelli R. Intrinsically disordered proteins studied by NMR spectroscopy // Springer. 2015. Т. 870.

Магнетохимическое исследование комплексов $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ с пропилпиридил замещенными нитронилнитроксилами

А. А. Пономарев

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Особенностью комплексов меди (II) с нитронилнитроксильными радикалами является схожесть поведения их магнитных свойств с классическими соединениями, в которых наблюдаются спиновые переходы. Важно, что в комплексах меди ввиду d^9 электронной конфигурации спиновый переход невозможен. Основное отличие данных комплексов со стабильными органическими радикалами от классических соединений заключается в возможности структурной перегруппировки окружения, что в свою очередь влияет на параметры обменного взаимодействия в соединении и, как следствие, на магнитные свойства. Впервые такие эффекты обнаружены на комплексах $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ с пиридил замещенным нитронилнитроксильным радикалом.

В настоящей работе исследованы комплексы с новыми нитроксильными радикалами, содержащими *n*-пропильный (R^1) или *i*-пропильный (R^2) заместители в четвертом положении пиридинового цикла. При взаимодействии $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ с нитроксилами R^1 и R^2 получены молекулярные $[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^1]_2$, $[\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_4R^2_4]$ и полимерно-цепочечные $\{[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^1]_2[\text{Cu}(\text{hfac})_2]\}_\infty$, $\{[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^2]_2[\text{Cu}(\text{hfac})_2]\}_\infty$ комплексы.

Магнетохимическое исследование показало, что в комплексах $[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^1]_2$, $[\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_4R_4]$ доминируют ферромагнитные обменные взаимодействия, а в комплексах $\{[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^1]_2[\text{Cu}(\text{hfac})_2]\}_\infty$ и $\{[\text{Cu}(\text{hfac})_2R^2]_2[\text{Cu}(\text{hfac})_2]\}_\infty$ обнаружен спиновый переход.

Работа выполнена в рамках проектов 0333-2018-0004 (№ гос. регистрации АААА-А17-117121890006-8) и 0267-2019-0001 (№ гос. регистрации АААА-А16-116121510091-2).

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

Динамика генерации оксидного наноаэрозоля в процессе горения микрокапли алюминия

И. В. Решетников

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск

В течении последних десятилетий выполнены многочисленные исследования горения микрочастиц алюминия в различных условиях (газовые среды, давление, скорости обдува). Горение сопровождается интенсивной генерацией дыма оксидных наночастиц, что является полезным продуктом для ряда нанотехнологий. Исследование динамики генерации оксидного аэрозоля позволяет уточнить представления о механизме и, соответственно, существенно дополнить модель горения. Основные применявшиеся методики: высокоскоростная видеорегистрация горения одиночных микрокапель алюминия (размером 100–400 мкм) в воздухе и локальный отбор нанооксидных продуктов. Получены экспериментальные кривые «интенсивности» генерации нанооксидного дыма вдоль траектории движения горячей микрокапельки Al [1]. Дано полуколичественное объяснение хода этих кривых с учетом физико-химических параметров горения алюминия (нерастворимость и смачиваемость оксида и алюминия, температуры плавления и кипения, парофазный режим горения).

Зарегистрированы осциллирующие по яркости треки и спиральная форма дымовых шлейфов горящих микрокапельки, на основе чего разработана полужемпирическая модель вращения алюминиевой микрокапельки под действием тангенциальной составляющей реактивной силы струи газовых субокислов из-под оксидной нашлепки. Согласно модели при уменьшении начального размера горящих частиц происходит увеличение частоты вращения до нескольких тысяч об/сек, что хорошо соответствует полученным экспериментальным точкам. Спиральная форма дымовых шлейфов, возникающая вследствие вращения, приводит к существенному понижению концентрации нанооксидного дыма, что в итоге уменьшает эффективный размер, т. е. увеличивает удельную поверхность финального продукта.

1. Karasev V. V., Valiulin S. V., Reshetnikov I. V., Bykovskikh A. M., Kalinina A. E. Specific time histories of nanooxide formation during combustion of Al and Ti microparticles // *Energetic Materials Synthesis, Processing, Performance: 49rd International Annual Conference of Fraunhofer ICT*. 2018. P. 130.

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

**Алгоритмическое спиновое охлаждение
при помощи долгоживущих спиновых состояний**

Б. А. Родин

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Алгоритмическое охлаждение – относительно новый способ для увеличения намагниченности в ЯМР. Предложенный в 2001 г. и впервые экспериментально реализованный в 2014 г., он основан на манипуляции с быстро и медленно релаксирующими спинами, позволяя увеличить намагниченность последних за счет возможности первых перекачивать энтропию в окружающую среду-термостат. Мы предлагаем использовать не пару быстро и медленно релаксирующих ядер, а долгоживущие и короткоживущие спиновые состояния. В простейшем случае двухспиновой системы этими состояниями являются триплетные и синглетные состояния.

В данной работе был разработан метод алгоритмического охлаждения для пары двух сильно связанных спинов, обладающих долгой жизнью в отсутствие спин-локинга. Метод был экспериментально реализован для производной молекулы нафталина, известной своей долгой жизнью. Данный метод позволил увеличить синглетный порядок до значения 0,82 от термической намагниченности, что больше теоретически возможного реализуемого спинного порядка $2/3$ для унитарных преобразований. Также удалось увеличить намагниченность двухспиновой системы на 1,23 от термической. Данные методики были реализованы для трех методов генерации синглетного порядка: M2S, APSOC и адиабатический SLIC. Были проведены соответствующие теоретические расчеты, которые показывают, что такой алгоритм может быть осуществим только при достаточной эффективности синглет-триплетных переходов: 0,75 от максимально возможных. Существенным достоинством данного метода является то, что такие переходы не обязаны быть селективными.

Также на основе данного метода был предложен быстрый способ измерения времени жизни долгоживущего синглетного состояния, основанного на рефокусировке синглетного порядка при помощи спинного эха. Данная схема позволяет дать достаточно точную оценку снизу для времени жизни синглетного порядка (200 секунд при реальных 220), существенно сократив время измерения: пятнадцать минут против полутора часа для производной молекулы нафталина.

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

Исследование зарядового состояния цитохромов в эмбрионах мыши при криоконсервации

Е. А. Сажина

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Криоконсервация биологических объектов, в нашем случае преимплантационных эмбрионов мыши, – перспективная методика сохранения генетического материала людей, вымирающих видов растений, животных и др. В настоящее время разработанная методика криоконсервации существует только для некоторых биообъектов из-за недостаточного понимания изменений, происходящих при замораживании биообъектов и связанных с ними криоповреждений. Известно, что после размораживания происходит подавление клеточного дыхания, но причины этого эффекта остаются плохо изученными.

Клеточное дыхание связано с состоянием комплексов дыхательной электрон-транспортной цепи (ЭТЦ). Для изучения изменений в ЭТЦ при криоконсервации достаточно наблюдать за такими переносчиками электронов, как цитохромы. Изменение зарядового состояния цитохромов может быть исследовано оптическими методами. Бесконтактный метод резонансного комбинационного рассеяния света (РКРС) позволяет исследовать изменения в работе дыхательной электрон-транспортной цепи.

Работа посвящена изучению методом РКРС зарядового состояния цитохромов в преимплантационных эмбрионах мыши, замораживаемых в криопротекторном растворе пропиленгликоля и глицерина. Проведено сравнение результатов с дрожжевыми клетками и эмбрионами мыши, замораживаемыми в растворе глицерина. Построены распределения цитохромов, липидов, глицерина и других клеточных компонент в образце. Подтверждено фотоиндуцированное увеличение интенсивности РКРС линии цитохромов на 750 см^{-1} на температуре $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-016-00025.

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

**Влияние пептида Tylorepitin B
на структуру модельной биологической мембраны
по данным электронного парамагнитного резонанса**

Н. Э. Санникова

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

Из-за привыкания болезнетворных бактерий к существующим антибиотикам в настоящее время проводится активный поиск антибиотиков новых типов. Антимикробные пептиды являются важной частью врожденной иммунной системы. Считается, что они нарушают целостность клеточных мембран, что приводит к гибели бактериальных клеток. Благодаря этому механизму пептиды могут использоваться в качестве антибиотиков. Таким образом, исследование механизмов действия пептидов на биологические мембраны является важной задачей.

В работе методом импульсного и стационарного ЭПР изучалось взаимное пространственное расположение спиновых меток пептида Tylorepitin B в 3, 8 и 13 положениях в модельной мембране. В качестве меток использовались стабильные нитроксильные радикалы. Данный пептид является пептидом средней длины (16 аминокислотных остатков, влияние которых на биологические мембраны в настоящее время мало изучено). Для моделирования биологической мембраны использовался липид POPC (1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine). Было обнаружено, что Tylorepitin B образует агрегаты уже при достаточно низких концентрациях (при пептид-липидном соотношении в диапазоне от 1/1000 до 1/1500). Было установлено, что метка в третьем положении независимо от концентрации располагается вблизи поверхности мембраны.

Также были проведены исследования влияния пептида на меченную в седьмом положении стеариновую кислоту при помощи альтернативного подхода в изучении нанокластеров в мембране – метода мгновенной диффузии.

Таким образом, была обнаружена агрегация Tylorepitin B при низких концентрациях и расположение метки вблизи поверхности модельной мембраны.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук В. Н. Сырямина,
канд. хим. наук А. Г. Матвеева

**^{15}N МРТ-визуализация молекул
с использованием метода SLIC-SABRE**

А. И. Святова

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Низкая чувствительность методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и магнитно-резонансной томографии (МРТ) обусловлена малой разницей населенностей спиновых уровней при термическом равновесии. Для создания неравновесной разницы населенностей уровней используются различные методы гиперполяризации, например, усиление сигнала в результате обратимого обмена параводорода (SABRE).

В методе SABRE усиление сигнала ЯМР происходит при переносе поляризации с присоединенного параводорода на лабильный лиганд металлоорганического комплекса Ir. Данный процесс может происходить в сильном (HF-SABRE) или слабом магнитном поле. В HF-SABRE процесс гиперполяризации происходит спонтанно в сильном магнитном поле спектрометра ЯМР.

К настоящему времени большинство МРТ-работ с использованием подхода SABRE выполнены по ядрам водорода (^1H). Однако короткое время жизни гиперполяризованных молекул и большая интенсивность фонового сигнала в экспериментах с живыми тканями ограничивают возможные приложения данного метода. Решением данной проблемы является использование других ядер, например, азота (^{15}N), что существенно расширяет применимость метода и позволяет получать и использовать долгоживущие гиперполяризованные биомолекулы в качестве контрастных агентов в МРТ. Перенос поляризации на ядра, отличные от ^1H , в сильных магнитных полях можно выполнять с помощью импульсных последовательностей. В данной работе применялась последовательность SLIC-SABRE.

Для ^{15}N меченных ^{15}N -пиридина ($^{15}\text{N-py}$) и ^{15}N -никотинамида ($^{15}\text{N-nic}$), а также диметиламинопиридина (DMAPI) с естественным содержанием азота наблюдалось усиление сигнала по ядрам ^{15}N в 1374, 834 и 22000 раз соответственно. Данного усиления было достаточно для получения изображений методом ^{15}N МРТ. В качестве импульсной последовательности была выбрана последовательность FLASH, которая позволила регистрировать изображения менее, чем за одну секунду.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-33-20019 мол_а_вед.

Научный руководитель – канд. хим. наук К. В. Ковтунов

Изучение человеческого сывороточного альбумина методами ЭПР-спектроскопии

А. С. Спицына

Новосибирский государственный университет

Институт органической химии имени Н. Н. Ворожцова

СО РАН, Новосибирск

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Человеческий сывороточный альбумин (ЧСА) отвечает за транспорт различных веществ в организме человека. Этот белок используется в качестве средства доставки лекарств в клетки опухолей благодаря продолжительной циркуляции в крови, высокой биосовместимости и способности накапливаться в раковых клетках. Также альбумин участвует в образовании белковых бляшек в нейронах головного мозга, приводящих к нейродегенеративным заболеваниям. Методы дипольной ЭПР-спектроскопии вместе с ведением спиновых меток в альбумин дают возможность исследовать его конформацию и измерять распределения по расстояниям между метками.

Среди спиновых меток наиболее распространены нитроксильные радикалы, однако им свойственна быстрая фазовая релаксация, что затрудняет их использование в импульсных дипольных ЭПР-методах при температурах выше 80 К. В качестве альтернативы возможно использование триарилметильных радикалов, имеющих требуемые времена релаксации уже при комнатных температурах. Из-за гидрофобности триарилметильным меткам свойственна агрегация между собой и на поверхности белков. Для решения этой проблемы в НИОХ СО РАН была синтезирована новая гидрофильная триарилметильная спиновая метка ОХ063. Наиболее эффективно для измерения расстояний использование нитроксильной и триарилметильной меток в биомолекуле в качестве ортогональных меток.

В данной работе методами стационарной и импульсной ЭПР-спектроскопии исследовался ЧСА с использованием спиновых меток MTSL и ОХ063. Были получены распределения по расстояниям, времена фазовой релаксации меток, а также исследованы подвижность и окружение меток.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-04-00393.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева

**Триплетный фуллерен
для измерения нанометровых расстояний методом ЭПР**

И. О. Тимофеев

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Измерение нанометровых расстояний методами дипольного ЭПР играет большую роль в структурных исследованиях биомолекул и их комплексов. Чувствительность, доступные для измерения расстояния и экспериментальные температуры определяются свойствами спиновых меток. Проведение типичного эксперимента с нитроксильными метками требует температуры ниже 80 К и концентрации макромолекул 10–100 мкМ, при которой биологические комплексы могут агрегировать.

В данной работе мы предлагаем использовать фотовозбужденный фуллерен в качестве спиновой метки для измерения расстояний методом ЭПР. Триплетный фуллерен имеет интенсивный поляризованный сигнал ЭПР и сравнительно узкий спектр, а его релаксационные свойства позволяют проводить эксперименты при близкой к комнатной температуре. Возможности предлагаемого подхода продемонстрированы на примере ковалентных пар фуллерена со спиро-нитроксильным ($C_{60}NIT$) и тритильным радикалами ($C_{60}TAM$), а также посредством комплекса модифицированного фуллерена с белком альбумина, селективно меченым нитроксильным радикалом ($C_{60}:HSA-NIT$).

Сигналы PELDOR (импульсного двойного электронного резонанса), полученные для ковалентных пар в толуоле при 20 К, характеризуются глубокой модуляцией (30 % для $C_{60}NIT$ и 70 % для $C_{60}TAM$) и единым доминирующим расстоянием. Пара $C_{60}TAM$ также изучена в орто-терфениле при 234 К и в октаацетате сахарозы при 277 К. PELDOR комплекса $C_{60}:HSA-NIT$ в воде при 50 К показал, что сайт связывания фуллерена находится на расстоянии менее 5 нм от Cys34 в альбумине. Таким образом, фотовозбужденные триплетные фуллерены представляют собой новые перспективные спиновые метки с превосходными свойствами для структурных исследований методами дипольной ЭПР-спектроскопии.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-73-00292.

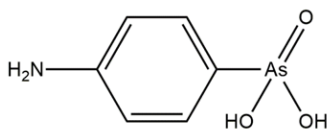
Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева

Фотохимия растворов пара-арсаниловой кислоты

Ю. Е. Тютерева

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

Пара-арсаниловая кислота (p-ASA) является представителем мышьяксо-
держащих кормовых добавок, широко используемых в животноводстве и птице-
водстве в качестве антибиотиков для стимулирования роста и профилактики
заболеваний животных [1]. Хотя сами кормовые добавки обладают низкой ток-
сичностью, продукты их биологического и (фото)химического разложения –



Структурная формула
пара-арсаниловой кислоты

неорганические соединения мышьяка и
другие органические побочные продукты
– проявляют значительную токсичность
для живых организмов [2]. В связи с этим
наблюдается интерес к изучению меха-
низмов деградации данных соединений в
окружающей среде и процессах водо-
очистки.

В данной работе эксперименты проводились методами стационарного
(безозоновая лампа Radium Purites, 254 нм) и лазерного импульсного
фотолиза (Nd:YAG лазера, 266 нм), жидкостной хроматографии и масс-
спектрометрии.

В ходе работы был пересмотрен существовавший в литературе механизм
фотолиза p-ASA, показано что основным первичным фотопроцессом явля-
ется фотоионизация. Определена зависимость квантового выхода
фотолиза от длины волны возбуждения и содержания кислорода в растворе,
идентифицированы основные продукты фотолиза p-ASA. Полученные дан-
ные важны для понимания механизма фотодегradации p-ASA под дей-
ствием УФ-облучения в процессах водоочистки.

1. Jones F. T. A broad view of arsenic // Poult. Sci. 2007. Vol. 86. P. 2–14.

2. Cortinas I., Field J. A., Kopplin M. et al. Anaerobic biotransformation of roxarsone
and related N-substituted phenylarsonic acids // Environ. Sci. Technol. 2006. Vol. 40.
P. 2951–2957.

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

Первичные процессы в фотохимии и фотофизике комплекса *транс*-Ru(IV), перспективного для применения в фотодинамической терапии

А. А. Шушаков

Новосибирский государственный университет

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

Комплексы Ru^{IV} тестируются в качестве пролекарств для противоопухолевой фотодинамической терапии (ФДТ), не требующей присутствия кислорода. Актуальность исследования пролекарств на основе комплексов Ru обусловлена их цитотоксичностью. Для комплекса *транс*-[RuCl₂(DMSO)₄] (1) было установлено, что данное соединение может ингибировать транскрипцию генов прямым фотоиндуцированным переносом электронов между комплексом и ДНК. При растворении (1) в воде происходят быстрые реакции замещения лигандов с образованием комплекса *транс*-, *цис*-, *цис*-[RuCl₂(DMSO)₂(H₂O)₂] (2).

В работе методами стационарного фотолиза и наносекундного лазерного импульсного фотолиза (возбуждение на 355 нм, временное разрешение ~ 5 нс) были получены результаты, отличные от представленных в литературе [1], что вызывает интерес для дальнейшего изучения. Также в представленной работе методом сверхбыстрой кинетической спектроскопии (возбуждение на 400 нм, временное разрешение ~ 100 фс) исследовались первичные фотохимические процессы для комплекса (2) в воде и в бескислородной среде. Кинетические кривые удовлетворительно описываются в рамках трехэкспоненциальной модели, соответствующей последовательной трансформации интермедиатов. Предполагается, что в этом случае первичным фотопроцессом является внутрисферный перенос электрона с хлорид-иона на центральный катион с образованием интермедиата Ru(I).

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 18-33-00009).

1. M. Brindell, G. Stochel, V. Bertolasi et al. Inorg. Chem. 2007. P. 2353.

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

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Альянова Н. В.	46	Лагунов Т. А.	13
Андреев И. Н.	23	Лисицкий В. А.	6
Ахметьянова А. Е.	47	Матвеев А. Е.	31
Ашкарин И. Н.	48	Машковцев М. А.	25
Бажукова И. Н.	25	Мельников А. Д.	62
Бакулина О. Д.	49	Минакова О. В.	63
Бакшеева Е. О.	25	Мищенко И. Б.	38
Беспалова А. С.	50	Муравлёв С. Б.	14
Бунеева П. С.	26	Мышкина А. В.	25
Буянов Д. А.	5	Насибуллин Р. В.	32
Вагапов С. А.	51	Овчеренко С. С.	64
Вайгель Л. А.	27	Оскеро Д. С.	15
Васильев П. В.	23	Павлов А. В.	32
Васильева Д. В.	23	Паулиш А. А.	39
Волошин Б. В.	28	Паулиш Н. А.	40
Герт С. С.	29	Петенев И. В.	41
Гладких П. Д.	52	Петухова Д. Е.	38
Глазнев Р. К.	53	Пичуев А. Д.	16
Голубцов Г. В.	30	Политко М. О.	17
Гражданников С. А.	6	Пономарев А. А.	65
Гребёнкина М. А.	54	Прокаева А. И.	17
Гусев В. А.	7	Решетников И. В.	66
Даугбаева Д. Б.	31	Родин Б. А.	67
Демьяненко А. В.	55	Сажина Е. А.	68
Дудышева Н. М.	56	Саламатов И. Н.	42
Егорова А. Д.	23	Санникова Н. Э.	69
Жагупаров Д. Е.	57	Сапрыкин Д. Н.	32
Журавлёва К. В.	8	Свинцова А. А.	18
Замосковцева А. А.	9	Святова А. И.	70
Захарова Е. В.	32	Семерикова А. И.	43
Казначеева А. М.	33	Синицын С. А.	19
Кандаракова И. Т.	58	Спирёва Д. В.	20
Касьянова В. В.	25	Спицына А. С.	71
Кизилова В. А.	10	Тимофеев И. О.	72
Козиненко В. П.	59	Трекова Я. А.	29
Козлачков Д. А.	34	Тружников В. Ю.	29
Кононенко Е. С.	60	Тютерева Ю. Е.	73
Кононова П. А.	11	Ушканов А. А.	44
Кошман В. Е.	12	Филатова Н. А.	15
Кременко С. И.	35	Хрусталев А. П.	31
Курганский И. В.	61	Цидулко А. Ю.	17
Курчев А. В.	36	Чеблакова И. Г.	21
Кушнерева Д. С.	37	Шелепова С. Ю.	33

Шторк А. С. 22

Шушаков А. А. 74

СОДЕРЖАНИЕ

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА	5
Буянов Д. А.	5
Гражданников С. А., Лисицкий В. А.	6
Гусев В. А.	7
Журавлёва К. В.	8
Замосковцева А. А.	9
Кизилова В. А.	10
Кононова П. А.	12
Кошман В. Е.	13
Лагунов Т. А.	14
Муравлёв С. Б.	15
Оскеро Д. С., Филатова Н. А.	16
Пичуев А. Д.	17
Политко М. О., Прокаева А. И., Цидулко А. Ю.	18
Свинцова А. А.	19
Синицын С. А.	20
Спирёва Д. В.	21
Чеблакова И. Г.	22
Шторк А. С.	23
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ	24
Андреев И. Н., Васильев П. В., Васильева Д. В., Егорова А. Д.	24
Бажукова И. Н., Бакшеева Е. О., Касьянова В. В., Машковцев М. А., Мышкина А. В.	26
Бунеева П. С.	27
Вайгель Л. А.	28
Волошин Б. В.	29
Герг С. С., Трекова Я. А., Тружников В. Ю.	30
Голубцов Г. В.	31
Даутбаева Д. Б., Матвеев А. Е., Хрусталев А. П.	32
Захарова Е. В., Насибуллин Р. В., Павлов А. В., Сапрыкин Д. Н.	33
Казначеева А. М., Шелепова С. Ю.	34
Козлачков Д. А.	35
Кременко С. И.	36
Курчев А. В.	37
Кушнерева Д. С.	38
Мищенко И. Б., Петухова Д. Е.	39
Паулиш А. А.	40
Паулиш Н. А.	41

Петенев И. В.....	42
Саламатов И. Н.	43
Семерикова А. И.....	44
Ушканов А. А.....	45
Чжан С.	46
ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....	47
Альянова Н. В.	47
Ахметьянова А. Е.	48
Ашкарин И. Н.	49
Бакулина О. Д.	50
Беспалова А. С.	51
Вагапов С. А.....	52
Гладких П. Д.	53
Глазнев Р. К.....	54
Гребёнкина М. А.....	55
Демьяненко А. В.....	56
Дудышева Н. М.....	57
Жагупаров Д. Е.....	58
Кандаракова И. Т.....	59
Козиненко В. П.....	60
Кононенко Е. С.	61
Курганский И. В.	62
Мельников А. Д.	63
Минакова О. В.	64
Овчеренко С. С.	65
Пономарев А. А.	66
Решетников И. В.....	67
Родин Б. А.	68
Сажина Е. А.	69
Санникова Н. Э.....	70
Святова А. И.....	71
Спицына А. С.....	72
Тимофеев И. О.....	73
Тютерева Ю. Е.....	74
Шушаков А. А.....	75
Авторский указатель.....	76

Научное издание

МНСК-2019

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы

57-й Международной научной студенческой конференции

Корректор *Я. О. Козлова*
Верстка *О. А. Тенкеджи*
Обложка *Е. В. Неклюдовой*

Подписано в печать 09.04.2019 г.
Формат 60x84/16 Уч. -изд. л. 4,9. Усл. печ. л. 4,5.
Тираж экз 73. Заказ № 38.
Издательско-полиграфический центр НГУ
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Секция
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

ISBN 978-5-4437-0866-9



N* Новосибирский
государственный
университет
***НАСТОЯЩАЯ НАУКА**

