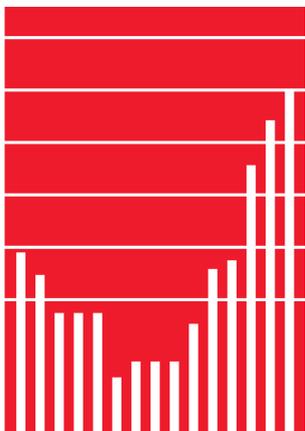
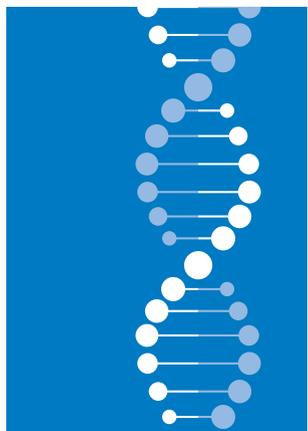
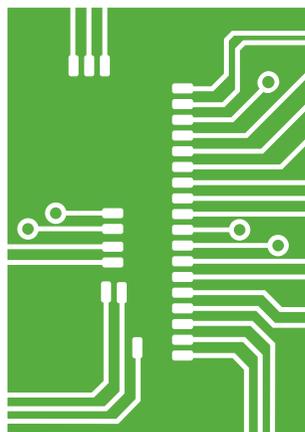
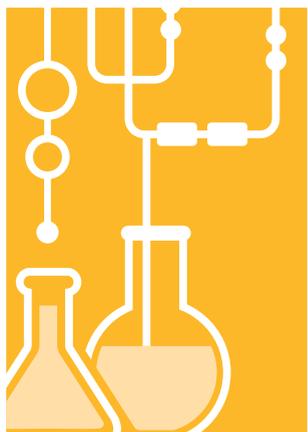


Материалы секции

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ
И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**



10-13 апреля 2020
НОВОСИБИРСК

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МНСК-2020

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ
И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Материалы
58-й Международной научной студенческой конференции

10–13 апреля 2020 г.

Новосибирск
2020

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,
канд. физ.-мат. наук А. Е. Москаленский

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 хим. наук, проф. Е. В. Болдырева, д-р физ.-мат. наук Я. В. Зубавичус,
д-р техн. наук Д. В. Дудина, канд. физ.-мат. наук В. В. Каичев,
канд. физ.-мат. наук С. С. Якушкин, канд. физ.-мат. наук Д. А. Яценко,
канд. физ.-мат. наук С. Н. Трухан, канд. хим. наук В. А. Дребушак,
канд. хим. наук А. А. Матвиенко, канд. хим. наук Б. А. Захаров,
канд. геол.-минерал. наук С. В. Рашенко, В. В. Никулин

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:
д-р физ.-мат. наук, чл-корр. РАН Н. В. Суровцев,
д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба, д-р хим. наук, проф. А. А. Онищук,
д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан,
д-р физ.-мат. наук Н. Н. Медведев, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер,
канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев, канд. физ.-мат. наук Д. И. Колоколов

Ф 505 Физические методы в естественных науках и материаловедении : Материалы 58-й Междунар. науч. студ. конф. 10–13 апреля 2020 г. / Новосибир. гос. ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2020. — 112 с.

ISBN 978-5-4437-1063-1

УДК 33
ББК Б в672я431

© СО РАН, 2020
© Новосибирский государственный университет, 2020

ISBN 978-5-4437-1063-1

NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY
SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

ISSC-2020

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

Proceedings
of the 58th International Students Scientific Conference

April, 10–13, 2020

Novosibirsk
2020

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. Strokotov,
Cand. Phys. Math. A. G. Maryasov, Cand. Phys. Math. Yu. I. Glazachev,
Cand. Phys. Math. V. M. Nekrasov, Cand. Phys. Math. A. E. Moskalenskiy

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. Chem, Prof. E. V. Boldyreva, Dr. Phys. Math. Ya. V. Zubavichus,
Dr. Tech. D. V. Dudina, Cand. Phys. Math. V. V. Kaichev,
Cand. Phys. Math. S. S. Yakushkin, Cand. Phys. Math. D. A. Yatsenko,
Cand. Phys. Math. S. N. Trukhan, Cand. Chem. V. A. Drebuschak,
Cand. Chem. A. A. Matvienko, Cand. Chem. B. A. Zakharov,
Cand. Geol. Mineral. S. V. Rashchenko, V. V. Nikulin

Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:

Dr. Phys. Math., Assoc. Prof. N. V. Surovtsev,
Dr. Phys. Math., Prof. S. A. Dzuba, Dr. Chem., Prof. A. A. Onishchuk,
Dr. Chem., Prof. A. V. Baklanov, Dr. Chem., Prof. N. P. Gritsan,
Dr. Phys. Math. N. N. Medvedev, Cand. Phys. Math. S. L. Veber,
Cand. Phys. Math. V. G. Kiselev, Cand. Phys. Math. D. I. Kolokolov

Ф 505 Physical methods in natural sciences : Proceedings of the 58th International Students Scientific Conference. April, 10–13, 2020 / Novosibirsk State University. — Novosibirsk : IPC NSU, 2020. — 112 p.

ISBN 978-5-4437-1063-1

УДК 33
ББК Б в672я431

ISBN 978-5-4437-1063-1

© SB RAS, 2020
© Novosibirsk State University, 2020

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 577.354.9

Стимуляция отолитовых органов во время поворотов головы

А. Д. Абдыкеримов

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Отолитовые органы человека являются важнейшей структурной частью вестибулярной системы, ответственной за восприятие линейных ускорений головы и гравитации. Как и любой другой орган в человеческом организме, вестибулярная система и ее структурные части подвержены тем или иным факторам, которые могут приводить к дисфункции органа равновесия и, как следствие, потере человеком чувства баланса как статического, так и в движении. Для выявления нарушений в работе вестибулярного аппарата используются различные тесты: калорический, тест на вращающемся кресле и тест импульса головы. Все они направлены на диагностику функции полукружных каналов. В настоящее время тест импульса головы [1] является самым распространенным методом функционального тестирования шести полукружных каналов. Он заключается в резком вынужденном повороте головы на 20–30 градусов на скорости порядка 150–300 град/сек с одновременным детектированием движения глаз.

Однако в данной методике не учитывается вклад отолитового органа в реакционную способность вестибулярной системы в целом. Считается, что лишь полукружные каналы ответственны за восприятие поворотов, хотя при таких скоростях поворота головы отолиты должны неизбежно испытывать центробежное ускорение, в несколько раз превышающее пороговые значения их чувствительности в $0,08-0,14 \text{ м/сек}^2$ [2].

По результатам теста импульса головы у 50 здоровых добровольцев был построен усредненный график скорости поворота головы во время теста. Для обработки данных, полученных во время тестирования, а также для вычисления величины центробежных сил, приложенных к отолитовым органам, использовался программный пакет *Matlab*.

На основании проведенных расчетов выдвинута гипотеза о вкладе отолитов (утрикулусов) в вестибулоокулярную реакцию на поворот головы при больших скоростях.

1. Halmagyi G. M. et al. The video head impulse test // Front. Neurol. Frontiers Media S. A., 2017. Vol. 8, № JUN. doi: 10.3389/fneur.2017.00258

2. Dupuits B. et al. A new and faster test to access vestibular perception // Front. Neurol. Frontiers Media S. A. 2019. Vol. 10, № JUL. doi: 10.3389/fneur.2019.00707.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин,
М. О. Плешков

Непрерывная церебральная и тканевая оксиметрия с использованием разработанного ИК-спектрометра

Д. А. Буянов¹, С. В. Забодаев²

¹Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Зеленоград

²Медицинские компьютерные системы, Москва

Церебральная и тканевая оксиметрия является одним из методов неинвазивной медицинской спектроскопии в красном и ближнем инфракрасном диапазонах. Оксиметрия позволяет определить функциональную активность биологических тканей и их метаболизм, транспорт кислорода и гипоксические условия. Оценка кислородного статуса во время анестезии является одной из важнейших проблем анестезиологии и хирургии. Неврологические расстройства являются одним из наиболее распространенных анестезиологических осложнений. Причиной осложнений является церебральная гипоксия, длительная гипоксия приводит к смерти в 80 % случаев.

Было разработано четырехканальное устройство для БИК-спектроскопии мозга или мышц при научном эксперименте или медицинском исследовании. Устройство упростит работу анестезиологов и позволит контролировать состояние мозга на предмет гипоксии. Во время эксперимента возможно использование нескольких устройств одновременно, их количество ограничено только размерами исследуемой области.

Для подтверждения работоспособности устройства был проведен эксперимент на окклюзию с использованием сфигмоманометра и ремня для крепления устройства на руке. Рука находилась в состоянии покоя в течение 2 минут, после чего стимулировалась окклюзия с помощью сфигмоманометра, после окклюзии рука восстанавливалась 2 минуты. Полученные кривые оксигенированного и деоксигенированного гемоглобина были преобразованы в процент насыщения тканей кислородом (StO_2). Как только окклюзия была достигнута, сфигмоманометр ослабил давление и процент StO_2 был восстановлен.

Полученные результаты повторяют графики прошлых исследований, что можно классифицировать как доказательство работоспособности разработанного устройства.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Д. А. Потапов

**Исследование влияния гликированного гемоглобина
на определение условного возраста эритроцита
методом сканирующей проточной цитометрии**

А. В. Гисич

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

Гемоглобин — это красный железосодержащий пигмент крови человека, выполняющий транспортно-дыхательную функцию, состоящий из белковой части глобина и не белковой — гема. В крови гемоглобин существует по меньшей мере в трех формах: это оксигемоглобин — соединение с кислородом, образующееся преимущественно в артериальной крови и придающее ей алый цвет, дезоксигемоглобин — гемоглобин, отдавший кислород тканям, и гликированный гемоглобин (HbA1c), образующийся в результате присоединения к глобину глюкозы. Мы сфокусировали свое внимание на последнем. Рост уровня HbA1c происходит при избытке глюкозы в крови, возникающем при сахарном диабете. Поэтому анализ на HbA1c — это эффективный и необходимый метод в диагностике сахарного диабета, так как он отражает среднее содержание сахара в крови за последние 3–4 месяца.

Из литературы известно, что с возрастом эритроцит теряет объем и содержание гемоглобина. Также известно, что содержание HbA1c напрямую зависит от возраста эритроцитов в кровотоке, так как чем дольше эритроциты находятся в крови с определенным уровнем глюкозы, тем больше они гликируются. Иными словами, старые эритроциты более мелкие, с меньшим содержанием гемоглобина и большей долей HbA1c, молодые эритроциты — более крупные, с большим содержанием гемоглобина и меньшей долей HbA1c.

В работе изучается корреляция у доноров и пациентов между скоростью гликирования (точкой перегиба на кривой условного возраста эритроцитов) и значениями HbA1c. Однако варьирование среднего возраста эритроцитов приводит к значениям, которые колеблются от более низкого до более высокого, чем ожидалось. Это может привести к неправильному клиническому лечению.

Таким образом, основные цели и задачи данной работы — рассчитать возраст с учетом плотности распределения эритроцитов и связать особенность поведения эритроцитов вблизи гибели с содержанием HbA1c.

Для достижения цели была введена функция, достоверно описывающая зависимость HbA1c от объема, и приведены возможные варианты функции плотности распределения для более точного определения условного возраста эритроцитов.

Научный руководитель — Е. С. Ястребова

**Моделирование комптоновского рассеяния гамма-квантов
в позитронной эмиссионной томографии**

М. А. Гурко

Новосибирский государственный университет

Позитронная эмиссионная томография (ПЭТ) — это радионуклидный томографический метод визуализации метаболических процессов, а именно распределения радионуклидных фармацевтических препаратов (радиофармпрепаратов), по организму пациента. Испытывая распад, радиоактивные ядра радиофармпрепарата испускают позитрон, который аннигилирует с испусканием пары гамма-квантов. Эти гамма-кванты разлетаются в практически строго противоположных направлениях и регистрируются детекторами, что позволяет провести линию, проходящую через точку аннигиляции позитрона. Эта линия называется линией отклика (ЛО) (англ. *Line-of-Response* — *LOR*) [1]. Однако гамма-кванты, проходя через вещество между точкой аннигиляции позитрона и детектором, могут испытывать различные виды взаимодействия, основным из которых является эффект Комптона (комptonовское рассеяние) [2]. В результате комптоновского рассеяния угол между парой гамма-квантов становится отличен от 180° и мы имеем ЛО, которая смещена относительно точки аннигиляции позитрона, что в свою очередь дает ложную информацию о распределении радиофармпрепарата.

В данной работе изучаются методы численного моделирования комптоновского рассеяния, которое описывается формулой Клейна — Нишины — Тамма [2]. Построен алгоритм, позволяющий анализировать смещение ЛО вследствие многократного комптоновского рассеяния.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 19-02-00244 А.

1. Del Guerra A., Belcari N., Bisogni M. Positron Emission Tomography: Its 65 years // Rivista del nuovo cimento. 2016. Vol. 39, №. 4. P. 155–223.

2. Беспалов В.И. Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом. 4-е изд. Томск : Изд-во Томского политех. ун-та, 2008.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Н. В. Денисова

Измерение оксигемоглобина в эритроцитах методом двухволновой сканирующей проточной цитометрии

И. А. Долгих

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

Проточная цитометрия широко применяется в биологических и медицинских исследованиях, связанных с эритроцитами крови человека. Высокая скорость измерений проточных цитометров, а также их чувствительность и статистическая достоверность позволяют получать необходимые характеристики клеток крови, описывающие их морфологические, оптические и функциональные характеристики. Однако стандартные модели цитометров способны выдавать ограниченное количество информации от исследуемых на них клеток: два сигнала светорассеяния (рассеяние вперед и вбок) и несколько сигналов флуоресценции. Данной информации хватает для грубой оценки параметров клеток крови, но недостаточно для детального описания всех оптических, морфологических и функциональных характеристик клеток.

Сканирующая проточная цитометрия расширяет возможности в получении информации от исследуемых клеток. Благодаря своей конструкции, сканирующий проточный цитометр позволяет получать сигнал светорассеяния в диапазоне полярных углов 10° – 70° . Метод сканирующей проточной цитометрии позволяет более точно оценить параметры клеток крови, однако некоторые проблемы в описании морфологических и функциональных характеристиках клеток, например измерение доли оксигемоглобина, все еще остаются неразрешенными. Измерение доли оксигемоглобина дает возможность исследовать функциональные характеристики эритроцитов крови человека, связанные с переносом кислорода и углекислого газа в крови.

Было решено внести в конструкцию сканирующего проточного цитометра изменения в виде использования двух лазеров на двух разных длинах волн (660 нм и 442 нм) для исследования сигналов светорассеяния от эритроцитов крови человека. Были проведены эксперименты с использованием сферизованных эритроцитов. Результаты экспериментов показали статистически достоверную возможность исследования гемоглобина и доли оксигемоглобина в эритроцитах на сканирующем проточном цитометре с использованием сигналов светорассеяния на двух длинах волн, а также увеличение точности характеристики эритроцитов при использовании одновременно двух дин волн.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. В. Гилев

Получение комплексов катионных полимеров с ДНК-вакцинными конструкциями, кодирующими эпитопы белков вируса Эбола

С. Г. Дудко

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

Несмотря на успехи последних лет в профилактике инфекционных заболеваний, против ряда вирусов (в том числе вируса Эбола) на сегодняшний день еще не создано эффективных вакцин.

Одним из перспективных подходов является конструирование ДНК-вакцин, кодирующих искусственные полиэпитопные иммуногены, состоящих из набора протективных эпитопов. Ранее в ФБУН ГНЦ Вб «Вектор» был проведен дизайн искусственных поли-CTL- и поли-Th иммуногенов, включающих Т-клеточные эпитопы из белков вируса Эбола. Получены ДНК-вакцины (pEV.CTL и pEV.Th), кодирующие вышеуказанные иммуногены. Было показано, что иммунизация мышей данными ДНК-вакцинными конструкциями индуцирует статистически значимый специфический иммунный ответ.

Целью данной работы стало повышение иммуногенности ДНК-вакцин pEV.CTL и pEV.Th за счет получения комплексов плазмид с катионными полимерами: с полиамидаминовым дендримером 4-го поколения (PAMAM G4) и конъюгатом полиглукон:спермидин (PG). С помощью динамического светорассеяния, измерения дзета-потенциала, электронной микроскопии и электрофореза были проанализированы условия комплексообразования. Были выбраны оптимальные условия по таким параметрам, как размеры частиц, поверхностный заряд, а также степень связывания ДНК с катионными полимерами. Проведена иммунизация мышей линии BALB/c следующими вариантами вакцинных конструкций: pE-CTL+pE-Th; комплексами pE-CTL+pE-Th с PAMAM; комплексами pE-CTL+pE-Th с PG, pcDNA3.1 и интактной группы. Иммунный ответ оценивали с помощью метода внутриклеточного окрашивания цитокинов (ICS) по числу спленоцитов, продуцирующих IFN- γ и IL-2. Стимуляцию клеток проводили смесью пептидов, входящих в состав целевых антигенов. Измерения проводились на проточном цитометре BD FACSCalibur. Полученные результаты показали, что комбинации ДНК-вакцинных конструкций в оболочке с катионными полимерами индуцирует более высокий ответ по сравнению с голыми плазмидными ДНК-вакцинами.

Научный руководитель — д-р биол. наук, доц. Л. И. Карпенко

**Исследование нового типа
пространственной организации нуклеиновых кислот**

А. А. Замосковцева

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии
и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск

Нуклеиновые кислоты (НК) выполняют регуляторные функции в различных молекулярно-биологических процессах. Во многом они определяются вторичной и третичной структурой НК. Ранее в ИХБФМ СО РАН был обнаружен новый тип пространственной укладки НК, представляющий собой замкнутый самоограниченный бимолекулярный комплекс, названный псевдоузлом TW-типа (твиплексом). Он может реализовываться в ДНК, РНК или гибридных ДНК/РНК комплексах, а также может быть сформирован одной цепью.

Целью работы является определение возможности реализации таких структур в живых системах.

Разработан алгоритм биоинформатического анализа генома человека, осуществляющий поиск последовательностей, удовлетворяющих условиям формирования самоограниченных комплексов. Рассмотрены структуры с длиной двухцепочечного участка от 5 до 20 пар оснований. Обнаружены участки генома, потенциально способные формировать твиплексы. Проведен отбор последовательностей с целью исключения последовательностей, образующих альтернативные структуры. Проанализированы принадлежность полученных последовательностей генам и их расположение в интронах или экзонах. Начаты экспериментальные исследования, направленные на изучение физико-химических и молекулярно-биологических свойств выбранных нуклеотидных последовательностей.

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 коллиматора
на формирование проекционных данных
в методе однофотонной эмиссионной компьютерной томографии**

А. Н. Коновалов

Новосибирский государственный университет

Однофотонная эмиссионная компьютерная томография (ОФЭКТ) — диагностический метод создания томографических изображений распределения радионуклидных фармацевтических препаратов (радиофармпрепаратов) в организме пациента. Ядра атомов радиофармпрепарата испытывают радиоактивный распад, при котором испускается одиночный фотон (гамма-квант). Испущенные гамма-кванты проходят через ткани пациента и затем регистрируются гамма-камерами, вращающимися вокруг тела пациента. Для восстановления исходного местоположения источника фотонов необходима информация о траектории детектируемых фотонов. Для этого служит коллиматор, который отображает траектории фотонов. Коллиматор представляет собой пластину со множеством мелких отверстий [1].

Данная работа посвящена исследованию функции рассеяния точки (ФРТ) (анг. *Point Spread Function — PSF*) [2], которая определяет качество изображения. ФРТ определяет пространственное распределение плотности гамма-квантов, испущенных точечным источником, в зависимости от его расстояния от поверхности коллиматора. Выполнен расчет ФРТ для коллиматора высокого разрешения низкой энергии (*LEHR — Low Energy High Resolution*), который применяется при обследовании пациентов в ядерной кардиологии. Проведено сравнение с распространенным в литературе приближением ФРТ с помощью гауссовского распределения.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 19-02-00244 А.

-
1. Frey E. C., Tsui B. M. W. Collimator-Detector Response Compensation in SPECT // *Quantitative Analysis in Nuclear Medicine Imaging*. 2006. P. 141–166.
 2. Formiconi A. R. Geometrical response of multihole collimators // *Phys. Med. Biol.* 1998. Vol. 43. P. 3359–3379.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Н. В. Денисова

Создание и вариация оптических моделей мононуклеарной клетки для исследования активации моноцитов и лимфоцитов *in vitro* по морфологическим изменениям

Е. А. Лиз

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

Моноциты и лимфоциты являются мононуклеарными клетками иммунной системы человека, которая представляет собой совокупность различных органов и лимфоидных клеток, способных проникать во все ткани организма и устранять раздражители. Сбой работы одного компонента приводит к развитию аутоиммунных болезней, опухолей и аллергии. Исследование поведения и активации моноцитов в условиях различных раздражителей является актуальной задачей для иммунологии и медицины.

В данной работе процесс активации клеток исследовали с помощью сканирующего проточного цитометра, позволяющего измерить светорассеяние от каждой клетки поштучно в широком диапазоне углов. Для определения характеристик клеток необходимо построить оптическую модель и решить обратную задачу светорассеяния методом многократной подгонки на основе теории Ми. Исходя из того факта, что исследуемые клетки являются мононуклеарными, была разработана оптическая модель в виде двуслойной гомогенной сферы. По результатам экспериментов данная модель не является удовлетворительной, описывая лишь 9,7 % от популяции клеток с ошибкой определения параметра менее 10 %. Возможной причиной таких результатов является негомогенное ядро. Для проверки данного предположения были измерены ядра клеток на сканирующем проточном цитометре. Модель гомогенной сферы описывает 23,8 % измеренных ядер, что подтверждает наше предположение. Исследовав структуру моноцитов с помощью конфокальной микроскопии, были разработаны три новые оптические модели мононуклеарной клетки, отражающие внутреннюю структуру ядра.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Мальцев

**Микрофлюидное устройство с биолюминесцентной системой бактерий
для количественного выражения качественных характеристик
на примере токсичности**

К. А. Лукьяненко, И. А. Денисов,
А. С. Якимов, Е. Н. Есимбекова, П. И. Белобров
Красноярский научный центр СО РАН
Сибирский федеральный университет, Красноярск

Взаимодействие биологических объектов между собой или с окружающей средой может быть выражено не только с помощью количественных параметров, но и с помощью качественных. Одной из важных проблем биологической физики является проблема выражения качественных характеристик живых систем с помощью измерительных устройств.

Целью данной работы являлась разработка измерительного микрофлюидного устройства на основе ферментативной биолюминесцентной системы бактерий для количественного выражения качественных характеристик на примере токсичности.

Необходимо было определить геометрические параметры каналов микрофлюидного чипа для работы биолюминесцентной системы бактерий. С помощью численного моделирования было показано, что все компоненты биолюминесцентной системы должны располагаться в одной реакционной камере, имеющей октагональную форму.

Требовалось разработать биосовместимую методику герметизации микрофлюидных чипов из полиметилметакрилата. Было показано, что герметизация методом связывания растворителем с помощью дихлорэтана или ацетона не повреждает ферменты и субстраты биолюминесцентной системы в чипе. Был определен состав системы, обеспечивающий наибольшую интенсивность сигнала и воспроизводимость.

Было показано, что равномерное распределение ферментов и субстратов в реакционной камере является основным фактором, влияющим на воспроизводимость и интенсивность сигнала. Был разработан способ активного перемешивания пробы.

На примере резорцина, бензохинона и медного купороса было показано выражение качественного параметра токсичности в количественный сигнал интенсивности излучения света.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. П. И. Белобров

**Изучение изменчивости концентрации аэрозоля
и его биологических компонент в некоторых помещениях НГУ**

Д. С. Оскеро

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

Актуальность исследования атмосферных биоаэрозолей существенно выросла. Постоянно присутствующие в атмосфере аэрозоли и биоаэрозоли оказывают влияние на различные компоненты экологических систем и на здоровье человека путем увеличения частоты некоторых заболеваний, они также могут вызывать и инфекционные заболевания. Для многих токсичных соединений, входящих в состав аэрозольных частиц, разработаны гигиенические нормативы, регламентирующие предельно допустимые концентрации этих веществ в атмосфере. Такие нормативы установлены и для некоторых биогенных компонентов атмосферных аэрозолей. Для большинства строений в России и, в частности, для помещений НГУ, измерений этих концентраций ранее не проводилось.

Цель данной работы — изучение изменчивости концентрации аэрозоля и его биологических компонент в некоторых помещениях НГУ.

Работа проводится в несколько этапов. Для пробоотбора используются приборы с тангенциальным вводом потока аэрозоля в жидкость — циклоны со смачивающимися стенками. До начала пробоотбора была произведена калибровка циклона. Калибровка осуществлялась путем определения уровня задержки латексных частиц разного размера в циклоне при фиксированном расходе воздуха.

Следующий этап работы — пробоотбор в помещениях НГУ. Для этого были выбраны холл и аудитория им. академика А. И. Мальцева ввиду высокой загруженности аудитории.

Была произведена первая серия отбора проб и дальнейший анализ фильтров и культивируемых микроорганизмов из циклонов, который показал низкую концентрацию биологических компонент. Определение концентрации и биоразнообразия культивируемых микроорганизмов в пробах осуществляется стандартными культуральными методами.

Вторая серия отбора проб запланирована на апрель с дальнейшим определением концентрации суммарного белка — универсального маркера биологических компонент — с использованием флуорометрического метода, концентрации и биоразнообразия культивируемых микроорганизмов в пробах.

Научный руководитель — д-р техн. наук А. С. Сафатов

Исследование влияния пористых сорбентов на основе оксида алюминия на эритроциты методом проточной цитометрии

А. В. Пивкина

Новосибирский государственный университет
Институт клинической и экспериментальной лимфологии —
филиал ИЦиГ СО РАН, Новосибирск
Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Существует ряд проблем, из-за которых терапия, направленная на постоянный ввод новых медикаментов в организм, оказывается малоэффективной либо приводит к негативным последствиям, связанным с механизмом действия препаратов. Таким образом, сорбционная детоксикация, при которой токсичные агенты выводятся из организма, является перспективной заменой. При этом важно оценить влияние пористых сорбентов на биологические ткани. Сканирующая проточная цитометрия позволяет определить форму и функциональное состояние эритроцитов, основываясь на сигнале светорассеяния на клетке. Целью работы является определение морфологических и функциональных характеристик эритроцитов крови методом сканирующей проточной цитометрии.

Для анализа влияния пористых твердых тел на эритроциты в работе использовались два вида сорбентов на основе оксида алюминия: алюмокремниевый и углеродминеральный. Сорбент каждого вида в количестве 2 гр был помещен в стеклянную колонку с пористым фильтром объемом 3 см³, через которую была перфузирована донорская кровь со скоростью 4 мл/мин. Контролем служила кровь, не имевшая контакта с колонками. Методом проточной цитометрии были измерены морфологические и функциональные характеристики эритроцитов для всех образцов.

Исследование показало, что средние значения ряда морфологических признаков образцов крови после контакта с сорбентами либо увеличились не более чем в 1,1 раза, либо сократились не более чем в 0,95 раза. Отмечены два отличающихся механизма воздействия сорбентов на функциональные характеристики эритроцитов. После контакта с алюмокремниевым носителем среднее значение отношения жесткости мембраны к эластичности сократилось в 0,9 раза и увеличилось в 1,17 раза после углеродминерального. Среднее количество анионных обменников после контакта с алюмокремниевым носителем сократилось в 0,7 раза, а после контакта с углеродминеральным — в 0,88 раза.

Научный руководитель — канд. хим. наук Л. Н. Рачковская

**Исследование фотоактивируемых доноров оксида азота
для локальной вазодилатации**

Э. В. Писарев

Новосибирский государственный университет

Оксид азота NO является одним из основных регуляторов сосудистого тонуса. При заболевании сахарным диабетом или других заболеваниях, связанных с сужением сосудов, выделение NO в организме нарушено. Если заставить локально выделяться NO, то многие болезни и осложнения, связанные с ними, не будут такими страшными, т. е. человек сможет с ними эффективно бороться, что нельзя сказать о сегодняшнем дне, когда так много людей страдает от этих болезней. В нашей работе планируется создать вещества, которые выделяют NO под действием света, что позволит управлять процессом.

В качестве фотодоноров NO мы берем вещества, представляющие собой конъюгаты диметилнитрофенильных групп с поглощающими свет структурами (порфирины). Но энергия возбужденного электрона в порфирине может пойти и на другие процессы, кроме выделения NO. Эти процессы мы сейчас и исследуем. Один из самых важных их них — образование синглетного кислорода, которого мы хотим количественно оценить оптическими методами. Кислород при переходе из синглетного состояния в основное испускает фотон с длиной волны 1270 нм. Эту люминесценцию можно оценить, следовательно, можно оценить количество образованного синглетного кислорода.

Были исследованы два новых вещества на основе порфирина. С помощью специально собранной установки с лавинным InGaAs фотодиодом было произведено измерение люминесценции синглетного кислорода и определен квантовый выход его образования. С помощью данного метода измерения мы в дальнейшем будем минимизировать количество синглетного кислорода, т. е. использовать различные способы, вещества, соединения, которые уменьшают квантовый выход образования синглетного кислорода в процессе облучения порфирина.

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

Разработка технологии выделения ДНК с помощью магнитных частиц из крови для проведения молекулярно-генетических исследований

Е. А. Плечко

Сибирский федеральный университет, Красноярск
Красноярский научный центр СО РАН
Национальный медицинский исследовательский
центр гематологии, Красноярск

Огромная роль в медицинской лабораторной диагностике принадлежит молекулярно-генетическим исследованиям. Материалом для таких исследований являются нуклеиновые кислоты (НК), выделенные из клеток человека. Существует несколько методик выделения НК, в каждой из которых есть свои достоинства и недостатки. Основными критериями для выбора методики выделения НК является качество и количество полученного материала, время выполнения и стоимость исследования. Одним из перспективных методов на сегодняшний день является использование для выделения НК магнитных частиц с различными активными покрытиями. Но большинство магнитных частиц приобретается в зарубежных странах и имеет высокую стоимость.

Целью исследования была оценка возможности доступного синтеза магнитных частиц и выделения ДНК из клеток с их помощью для проведения молекулярно-генетических исследований.

Создание магнитных частиц производилось осаждением смеси Fe^{2+} и Fe^{3+} в растворе при щелочном pH за счет добавления аммиачной воды. Частицы были покрыты оксидом кремния при помощи тетраэтоксисилана. В работе получены два типа частиц: образующие крупные конгломераты, покрытые общей оболочкой оксида кремния и размельченные ультразвуком до единичных частиц и мелких скоплений. Для выделения ДНК использовали лейкоциты человека и коммерческий набор «ДНК-сорб В», заменив в эксперименте силикатный сорбент на собственные магнитные частицы. Было показано, что разработанные магнитные частицы с большим диаметром позволяют выделять ДНК в количестве, соизмеримом с силикатным сорбентом, при этом не требуется прибегать к центрифугированию. Проведенная ПЦР-РВ подтвердила целостность и качество выделенной ДНК. Частицы, прошедшие измельчение ультразвуком, позволили выделить меньшее количество ДНК, а отсутствие реакции ПЦР-РВ — предполагать их влияние на качество полученных молекул.

Научный руководитель — канд. биол. наук А. В. Комина

**Оптический контроль динамики кальциевой сигнализации
одиночных плавающих тромбоцитов
с помощью фототабильного CagedADP**

Д. В. Спирёва

Новосибирский государственный университет

Тромбоциты представляют собой маленькие клеточные безъядерные фрагменты, функция которых заключается в поддержании гемостаза. Основным процессом в организме человека является активация тромбоцитов — процесс увеличения концентрации ионов кальция внутри клетки [1]. Активация также вносит большой вклад в развитие сердечно-сосудистых заболеваний, поэтому основная цель исследования — понимание процесса активации у свободно плавающих тромбоцитов и методы контроля выделения кальция.

Нами разработан и активно используется метод оптического контроля динамики кальциевой сигнализации у плавающих тромбоцитов с помощью фототабильного аналога АДФ (CagedADP). Под действием УФ-излучения у молекулы CagedADP отпадает защитная группа и остается АДФ, который является стандартным активатором. Данный метод позволяет исключить гидродинамические потоки и смещение клеток, что происходит при добавлении обычного АДФ.

Оптический контроль производился на флуоресцентном микроскопе с использованием кальциевого зонда *Fluo-4*. С помощью камеры *AxioCam 503 Mono* со скоростью 3 кадра в секунду регистрировалась динамика флуоресценции. Для того чтобы вызвать распад вещества, использовался дополнительный источник излучения в виде светодиода *Nichia NVSU233A LE* с платой *Arduino*, позволяющей управлять временем вспышки. Интенсивность флуоресценции плавающих клеток отслеживали с помощью встроенного программного модуля *ImageJ TrackMate* [2].

Данный метод позволил не только получить стандартные кальциевые осцилляции, но и контролировать оптически время начала процесса активации. Исследование показало различие в процессе между плавающими и прикрепленными к поверхности клетками. Также была получена простейшая теория, позволяющая описывать отдельные кальциевые пики.

1. Lee M. Y., Diamond S. L. A Human Platelet Calcium Calculator Trained by Pairwise Agonist Scanning // PLoS Comput Biol. 2015. Vol. 11. P. e1004118.

2. Tinevez J. Y.; Perry N., Schindelin J. et al. TrackMate: An open and extensible platform for single-particle tracking // Methods. 2017. Vol. 115. P. 80–90.

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

Моделирование светорассеяния X- и Y-сперматозоидами крупного рогатого скота методом дискретных диполей

К. В. Трусов

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

Разделение семени быков по полу представляет интерес для сельского хозяйства, позволяя контролировать пол потомства животных. Существующий метод проточной цитометрии позволяет разделять сперматозоиды, несущие X- и Y-хромосомы с точностью 90 %. Однако технология предусматривает предварительное окрашивание клеток, оказывающее токсичное влияние. Замораживание клеток лишь частично снижает токсичность.

Метод разделения сперматозоидов быков по полу, не оказывающий влияние на структуру клеток, пока не создан. Однако известно, что половые клетки, несущие X- и Y-хромосомы, отличаются по объему на 6 %.

В работе разработана оптическая модель бычьего сперматозоида, проанализированы светорассеивающие и морфологические свойства модельных клеток, построена база данных индикатрис светорассеяния сперматозоидов. Проанализированы зависимости морфологических параметров сперматозоидов от объема данных клеток. Различия индикатрис светорассеяния модельных клеток свидетельствуют о возможности реализации бесконтактного метода разделения сперматозоидов по полу.

Научные руководители —
канд. физ.-мат. наук К. В. Гилев, А. И. Конохова

Индикация вируса осповакцины с помощью КНИ-нанопроволочного биосенсора

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. КНИ-нанопроволочные биосенсоры являются перспективными устройствами, сочетающими в себе высокую чувствительность, избирательность, доступность, возможность миниатюризации и регистрации в режиме реального времени. Они позволяют проводить качественный и количественный анализ биологических веществ в минимальных количествах, вплоть до обнаружения единичных молекул. Принцип их действия основан на регистрации модуляции тока, протекающего через нанопроволочный сенсор при изменении потенциала на его поверхности.

Целью исследований является оценка возможности индикации вируса осповакцины в реальном масштабе времени с помощью КНИ-нанопроволочного биосенсора.

КНИ-биосенсор использован для индикации вируса осповакцины поликлональными антителами в реальном масштабе времени. Установлено, что реакция специфического взаимодействия осповакцины с поликлональными антителами сопровождается десятикратным уменьшением тока *n*-канального КНИ-биосенсора. Образование комплексов антиген — антитело приводит к появлению отрицательного заряда на разделе фаз. Эффективное время индикации вируса составило ~200–300 с на пробу.

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

**Численное моделирование
амплитудно-частотных характеристик пьезоэлектрического датчика,
применяемого в пьезотромбоэластографии**

М. Н. Хоряк

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Существуют различные методы, отражающие изменение агрегатного состояния нативной крови в процессе свертывания. В силу технических особенностей методов, всех, кроме низкочастотной пьезотромбоэластографии (НПТЭГ), регистрируются лишь завершающие этапы гемокоагуляции — полимеризация фибрина и ретракция сгустка. Метод НПТЭГ является наиболее эффективным, так как позволяет визуализировать процесс свертывания крови (динамику ее вязкоупругих свойств в процессе коагуляции) и оценивать все фазы свертывания крови в режиме реального времени в виде зависимости амплитуды колебаний пьезоэлектрического датчика пьезотромбоэластографа АРП–01М «Меднорд» от времени, в течение которого сгусток достигает максимальной плотности.

В данной работе было проведено исследование зависимости амплитудно-частотных характеристик иглы-резонатора от массы сгустка крови на ее конце, который формируется в процессе свертывания крови.

Для этого, с использованием среды *COMSOL Multiphysics*® 4.2, была построена численная 3D-модель пьезоэлектрического датчика. Методом конечных элементов проведен расчет собственных частот колебаний пьезоэлектрического датчика. Рассчитаны амплитудно-частотные характеристики колебаний иглы-резонатора вблизи резонанса, соответствующего экспериментальным значениям при разной массе конца иглы-резонатора. Расчеты показали, что с ростом массы иглы резонатора происходит убывь собственной частоты колебаний иглы-резонатора, что позволяет связать эти характеристики, используя численный расчет.

Было проведено исследование амплитудно-фазовых характеристик принимаемого сигнала пьезоэлектрического датчика в процессе свертывания крови здорового добровольца. Получена зависимость собственной частоты колебаний иглы-резонатора от времени свертывания крови и зависимость массы формируемого сгустка крови на конце иглы резонатора от времени ее свертывания.

Результаты могут использоваться при оценке системы регуляции агрегатного состояния крови, выявления патологий в этом процессе.

Научные руководители — д-р мед. наук, проф., чл.-корр. РАН В. В. Удут,
канд. физ.-мат. наук, доц. С. В. Мельничук

**Создание и применение в экспериментальных исследованиях
специализированного пакета программ для обработки
динамических тепловизионных данных
с целью уточнения физических свойств объектов**

А. В. Шепелин

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

Современная инфракрасная термография (тепловидение) позволяет проводить научные исследования во многих областях (биофизика, медицина, физика поверхности твердого тела и др.), где природные явления сопровождаются выраженным тепловыделением и поглощением теплоты. При этом в ряде случаев (гетерогенный катализ, адсорбция, биомедицина) особый интерес представляют динамические процессы [1].

Для адекватного анализа экспериментальных данных и получения достоверных результатов необходимо учитывать специфические свойства измерительной технологии (шумы, помехи и др.). Компенсировать многие артефакты помогает программное обеспечение, принимающее в расчет режимы измерений, технические особенности прибора и др. Для этого оно должно содержать необходимый математический аппарат, позволяющий извлечь из полученных «сырых» данных полезную информацию.

Целью работы было создание и практическое применение пакета программ, ориентированного на работу с современными тепловизионными системами. Измерения осуществлялись матричным тепловизором ТКВр-ИФП/СВИТ. Программное обеспечение (ПО) было разработано на языках *Python*, *JavaScript* с использованием библиотек *NumPy*, *SciPy*, *Pandas*, *Matplotlib*, *Plotly*, *Dash*, *Jupyter*. Учитывались такие особенности метода, как чувствительность (0,03 °C), температурный дрейф, коэффициент черноты измеряемого объекта, неоднородность сигнала. Динамический характер данных определил специфику математического аппарата.

В отличие от универсальных программных пакетов, предложенное ПО позволяет применить инструменты обработки сигнала целенаправленно — в области тепловидения. Для не специалистов может оказаться проблемой незнание тонкостей этого метода. Поэтому объединение в единое целое неочевидного специфического функционала, без сомнений, важно. Приведены примеры успешного использования созданного пакета.

Работа поддержана грантом РФФИ и Правительства Новосибирской области № 18-44-540040.

I. Vainer B. G. A Novel High-Resolution Method for the Respiration Rate and Breathing Waveforms Remote Monitoring // Ann. Biomed. Eng. 2018. Vol. 46. P. 960–971.

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

**Определение дозы гамма-излучения
для доклинических исследований БНЗТ**

А. С. Шило

Новосибирский государственный университет
Лаборатория БНЗТ ИЯФ СО РАН, Новосибирск

Бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ) является перспективным методом бинарной радиотерапии раковых заболеваний благодаря селективности воздействия тепловых нейтронов на опухоль в условиях повышенной концентрации борсодержащих веществ внутри раковых клеток. В лаборатории БНЗТ ИЯФ СО РАН построен оригинальный действующий ускорительный источник эпитепловых нейтронов, на котором в настоящее время проходят эксперименты по облучению не только клеточных культур, но и лабораторных животных. При проведении исследований важно достоверно определить вклад разных компонент излучения в поглощенную дозу. Целью данной работы является разработка способа оперативного измерения пространственного распределения поглощенной дозы гамма-излучения при облучении клеточных культур и лабораторных животных.

Пространственное распределение поглощенной дозы гамма-излучения измерено дозиметром ДБГ-С11Д (ООО «Доза», Россия) и разработанным малогабаритным детектором с литьевым сцинтиллятором для нескольких вариантов замедлителя при нескольких значениях энергий протонов. Определены вклады ядерных реакций в поглощенную дозу гамма-излучения. В результате проведенных исследований разработана и внедрена в эксплуатацию оперативная диагностика измерения поглощенной дозы гамма-излучения, получаемой клеточными культурами и лабораторными животными при их облучении потоком эпитепловых нейтронов.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. С. Ю. Таскаев

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

UDC 538.958, 538.911

Tuning of TEM lasing modes in coupled perovskite nanostructures

V. B. Osokin¹, G. Ying²

¹University of Oxford, United Kingdom

²Ulsan National Institute of Science and Technology, Republic of Korea

The rise of hybrid and all-inorganic halide perovskite (APbX_3 , where A = Cs or Methylammonium, X = Br or I) materials has stunned the photovoltaic community with their remarkable progress and performance. They have attracted interest because of their light exposure stability, high carrier mobility their ability to be produced in different morphologies such as single crystals, bulk films, quantum dots (QDs) etc. Halide perovskites are being developed for application in solar cells, photodetectors, light-emitting diodes and lasing devices.

Lasing has so far has been reported in CsPbBr_3 nanowires with Fabry-Perot cavity modes conformed by the facets of a nanowire of ~ 180 nm in diameter. Other researchers have shown superfluorescence from a perovskite QD superlattice (a structurally well-defined, long-range ordered, and densely packed array of colloidal nanocrystals). The new approach of a solution-based synthesis of CsPbBr_3 nanocrystals allows us to obtain lasing from TEM modes in QD clusters without an external cavity resonator. Interestingly, lasing emission from such a system can be tuned to the blue using the fixed frequency comb of TEM modes by varying the optical pump power. MAPbI_3 films however, show only red-shifts as a function of excitation power.

The high-quality CsPbBr_3 samples were synthesized in UNIST² at room temperature by dissolving relatively simple chemicals in acids to get a yellow colloidal solution ready to be deposited onto SiO_2 substrates.

The structure of the QDs was characterised by X-ray diffraction. Images of an individual QD were obtained by transmission electron microscopy. All the spectra were taken using a cryogenic micro-photoluminescence (micro-PL) setup with resolution of 1 micrometre. Lifetimes of spontaneous and stimulated emission were measured by a time-resolved micro-PL technique. A Michelson interferometer was used to measure the coherence of both types of emission.

Supervisors — Dr. Phys. Math. Y. Park², Dr. Phys. Math. R. A. Taylor¹

Исследование адсорбции метанола на поверхности монокристалла Pt(111) методом колебательной спектроскопии с модуляцией поляризации инфракрасного излучения

Е. Е. Айдаков

Новосибирский государственный университет
Институт катализа СО РАН, Новосибирск

Исследование адсорбции метанола на поверхности катализаторов представляет интерес с практической и фундаментальной точки зрения. Платина катализаторы активно используется в процессах получения водорода из метанола. Следует отметить, что окисление спиртов на поверхности платины активно исследовалось в условиях сверхвысокого вакуума, однако полученные данные не всегда можно применять в реальном катализе, который, как правило, протекает при атмосферном давлении. При повышенном давлении могут образовываться интермедиаты, не наблюдаемые в вакууме, и, кроме того, при повышении давления может изменяться состояние катализатора. Поэтому для изучения каталитических процессов необходимо развивать *in situ* методы.

Исследование адсорбции метанола на поверхности монокристалла платины проводилось с помощью ИК-Фурье-спектроскопии с модуляцией поляризации ИК излучения. Каталитическая ячейка, соединена с ИК спектрометром *VERTEX 80v*. Спектрометр оборудован детектором из теллурида кадмия-ртути и фотоупругим модулятором PEM-100, который обеспечивает модуляцию поляризации ИК-излучения.

Изучение адсорбции метанола на поверхности монокристалла платины Pt(111) проводили методом *PM IRRAS*. ИК-спектры записывались во время подачи разных доз (экспозиций) метанола от 0,5 до 50 Лэнгмюр (Л) при низких температурах в диапазоне 80–145 К и последующем ступенчатом нагреве монокристалла до 120 К. Также были проведены эксперименты по термопрограммируемой десорбции метанола на поверхности монокристалла Pt(111), при которой подавались различные дозы 0,5–50 Л метанола. Регистрация десорбируемых молекул проводилась с помощью квадрупольного масс-спектрометра *SRS UGA 100* с одновременной записью температуры катализатора. На спектрах поверхности видно, что при повышении температуры монокристалла происходит десорбция метанола с поверхности монокристалла платины.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Сараев

Механизм адсорбции красителя эозина на поверхности частиц из разнозаряженных природных полисахаридов

М. В. Атаманова

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Разработка эффективных и недорогих биосорбентов для решения задачи извлечения ароматических соединений — токсикантов — из воды или биологических жидкостей является актуальной задачей. При тестировании новых материалов важно знать не только количественные характеристики адсорбции, но и механизм взаимодействия «адсорбат — адсорбент».

В работе изучался новый адсорбент, полученный из двух доступных природных полисахаридов: арабиногалактана, выделенного из лиственницы сибирской и хитозана из покрова креветок. Химически модифицированные в сульфатированную и деацетилованную форму полимеры имели противоположные заряды, что позволило путем самосборки создать на их основе стабильные коллоидные частицы размером около 0,4 мкм и положительным зарядом поверхности [1]. Прототипом загрязнителя с ароматической природой выступал анионный краситель эозин.

Изучение адсорбции включало исследования равновесий, состоящих в смешивании адсорбтива с адсорбентом с контролем температуры, времени контакта, pH, ионной силы раствора. Для разделения свободного и связанного состояний красителя применялась методика, включающая осаждение адсорбента с измерением концентрации красителя абсорбционным методом.

Полученные в рамках различных моделей изотерм адсорбции (Ленгмюра и Ленгмюра — Фрейндлиха) результаты позволили получить количественные характеристики адсорбции, такие как адсорбционная емкость и константы адсорбции, а также сделать вывод о преимущественно однослойном характере адсорбции, протекающем по электростатическому механизму связывания в рассмотренном диапазоне концентраций.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки, проект № 18-43-242003.

1. Синтез и свойства интерполимерных комплексов на основе хитозана и сульфатированного арабиногалактана / Н. В. Слюсаренко, Н. Ю. Васильева, А. С. Казаченко и др. doi: 10.31857/S2308113920020059

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. Е. А. Слюсарева

**Исследование влияния наночастиц оксида алюминия
на механическое поведение алюминия при различных температурах
и скоростях нагружения**

А. А. Ахмадиева, Н. Р. Гизатулина, Н. И. Кахидзе

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Для увеличения свойств алюминия и его сплавов возможно использование модификаторов, которые выступают центрами кристаллизации и позволяют увеличить механические свойства. Кроме того, наночастицы могут выступать упрочнителями матрицы, становясь препятствием дальнейшему движению дислокаций.

Литьем в кокиль были получены отливки из технически чистого алюминия марки А0 с содержанием наночастиц Al_2O_3 концентраций 0,1, 0,5, 1, 1,5 масс. %. Наночастицы вводились в составе уникальных лигатур при воздействии внешних полей на алюминиевый расплав.

Растяжение плоских образцов исследуемых сплавов при скоростях деформации 0,001, 0,01, 0,1 s^{-1} на сервогидравлическом стенде INSTRON 40/50-20 показало, что сплавы демонстрируют заметное деформационное упрочнение с повышением скорости деформации при растяжении от 0,001 до 0,1 s^{-1} . Например, у сплава А0/0,5 Al_2O_3 % показатели предела текучести увеличиваются с 20 до 27 Мпа, временного сопротивления — с 69 до 77 МПа при одновременном уменьшении пластичности с 48 до 38 %.

Определение чувствительности к скорости деформации *SRS* показало, что значение параметра связано со средним размером зерна: у ультрамелкозернистого алюминия *SRS* составил 0,013, в то время как для исходного сплава без частиц этот параметр равен 0,223. При введении наночастиц оксида алюминия данный параметр значительно снижается и составляет 0,150–0,065.

Степень температурного разупрочнения оценивалась при одноосном растяжении на испытательной системе, оборудованной термошкафом, при температурах 24, 100 и 250 °С. Установлено, что с повышением температуры с 24 до 250 °С в сплаве А0/0,5 Al_2O_3 % уменьшается предел текучести с 22 до 14 МПа и значительно понижается величина временного сопротивления с 69 до 35 МПа с одновременным увеличением пластичности с 48 до 59 %. В остальных сплавах тенденция температурного разупрочнения сохраняется.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ
в рамках научного проекта № 18-38-20081.*

Научные руководители — канд. техн. наук И. А. Жуков,
д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

Влияние расхода газа-предшественника на скорость роста и строение тонких фторполимерных покрытий, получаемых методом *HW CVD*

А. Л. Богословцева

Новосибирский государственный университет
Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск

Тонкие фторполимерные покрытия, получаемые методом каталитического химического осаждения из газовой фазы, в котором катализатор представлен в виде горячей нити (*Hot Wire Chemical Vapor Deposition (HW CVD)*), имеют широкое применение в качестве защитных, гидрофобных, оптических и биопассивирующих покрытий. Свойства этих покрытий определяются их строением. В свою очередь строение покрытия зависит от параметров процесса осаждения, таких как температура нити, давление и расход газа-предшественника и др.

В данной работе исследовалось влияние расхода газа-предшественника на строение формирующегося фторполимерного покрытия. После проведения серии экспериментов была получена нетривиальная зависимость скорости роста покрытия от расхода газа-предшественника. Выдвинута гипотеза о влиянии температуры потока газа в области активатора. Для имеющейся установки был разработан экспериментальный участок для измерения температуры потока газа на различных расстояниях от подложки. Проведена серия экспериментов для разных потоков газа, разных расстояний от подложки и разных газов (окись гексафторпропилена (C_3F_6O), воздух и аргон).

На основании полученных данных было показано, что температура в области активатора существенно изменяется для различных расходов газа. Это приводит к значительному изменению количества образующихся и сохраняющихся при движении к подложке радикалов, формирующих фторполимерное покрытие.

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

Плазмонный резонанс в полимер-графеновых композитах с наночастицами золота и серебра

Е. В. Бойко^{1,2}, И. А. Костоград²

¹Новосибирский государственный университет

²Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Графен является подходящим кандидатом для использования в качестве компонента при создании плазмонных устройств. Включение наночастиц золота и/или серебра в графен позволяет создавать био-/электрохимические сенсоры, а также композиты с антибактериальными свойствами. Кроме этого, наночастицы благородных металлов, нанесенные на графен, могут применяться для обнаружения различных запрещенных пищевых добавок и токсинов, а также использоваться в качестве компонентов в топливных элементах. Однако свойства подобных систем мало изучены поэтому требуются исследования в данной области. Целью данной работы является исследование явления плазмонного резонанса, возникающего в системе графен — полимер — наночастицы металла.

Графен был синтезирован методом *CVD* на медной подложке. Полученные образцы аттестовались методом КР-спектроскопии. Перенос графена производился на полимер ПЭТ/ЭВА. Методом импульсной лазерной абляции на образцы были нанесены металлические наночастицы (золото и серебро). При помощи спектрофотометра СФ-2000 были получены спектры поглощения излучения в диапазоне от 200 до 1100 нм.

В результате проделанной работы было показано, что интенсивность плазмонного пика поглощения напрямую зависит от толщины покрытия и размера наночастиц: углубление плазмонного пика поглощения происходит при изменении толщины пленки вплоть до 6 нм. При толщине металлического покрытия свыше 6 нм глубина плазмонного пика не изменяется, при этом общее оптическое пропускание образца продолжает падать. Таким образом, была показана возможность управления ослабления интенсивности проходящего сквозь образец электромагнитного излучения в исследованном диапазоне. Для наночастиц серебра наивысшая степень ослабления излучения приходится на диапазон волн от 400 до 600 нм, в то время как для золота — в диапазоне от 550 до 750 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (уникальный идентификатор прикладных научных исследований (проекта) RFMEFI60417X0157).

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

**Исследование механических свойств композиционного материала
на основе алюминиевого сплава АК9,
упрочненного волокнами базальта**

В. Д. Валихов, Н. И. Кахидзе

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Композиционные материалы на основе алюминия получают все более широкое применение в авиа- и автомобилестроении. Они обладают огромным набором полезных характеристик: малый вес и высокая удельная прочность, электропроводность, износостойкость и трещиностойкость. Использование минеральных армирующих веществ, таких как нитрид алюминия, оксид алюминия, базальтовые волокна, придает композитам на алюминиевой матрице повышенную твердость.

В данной работе композиционный материал был получен с использованием в качестве матрицы алюминиевого сплава АК9 (Al — 85,9–91,6 %, Si — 8–11 %, Mn — 0,2–0,5 %, Mg — 0,2–0,4 %) и базальтовых волокон. Длина волокон находилась в диапазоне от 49,6 до 83,4 мкм, а диаметр в среднем равен 12,773 мкм. Для получения композиционных материалов применялась стандартная технология литья в кокиль, а введение базальтовых волокон производилось при разливке в струю расплава с последующим механическим перемешиванием при его кристаллизации в течении 30 секунд. Содержание базальтовых волокон в полученном композиционном материале составило 1,5 масс. %.

Установлено, что введение базальтовых волокон способствует улучшению механических свойств алюминиевого сплава АК9. Испытания на твердость проводились двумя способами: по шкале Виккерса и по шкале Бринелля. Твердость алюминиевого сплава АК9 после добавления базальтовых волокон увеличилась с 68 до 82 единиц по шкале Бринелля. При испытаниях по шкале Виккерса не удалось получить достоверные результаты, так как базальтовые волокна не позволяют получить след от индентора, пригодный для измерения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере в рамках программы «УМНИК» (Договор № 14856ГУ/2019).

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

Рентгеновские преломляющие линейные скрещенные и параболоидные линзы, изготовленные фото- и рентгенолитографией

И. А. Венедиктова

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

Фото- и рентгенолитография — универсальные, многовариантные методы изготовления скрещенных многоэлементных линейных параболоидных линз, фокусирующих синхротронное излучение (СИ) в диапазоне энергий фотонов 15–35 кэВ [1, 2]. Был разработан способ наклонной рентгенолитографии с неподвижным угловым рентгеношаблоном без сканирования пучка СИ. Облучение проводится через натянутую на угловую щель в титановом бруске титановую мембрану с золотыми топологическими элементами рентгеношаблона.

Рентгенолитография по сравнению с фотолитографией позволяет получить структуры с меньшими дифракционными искажениями: при различных длинах волн λ и одинаковой толщине слоя резиста D соотношение Релле $\sqrt{\lambda D}$ для рентгенолитографии меньше на величину порядка 50. Ранее наклонную рентгенолитографию осуществляли с одновременным наклоном рентгеношаблона и подложки [2]. Изготовленные таким образом структуры имели геометрические искажения вследствие индуцированного СИ теплового расширения мембраны рентгеношаблона. В данной работе плоскость целевого угла рентгеношаблона располагается перпендикулярно к пучку СИ, не изменяя свою геометрию при наклонах подложки с резистом относительно него на углы $+45^\circ$ и -45° . Таким образом исключаются геометрические искажения. Наклонная рентгенолитография с неподвижным шаблоном позволяет получать как поочередно скрещенные элементы, так и трехмерные параболоиды, что позволяет изготавливать объективы для рентгеновского микроскопа с фокусным расстоянием единицы сантиметров для энергий фотонов 35 кэВ и более.

1. Reznikova E. F., Kondratiev V. I., Lobova I. A. X-ray refractive lenses made by ultra-deep LED lithography : Book of abstracts of International Conference SFR-2018. 2018, June 25–28. P. 75.

2. Nazmov V., Reznikova E., Mohr J. Investigation of the radiation-induced thermal flexure of an x-ray lithography mask during a tilted exposure // Journal of Vacuum Science and Technology. 2011. № В 29. P. 011007/1–7.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е. Ф. Резникова

Моделирование процессов эпитаксиального роста двумерных материалов IV группы

В. П. Винарский

Томский государственный университет

Оговорим, что 2D-кристалл (он же двумерный материал) — это кристалл, у которого координата высоты пренебрежительно мала. Рассмотрены графен и силицен и их кристаллические решетки. Графен — это двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем толщиной в один атом. Силицен также является двумерной аллотропной модификацией толщиной в один атом, но кремния и с наличием искривления по параметру высоты. Величина искривления варьирует от 0,71 до 1,90 Å в зависимости от подложки, на которой был выращен атом.

В настоящее время ведутся исследования по разработке новых двумерных материалов IV группы в связи с их свойствами, не присущими трехмерным материалам: например, графен имеет удельную электропроводность $1,7 \cdot 10^{-6}$ Ом*см, в то время как медь — $1,6 \cdot 10^{-6}$ Ом*см при комнатной температуре. Однако для получения новых материалов и улучшения предыдущих методов создания силицена, графена, станена и германена нужно учесть множество частных проблем в их свойствах.

Целью работы является разработка программы для моделирования процессов создания двумерных материалов. Поскольку наиболее оптимальным методом роста материалов зарекомендовал себя метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), то теория и создание программы будет основана на нем.

Рассмотрены три основных метода роста слоев: рост Франка — Ван дер Мерве, рост Вольмера — Вебера, рост Странски — Крастанова, появление того или иного метода роста объяснено при помощи коэффициентов поверхностного натяжения.

Проведен обзор основных методов синтеза двумерных материалов, особое внимание было уделено методу МЛЭ по вышеописанным причинам.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. К. А. Лозовой

Исследование методов переноса графена и MoS₂ на различные подложки

Д. Д. Винокуров

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

В большинстве случаев после роста двумерных пленок требуется перенести их на изолирующие подложки для создания приборных структур. Нынешние методы переноса пленок включают в себя использование различных полимеров. В литературе [1] проведено сравнение таких способов переноса, как использование полиметилметакрилата (ПММА), термоскотча (скотч, адгезия которого меняется при нагреве) и полидиметилсилоксана (ПДМС). Самым распространенным методом для переноса графена и дихалькогенидов переходных металлов является использование ПММА.

В данной работе были перенесены пленки графена и MoS₂, которые были выращены методом химического осаждения из газовой фазы, на медной подложке и на подложке SiO₂/Si соответственно. Для переноса графена использовалась стандартная процедура нанесения пленки ПММА с последующим травлением медной фольги, на которой она была выращена. Для переноса пленки MoS₂ в качестве раствора для травления SiO₂ был использован 1M раствор KOH. После переноса пленок ПММА был растворен в ацетоне. Морфология и толщины перенесенных пленок была исследована методом атомно-силовой микроскопии. Структура и толщины пленок также была исследована спектроскопией комбинационного рассеянного света. Снятие вольт-амперных характеристик показало наличие фоточувствительности образцов.

Такой метод переноса можно использовать для создания многослойных структур из графена и MoS₂. В работе были созданы структуры перенесенного MoS₂ на кремниевой подложке, где графен выступал в качестве прозрачного электрода. Были сняты вольт-амперные характеристики при разной температуре и освещенности. Методы переноса открывают для исследователей перспективы создания различного рода структур из разных материалов с уникальными свойствами.

1. Антонова И. В. и др. Сравнение разных способов переноса графена и мультиграфена, выращенных методом химического газофазного осаждения, на изолирующую подложку SiO₂/Si // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48, № 6. С. 827.

Научный руководитель — П. В. Винокуров

**Изучение кислородопроницаемой мембраны
состава $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{Co}_{0,2}\text{Fe}_{0,8}\text{O}_{3-\delta}$ методом порошковой дифракции
в режиме *operando***

Б. В. Волошин

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

Кислородопроницаемые мембраны, основанные на перовскитных материалах, селективно пропускают кислород за счет наличия кислородных вакансий в кристаллической решетке и диффузии по вакансионному механизму. Одним из перспективных материалов в этой области является кобальтит-феррит лантана стронция $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{Co}_{0,2}\text{Fe}_{0,8}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF), который обладает высокими значениями электронной и ионной проводимости. Цель данной работы — изучить изменение параметров решетки LSCF во время работы микротрубчатой (МТ) мембраны.

Для проведения эксперимента трубчатую мембрану поместили в газовую камеру, которую установили в дифрактометре. Запись дифрактограмм осуществлялась с использованием многослойного рентгеновского зеркала (зеркала Гёбеля) в геометрии параллельного луча. Внутрь мембраны подавали смеси кислорода с азотом, а в камеру снаружи мембраны — чистый аргон. Затем потоки меняли местами. Мембрану разогревали до рабочих температур (650–800 °С) путем пропускания переменного тока. Температуру мембраны регистрировали при помощи инфракрасного пирометра. Потоки газа создавали с помощью газового смесителя. Внутрь мембраны подавали поток со скоростью 50 мл/мин, а снаружи — 200 мл/мин. Содержание кислорода в газовых смесях — 5, 20 и 50 об. %.

Проведя полнопрофильный анализ дифрактограмм, получили параметры решетки LSCF в зависимости от парциального давления кислорода в подаваемой газовой смеси. Из полученной зависимости видно, что параметры решетки у внешней поверхности мембраны отличаются от параметров у внутренней поверхности. Это значит, что во время работы кислородной мембраны возникает градиент содержания кислорода в кристаллической решетке. Чем больше разница парциального давления кислорода внутри и снаружи мембраны, тем выше градиент кислорода в кристаллической решетке. Полученные данные позволяют утверждать, что процесс кислородной проницаемости в LSCF МТ мембране лимитируется объемной диффузией оксид ионов.

Научный руководитель — д-р хим. наук, чл.-корр. РАН А. П. Немудрый

Измерение пористости при низкотемпературной обработке целлюлозы

А. Ю. Добош

Высшая школа технологии и энергетики Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна

Проведено исследование влияния процесса замораживания на оптимизацию формирования и развития капиллярно-пористой структуры полимера. В ранее опубликованной работе [1] разработан метод низкотемпературной обработки (НТО) целлюлозы для улучшения гидрофильных и бумагообразующих свойств целлюлозного волокна. Целью данной работы является определение величин объема и радиуса пор при НТО методом сорбции азота [2] на анализаторе сорбции газов NOVA 4200e фирмы *Quantachrome* с программным управлением. В качестве объекта исследования использовали сульфатную беленую целлюлозу, подвергнутую низкотемпературной обработке при 77 К, 8 с, влажность 45 %. Подготовка образцов для измерений радиуса и объема пор состояла в дегазации азотом и полном высушивании образца в течение суток при температуре 160 °С под вакуумом. Полученные результаты исследования показали увеличение радиуса пор целлюлозы на 20 %, ранее недоступных для проникновения воды. Увеличение объема пор обработанной целлюлозы на 15 % в сравнении с необработанной целлюлозой свидетельствует о развитии капиллярно-пористой структуры целлюлозы в процессе низкотемпературной обработки. Выявленные ранее оптимальные условия замораживания влажных целлюлозных волокон (время, температура, влажность) для увеличения гидрофильности и связеобразующей способности целлюлозы не противоречат выводам, полученным в данном исследовании. Эти два метода, а именно измерение радиуса и объема пор методом сорбции азота и результаты калориметрических исследований и равновесной сорбции, показали влияние НТО целлюлозы при оптимальных условиях для образования кластеров воды и зарождения льда, способствующих увеличению мелкопористой структуры целлюлозного волокна.

1. Осовская И. И., Антонова В. С. Влияние низкотемпературной обработки целлюлозы на теплоты гидратации и структурные свойства целлюлозы // Химия растительного сырья. 2019. № 4. С. 359–364.

2. Вячеславов А. С., Померанцева Е. А. Измерение площади поверхности и пористости методом капиллярной конденсации азота: методическая разработка. М. : Изд-во МГУ, 2006. 55 с.

Научный руководитель — В. С. Антонова

Изучение PVD-слоев фталоцианина титанила (TiOPc)

С. Е. Дюсенова

Новосибирский государственный университет

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

Фталоцианины металлов (MPC), будучи химически и термически стабильными органическими полупроводниками, все чаще применяются в качестве активных слоев химических сенсоров. Структура и ориентация молекул в упорядоченных слоях MPC имеют особое значение для их применения в электронных устройствах. Среди большого разнообразия факторов, оказывающих влияние на структурную организацию слоев фталоцианинов в процессе роста, сообщается и о влиянии внешнего магнитного поля. Целью настоящей работы является сравнительное рентгенографическое изучение PVD-слоев TiOPc, полученных в магнитном поле и без него. Исходный порошок TiOPc представлял собой II-триклинную и I-моноклинную модификации (далее **IIт** и **Iм**).

Образцы PVD-слоев TiOPc были получены осаждением на стеклянную подложку термической сублимацией (камера Кнудсена, вакуум 1×10^{-5} мм. рт. ст., 450°C) в магнитном поле (образец **М**) и без него (образец **О**). Изучение полученных образцов проводили на порошковом (Shimadzu XRD-7000, схема Брэгга — Брентано, $\text{CuK}\alpha$ -излучение, Ni-фильтр) и монокристалльном (Bruker Duo, $\text{CuK}\alpha$ -излучение) дифрактометрах.

При сравнении полученных дифрактограмм **М** и **О** с теоретической, установлено, что в обоих случаях PVD-слои двухфазные (**IIт** и **Iм**) и преимущественно ориентированы по плоскостям $(010)_{\text{IIт}}$ и $(100)_{\text{Iм}}$ соответственно. Интегральная интенсивность суммы этих отражений в случае **М** в 7 раз больше, чем в случае **О**, причем полуширина (FWHM) в два раза меньше. Таким образом, присутствие магнитного поля существенным образом увеличивает число ориентированных кристаллитов в PVD-слое TiOPc. Отжиг образцов **М** и **О** (180°C , 1 ч, воздух) привел к дальнейшему улучшению кристалличности — интегральная интенсивность пика на дифрактограмме **М** увеличилась в 30 раз, а на дифрактограмме **О** — в 80 раз. FWHM в обоих случаях уменьшилась. Анализ морфологии слоев на атомно-силовом микроскопе показал, что при отжиге размер кристаллитов в обоих случаях увеличивается в ~ 10 раз. Также были изучены структурная организация и сенсорные свойства образцов.

Таким образом, в настоящей работе показано, что применение магнитного поля приводит к повышению кристаллического совершенства PVD-слоев TiOPc.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов,
канд. физ.-мат. наук А. С. Сухих

**Изучение морфологии и электрохимических свойств композитов
на основе восстановленного оксида графита и полипиррола**

П. Д. Ишутина

Новосибирский государственный университет

Высокие темпы технологического развития в наши дни способствуют росту требований к современным накопителям энергии. Это объясняет высокий интерес к суперконденсаторам (СК), которые представляют собой электрохимические накопители энергии с хорошей стабильностью и большим сроком службы, высокой удельной мощностью и небольшими габаритами по сравнению с другими накопителями энергии. В качестве материала электродов СК часто используются графеноподобные наноматериалы, так как они обладают высокими удельными емкостями (100–200 Ф/г), химической инертностью, термической стабильностью, развитой поверхностью. Для увеличения удельной емкости и срока службы таких материалов их покрывают электропроводящими полимерами (ЭПП). Создание композитов на основе углеродных наноматериалов и ЭПП способствует увеличению электрической емкости и стабильности при циклировании, что делает их перспективным материалом для электродов суперконденсаторов. Одним из широко известных представителей класса ЭПП является полипиррол (PPy).

В данной работе был проведен синтез композиционного материала на основе восстановленного оксида графита (RGO) и PPy. Из RGO методом осаждения была получена углеродная бумага. Осаждение PPy на бумагу из RGO было выполнено методом химической и электрохимической полимеризации. Также для сравнения было проведено соосаждение RGO с PPy с созданием электрода с трехмерной структурой. Полученные композиционные материалы были охарактеризованы при помощи микроскопических и спектроскопических методов. Изучение электрохимических характеристик материалов было проведено методом циклической вольтамперометрии в 1М водном растворе NaCl.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е. О. Федоровская

Моделирование процессов формирования песчаных форм методом дискретных элементов

А. А. Камильянова

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Интерес к моделированию динамики сыпучих материалов возрос с появлением мощных вычислительных машин и графических процессоров. Моделирование поведения таких систем позволяет избежать многих технологических проблем на этапе производства (изготовление пескоструйных изделий, формирование насыпных поверхностей и т. д.).

Целью работы является разработка и адаптация известных алгоритмов к динамике сыпучих сред в области металлургии, позволяющих существенно сократить время расчета геометрии сыпучей среды и оценить ее предельное (устойчивое) состояние. При решении задач для систем очень большого количества частиц использовались методы математического моделирования и метод дискретных элементов (МДЭ) с контактным взаимодействием [1]. В реальной ситуации взаимодействие между частицами приводит к деформации и искажению формы частиц. Величина перекрытия ξ , явно не учитывает изменение формы частиц, но допускает их перекрытие в нормальном и касательном направлениях, позволяя определить момент начала взаимодействия. Уравнения движения частиц:

$$m\ddot{\mathbf{X}} = \sum_{i \neq j}^{\bar{N}} (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^{\tau}) + \mathbf{F}_G + \mathbf{F}_{St}$$

учитывают, что при контакте частиц проявляются три типа сил: сила отталкивания \mathbf{F}_{ij}^n , контактного трения \mathbf{F}_{ij}^{τ} и сцепления (притяжения) \mathbf{F}_G . Влияние межчастичной сплошной среды, в потоке которого движутся твердые частицы, проявляется в силе сопротивления \mathbf{F}_{St} , по закону Стокса.

Полученные результаты согласуются с имеющимися данными по натурным экспериментам.

1. Коробкин Е. А. Бионические нечеткие модели и алгоритмы для исследования систем многоточечных масс при формировании устойчивой сыпучей насыпи : дисс. ... канд. физ.-мат. наук : 05.13.17. Воронеж, 2016. 119 с.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. В. Г. Лебедев

Исследование влияния наночастиц на разрушение композитов Al-Al₂O₃ при статическом и малоцикловом нагружении

Н. И. Кахидзе

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Для получения композитов был использован технически чистый алюминий марки А0 и наночастицы оксида алюминия, полученные методом электрического взрыва проводника со средним размером 100 нм. Для подготовки наночастиц оксида алюминия подготавливалась порошковая смесь из порошка алюминия (20 мкм) и оксида алюминия. Количество наночастиц в смеси составило 5 масс. %. После этого осуществлялось ударно-волновое компактирование для получения лигатуры в виде прутка. Полученная лигатура вводилась с помощью механического смесителя в расплав алюминия (700 °С), после полного растворения лигатуры осуществлялась ультразвуковая обработка в течение 1 минуты с последующей заливкой в кокиль и вибрационной обработкой до полного растворения лигатуры. Количество наночастиц в композите составило 0, 0,1, 0,5, 1, 1,5 масс. %.

Результаты экспериментов по знакопеременному малоцикловому нагружению плоских образцов при частоте симметрического нагружения 10 Гц достаточно однородны, однако отмечается повышение сопротивляемости усталости для сплава А0/0,1 Al₂O₃ масс. %, о чем свидетельствует уменьшение коэффициента аппроксимации с 0,0195 до 0,0146 по отношению к чистому алюминию. При статическом нагружении со скоростью деформации 0,001 с⁻¹ этот сплав также показал максимальное увеличение механических характеристик: предел текучести увеличился с 11 до 28 МПа, предел прочности — с 47 до 68 МПа.

Исследование поверхности разрушения композитов после статического нагружения показали, что при комнатной температуре все образцы разрушаются вязко. Поверхность разрушения состоит из малых и практически равных ям отрыва, внутри которых видны микропоры. По-видимому, при нагружении образца на границах микродефектов или частиц образуются и разрастаются множества микропор. Кроме того, в отдельных ямках были обнаружены агломераты частиц оксида алюминия с размерами до 2,5 мкм. Механизм разрушения транскристаллитный и не изменяется при скорости деформации от 0,001 до 0,1 с⁻¹.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-20081.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

**Мембранные материалы
на основе одностенных углеродных нанотрубок**

А. С. Кашеев

Новосибирский государственный университет

В настоящее время материалы на основе углеродных нанотрубок (УНТ) привлекают внимание исследователей в области нанотехнологий. Основная причина такого интереса — выдающиеся свойства одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), такие как высокая механическая прочность на разрыв (150–180 ГПа), рекордный модуль Юнга (640–1 ТПа), высокая термическая стабильность (до 2800 °С, в вакууме), высокий коэффициент теплопроводности, высокая электропроводность [1].

Одно из разрабатываемых направлений использования УНТ — использование высокой удельной площади поверхности для фильтрационных применений. Основная проблема использования существующих промышленных мембран связана с невозможностью очистки растворов от низкомолекулярных компонентов простой фильтрацией. Для этого используют фильтры обратного осмоса, которые являются низкопроизводительными и требуют больших энергетических затрат для создания и поддержания давления. В настоящее время считается, что новый класс мембран на основе УНТ (*buckypaper*) может помочь преодолеть эти трудности.

Целью данной работы исследование зависимости фильтровальных свойств образцов *buckypaper* от условий модификации ОУНТ и способа формирования мембран. Показано влияние удельной площади поверхности ОУНТ, типа растворителя, используемых для приготовления образцов *buckypaper*, на фильтровальные характеристики мембран.

1. Ibrahim K. S. Carbon nanotubes-properties and applications: a review // Carbon letters. 2013. Т. 14, №. 3. С. 131–144.

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

**Исследование продукта электродугового синтеза
в открытой воздушной среде в системе W-C**

А. И. Кокорина

Томский политехнический университет

Карбид вольфрама представляет интерес в различных областях (например, производство режущих инструментов, катализаторы различных реакций) благодаря благоприятному сочетанию физико-механических и электрофизических свойств. В настоящее время популярна группа способов получения карбида вольфрама, основанная на генерации плазмы. Одним из возможных известных источников плазмы является дуговой разряд. Метод, основанный на генерации плазмы дуги постоянного тока, в том числе в условиях воздушной газовой среды, активно развивается в последние годы [1–2].

В данной работе был проведен синтез карбида вольфрама в плазме дугового разряда постоянного тока в открытой воздушной среде. Благодаря образованию газовых потоков оксида и диоксида углерода, которые экранировали реакционную зону, удалось избежать окисления продуктов синтеза кислородом воздуха.

Синтезированные образцы анализировали общеизвестными методиками: рентгеновской дифрактометрией (рентгеновский дифрактометр *Shimadzu XRD 7000s*, $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$), растровой электронной микроскопией и дифференциальным термическим анализом. В результате анализа установлено, что порошкообразный продукт синтеза содержит карбиды вольфрама W_2C и WC . Построена зависимость фазового состава продукта синтеза от времени горения разряда.

*Работа выполнена в рамках проекта № 19-79-00086 за счет гранта
Российского научного фонда (Russian Science Foundation).*

1. Yahachi S, Takehisa M., Keishi N. Encapsulation of carbides of chromium, molybdenum and tungsten in carbon nanocapsules by arc discharge // *Journal of Crystal Growth*. 1997. № 172. P. 163–170.

2. Pak A. Ya, Mamontov G. Ya. Boron carbide synthesis in low-voltage DC electric arc initiated in open air // *Technical Physics Letters*. 2018. Vol. 44, № 7. P. 615–617.

Научный руководитель — канд. техн. наук, доц. А. Я. Пак

Дифракционные исследования Mn-Zr-катализаторов окисления

В. П. Коновалова

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

В настоящий момент актуальна задача создания катализаторов полного окисления, являющихся альтернативой катализаторам на основе благородных металлов. Катализаторы, содержащие переходные металлы, имеют низкую стоимость и большую устойчивость. Перспективными являются Mn-Zr-системы благодаря многообразию степеней окисления Mn и емкости кристаллической решетки по кислороду.

Mn-Zr-катализаторы с соотношением Mn:Zr = 1:4 были получены методами соосаждения, пропитки и вакуумной пропитки при температурах от 400 до 800 °С. Структурные и микроструктурные свойства данных образцов были изучены методами РФА, БЭТ, ПЭМ и EDX.

По данным РФА, для катализаторов, полученных методом соосаждения, характерно образование твердого раствора со структурой флюорита. Также это подтверждается данными ПЭМ и EDX-анализа, которые демонстрируют равномерное распределение Zr и Mn по всему объему. При увеличении температуры синтеза наблюдается рост параметра решетки, что может быть связано с выходом атомов Mn из структуры твердого раствора и образованием оксида марганца. Смешанный оксид, полученный при 700 °С, показал наилучшую каталитическую активность, что обусловлено образованием твердого раствора.

Образцы, полученные методами пропитки и вакуумной пропитки, существенно отличаются от образцов, полученных соосаждением. РФА показал, что они представляют собой смесь следующих кристаллических фаз: ZrO₂ моноклинный, ZrO₂ тетрагональный и Mn₂O₃. Наиболее активные катализаторы в данных сериях формируются при температуре синтеза 400 °С. В этих образцах удалось обнаружить появление MnO₂. В то же время каталитическая активность образцов в реакции окисления СО значительно ниже, чем у катализаторов, полученных методом соосаждения, и данный факт можно объяснить ключевой ролью формирования твердого раствора.

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

**Исследование свойств пленок из поли-3-гидроксибутирата (ПЗГБ)
в композиции с пластификатором триэтилцитратом**

В. Ю. Кравчук

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Поли-(3-гидроксибутират) (ПЗГБ), представитель класса ПГА — алифатический сложный полиэфир, относится к биосовместимым и биоразлагаемым полимерам микробного происхождения. ПЗГБ применяют в медицине (микро-частицы, имплантаты), промышленности (разлагающийся пластик) и сельском хозяйстве. Тем не менее коммерческие продукты на его основе практически отсутствуют, что связано с его высокой стоимостью и хрупкостью по сравнению с синтетическими аналогами. Однако эти недостатки могут быть преодолены с помощью внутренней или внешней пластификации полимера для улучшения физико-механических свойств и способов переработки.

Цель настоящей работы — исследование влияния пластификатора — триэтилцитрата — на свойства наливных пленок ПЗГБ.

В качестве объекта исследования взят поли-3-гидроксибутират ($M_n = 616$ кДа, $K_d = 2,40$), синтезированный бактериями *Cupriavidus eutrophus B10646* в Лаборатории биотехнологии новых биоматериалов СФУ. Триэтилцитрат — сложный эфир лимонной кислоты, безопасный и разрешенный в пищевой промышленности, был выбран в качестве пластификатора.

Растворными технологиями получены пленки ПЗГБ с добавлением пластификатора 5, 10, 15, 30 % от массы полимера. Толщина пленок составила $36,7 \pm 2,45$ мкм. По результатам измерения краевого угла смачивания (*Krüss*, Германия) поверхности пленок установлено, что включение пластификатора приводит к увеличению угла от $73,6 \pm 4,8$ до $84,3 \pm 5,06^\circ$, т. е. к увеличению гидрофобных свойств, при этом полярные и дисперсные составляющие уменьшаются (полярные от $6,2 \pm 0,33$ до $2,7 \pm 0,22$ мН/м; дисперсные от $40,1 \pm 0,86$ до $38,5 \pm 0,82$ мН/м).

Исследования физико-механических свойств пленок (*Instron5565 KN*, Великобритания) показали, что увеличение концентрации триэтилцитрата приводит к снижению модуля Юнга (от $1080,30 \pm 98,892$ до $363,20 \pm 39,489$), при этом удлинение при разрыве увеличивается в 13 раз (от $1,92 \pm 0,942$ % до $13,44 \pm 1,123$ %).

Таким образом, триэтилцитрат приводит к увлечению эластичности пленок ПЗГБ и может быть использован в качестве пластификатора для получения биоразрушаемой упаковки.

Научный руководитель — канд. биол. наук, доц. А. А. Шумилова

Разработка безфоновой монокристаллической кюветы для порошковой рентгеновской дифрактометрии

А. Л. Кудрявцев

Новосибирский государственный университет

Рентгеновская дифрактометрия поликристаллических образцов (порошковая дифрактометрия) является распространенным и весьма эффективным методом фазовой и структурной характеристики кристаллических материалов. В одной из наиболее распространенных схем измерения (так называемая геометрия Брэгга — Брентано) исследуемое вещество наносится тонким слоем на плоскую подложку, а измерение дифракционной интенсивности осуществляется в геометрии «на отражение». Причем источник излучения и детектор располагаются под углами θ к плоскости подложки. Подложка для образца чаще всего изготавливается из рентгеноаморфного кварцевого стекла. Однако ввиду наличия локальных корреляций в ее структуре возникают диффузные пики, приводящие к повышению фона на дифрактограмме. Это затрудняет измерение слабых дифракционных рефлексов и снижает степень надежности метода.

Для решения обозначенной проблемы используют монокристаллические кюветы. Для изготовления такой кюветы необходим подбор ориентации кристалла таким образом, чтобы ни один из дифракционных пиков не попал на детектор. В противном случае будет происходить сокращение доступного для измерения диапазона углов 2θ , а также возможно повреждение детектора.

В настоящей работе разработана теоретическая модель для расчета необходимой ориентации произвольного кристалла для заданных диапазонов углов расположения источника и детектора при заданной длине волны. Произведены непосредственные расчеты возможных ориентаций кристаллов различных фаз (Si, $Fd-3m$, $a = 5,381 \text{ \AA}$; LiF, $Fm-3m$, $a = 4,028 \text{ \AA}$; CaF_2 , $Fm-3m$, $a = 5,462 \text{ \AA}$; SiO_2 , $P3_121$, $a = 4,913$, $c = 5,405 \text{ \AA}$; Al_2O_3 , $R-3c$, $a = 4,761$, $c = 12,994 \text{ \AA}$) для источника с излучением $\text{CuK}\alpha, \beta$. Изготовлена Si-кювета и проведено экспериментальное сравнение эксплуатационных характеристик созданной и стандартных кювет на лабораторном порошковом дифрактометре.

Научные руководители — канд. хим. наук В. Ю. Комаров, П. А. Полтарак

**Автоматизация поиска позиций гониометра
четырёхкружного дифрактометра с каппа-геометрией для измерения
дифракционного рефлекса кристалла в заданном направлении**

Т. А. Кузнецов

Новосибирский государственный университет

Лабораторные монокристалльные рентгеновские дифрактометры, оснащенные многокружными гониометрами и 2D-детекторами, являются основными современными приборами для проведения рентгеноструктурного анализа кристаллов. Распространенные программы для анализа дифракционных (брэгговских) пиков в первую очередь предназначены для приблизительного определения матрицы ориентации и измерению интегральных интенсивностей дифракционных пиков рядом с брэгговскими позициями. Однако, по данным измерений, на таких дифрактометрах возможно более прецизионное определение матриц ориентации кристаллов и, следовательно, параметров их элементарных ячеек. Для этого необходимо измерить профили отдельных рефлексов в заданных областях детектора. Инструменты для расчета углов гониометра для измерения отдельных рефлексов, входящие в состав стандартных пакетов программ (например, *Bruker APEX2*), обычно имеют достаточно низкую гибкость и степень автоматизации.

В данной работе решается задача исчерпывающего нахождения позиций гониометра для заданного рефлекса, при которых он находится в отражающем положении с заданным направлением дифракции. Расчет всех допустимых ориентаций кристалла с приблизительно заданной матрицей ориентации и направлением рефлекса производится аналитически в рамках кинематического приближения. Полученным ориентациям сопоставляются углы гониометра в эйлеровой (E) или каппа (κ) геометриях. Найденные решения могут быть визуализированы в трехмерных ω_E - φ_E - χ_E или ω_κ - φ_κ - κ_κ пространствах, а также сохранены в виде таблицы, загружаемой в управляющую программу дифрактометра.

Планируется дальнейшее расширение функциональности программы путем автоматизации проверки модели столкновений. Полученные результаты планируется применить для автоматического поиска стратегии измерения отдельных высокоугловых рефлексов (с расщеплением $K\alpha_1/K\alpha_2$) для прецизионного определения параметров элементарных ячеек.

Научный руководитель — канд. хим. наук В. Ю. Комаров

Синтез и применение в качестве электродов для суперконденсатора и литий-ионных аккумуляторов гибридного материала на основе азот-допированного пористого углерода и углеродных нанотрубок

В. Р. Кузнецова^{1,2}, Е. В. Лобяк², Л. Г. Булушева², А. В. Окотруб²

¹Новосибирский государственный технический университет

²Институт неорганической химии А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск

Электроды для суперконденсаторов и литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) на основе углеродных материалов с характерной высокой электрохимической емкостью и хорошей циклической стабильностью активно внедряются в высокотехнологичное производство, например, в гибридные автомобили, биомедицинские приборы и в космические технологии [1]. Тем не менее большинство углеродных материалов, используемых для суперконденсаторов и ЛИА, имеют некоторые недостатки, по большей части связанные с низкой электропроводностью и недостаточной диффузией ионов электролита в микропорах материала. Для преодоления этих ограничений новые бинарные гибридные электродные материалы, улучшающие эффективную площадь поверхности и электрическую проводимость, все больше получают распространение в последнее время [2].

В настоящей работе были получены гибридные материалы на основе пористого углерода (ПУ) или азот-допированного пористого углерода (N-ПУ) и однослойных (ОУНТ), двухслойных (ДУНТ) или многослойных (МУНТ) углеродных нанотрубок с заданными характеристиками. Такой материал в правильных пропорциях объединяет в себе свойства отдельных компонент: высокую удельную площадь поверхности ПУ и проводимость УНТ. Было показано влияние состава и соотношения компонент гибридного материала на удельную емкость суперконденсаторов и ЛИА. Таким образом, добавка всего 5 масс. % УНТ к пористому углероду позволяет увеличить емкость суперконденсатора на 10 % при низких скоростях развертки и до 25 % при высоких, по сравнению с исходным N-ПУ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-33-01053.

1. Vix-Guterl C., Frackowiak E., Jurewicz K. et al. Electrochemical energy storage in ordered porous carbon materials // Carbon. 2005. Vol. 43, № 6. P. 1293–1302.

2. Chang Q., Li L., Sai L. et al. Interconnected binary carbon hybrids for supercapacitor electrode // Electrochim. Acta. 2017. Vol. 251. P. 293–300.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е. В. Лобяк

Визуализация и анализ неоднородности импактных алмазов с помощью микродифракции СИ

А. В. Курчев

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

Изучение импактных алмазов (ИА) геологического происхождения сопряжено со множеством трудностей, в первую очередь, с их неоднородностью на макро- и микроуровне. Например, ИА Попигайской астроблемы представлены частицами размером до 2 мм, которые даже визуальнo отличаются формой и цветом (от бесцветных до черных). Независимо от вида частиц дифракционные картины могут разительно отличаться. Таким образом, практически каждая частица ИА является уникальной. Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения показывает наличие дефектов на уровне нескольких атомных слоев, но не дает представления о частице целиком. Выявление однородности с помощью рентгеновской томографии в данном случае не представляется возможным, так как образцы состоят из углерода.

Микродифракционное исследование проведено с использованием сфокусированного пучка СИ (ID13 ESRF, Гренобль, Франция, платформа Гью — Стюарта, гексапод, $\lambda = 0,8463 \text{ \AA}$, $\varnothing 0,3 \text{ мкм}$, детектор *Eiger X4M*) под руководством д-ра А. В. Джанеса. Образцы фиксировали на SiN-мембране (*Silicon Ltd*). В ходе эксперимента (геометрия «на просвет») проводили сканирование образцов (или отдельных их зон) с помощью прецизионного трехкоординатного пьезопривода (область $200 \times 200 \text{ мкм}$, шаг 1 мкм). В каждой точке параллельно записывали спектры рентгеновской флюоресценции с энергетической дисперсией (детектор *Vortex-EM*).

Переход от двумерных фреймов к дифрактограммам осуществлен при помощи программы *Dioplas*. Визуализация физических свойств ИА осуществлялась выделением трех зон на дифрактограмме, интегральная интенсивность каждой из которых кодировалась одним из трех цветов: красным, зеленым или синим. В качестве таких свойств были выбраны соотношение алмаза и лонсдейлита, текстура и кристалличность образца. Сравнение цветовых карт с эталонными, рассчитанными для алмазоподобных структур с различным характером и степенью дефектности, позволяет качественно характеризовать образец, выделяя в нем области однородности, размер и предположительный тип этих областей.

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

Синтез и высокотемпературный отжиг тонких пленок $a\text{-SiO}_x$ с различной стехиометрией

Н. А. Лунев, И. Е. Меркулова

Институт теплофизики имени С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Тонкопленочные структуры, представляющие собой массивы нанокристаллического кремния в матрице SiO_2 (nc-Si/SiO_2), широко используются в солнечной энергетике и в изготовлении элементов памяти [1].

Наиболее распространенным методом получения nc-Si/SiO_2 является отжиг нестехиометрического аморфного оксида кремния ($a\text{-SiO}_x$, $0 < x < 2$) в вакууме или инертной атмосфере при температуре свыше 800°C . Главными параметрами высоко температурного отжига (ВТО) являются температура, время процесса и начальная концентрация кислорода в исходных образцах.

В работе изучалась зависимость структурных свойств системы nc-Si/SiO_2 (среднего размера кристаллита, степени кристалличности материала) от стехиометрии исходных пленок $a\text{-SiO}_x$, полученных методом газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой [2].

Осаждение аморфных пленок велось на кварцевых и монокристаллических кремниевых подложках при варьировании расхода газовой смеси 5 % SiH_4 и 95 % Ar в диапазоне от 18 до 89 нормальных см^3 в минуту (см^3 газа при нормальных условиях) при постоянных расходах кислорода и водорода, составлявших 3 и 386 н. $\text{см}^3/\text{мин}$ соответственно. Изменение расходов смеси в указанном диапазоне приводило к уменьшению стехиометрии пленок от 0,72 до 0,25 согласно исследованиям, проведенным с помощью ИК-Фурье-спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) показала аморфную структуру полученных пленок. Далее образцы были подвергнуты ВТО в течение двух часов при температуре 950°C , что привело к формированию нанокристаллической фазы Si . Исследования методом спектроскопии КРС показали, что рост стехиометрии в $a\text{-SiO}_x$ привел к снижению кристалличности отожженных пленок с 48 до 39 %, при этом средний размер кристаллита практически не изменился и составил около 5,3 нм.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке
Российского научного фонда (проект № 19-79-10143).*

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. О. Замчий

Исследование биметаллических PdPt-катализаторов окисления метана методом спектроскопии рентгеновского поглощения и масс-спектрометрии

М. Т. Майдан

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

Актуальность исследования определяется широким применением PdPt-катализаторов в реакциях полного окисления углеводородов, в частности для доокисления выхлопных газов бензиновых ДВС и ДВС, работающих на метан-бутан-пропановой смеси, а также в газотурбинных установках, работающих при температурах 1000–1100 °С. Хотя в научном сообществе данные системы исследуются продолжительное время, тем не менее в настоящее время отсутствует единая точка зрения о природе каталитического действия PdPt-катализаторов, также остаются открытыми вопросы о синергетическом эффекте платины и палладия и об их термической стабильности и деактивации при протекании каталитического процесса.

Целью данной работы было *in situ* исследование химического и фазового состава PdPt-катализаторов. Исследования проводились как в потоке чистого метана, так и в потоке метана и кислорода в широком диапазоне температур с помощью методов спектроскопии рентгеновского поглощения *XANES* и *EXAFS*. Отличительной особенностью методов *XANES/EXAFS* является возможность их применения для анализа химического состояния и строения наночастиц и аморфных фаз. *XANES* в режиме *in situ* позволяет определять химическое состояние платины и палладия в объеме катализатора в реакционных условиях. Метод *EXAFS* позволяет определить структуру локального окружения атомов платины и палладия даже при низких концентрациях (1–3 вес.%).

Измерения рентгеновских спектров *XANES/EXAFS* на К-крае поглощения Pd и L₃-крае Pt были проведены на станции «*EXAFS*-спектроскопии Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения» (ИЯФ СО РАН). Была исследована локальная пространственная структура биметаллических катализаторов. Установлено, что в реакционных условиях (CH₄:O₂ = 1:4) наблюдается частичное восстановление платины и палладия до металлического состояния. Предполагается, что активным компонентом является металл-оксидное состояние.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Сараев

Изменение состава окислов на поверхности (001)InP при отжиге в сверхвысоком вакууме

И. А. Митрофанов, Д. В. Дмитриев
Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Рост бездефектных гетероэпитаксиальных структур (ГЭС) при молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) начинается с процесса подготовки и получения атомарно-чистой ростовой поверхности подложки. Процесс подготовки поверхности можно разделить на два этапа. На первом этапе проводится прогрев подложки в камере предварительного отжига, при этом с поверхности удаляется часть легколетучих соединений. На втором этапе проводится высокотемпературный отжиг в ростовой камере. Для A_3B_5 -соединений высокотемпературный отжиг проводят в потоке элементов V группы. Обычно в литературе не уделяется достаточного внимания первому этапу, однако предварительная подготовка поверхности подложки может определять структурные характеристики синтезируемых слоев. В работе ставится задача изучить изменение состава поверхности подложки InP в процессе отжига при разных температурах.

В работе методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на *Riber Nanoscan 50 Cameca* изучено изменение состава поверхности *epi-ready* подложки (001)InP в процессе термического отжига в сверхвысоком вакууме. По изменению интенсивности пиков элементов в спектре проанализирована степень покрытия оксидами поверхности [1]. Первый анализ состава поверхности, который проводился до отжига, показал наличие основных элементов: кислорода, углерода, индия и фосфора в соотношении O — 38,6%, C — 22%, In — 26,6% и P — 20,8%. После отжига подложки при 150 °C в течение 60 минут изменилось соотношение атомов на поверхности: O — 29,6%, C — 13,7%, In — 33,5% и P — 23,2%. Дальнейший отжиг длительностью 60 минут при 250 °C изменил состав атомов поверхности на O — 25%, C — 11%, In — 37,9%, P — 26,1%. Таким образом, прогрев подложки InP до 150 °C, а затем до 250 °C, длительностью один час, приводит к уменьшению концентрации атомов кислорода и углерода на 35 и 50% соответственно. Это позволяет сохранить высокую степень чистоты рабочей камеры установки МЛЭ, что обеспечивает высокую воспроизводимость параметров выращиваемых слоев.

1. Микушкин В.М., Сысоев С.Е., Гордеев Ю.С. Безэталонный РФЭС способ определения химического состава многофазных веществ и его применение в исследовании нанопленок плазменного оксида InP // ФТТ. 2004. Т. 46, вып. 10. С. 1770.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев

**Исследование применения
наноразмерных неорганических соединений
в связующем для древесноволокнистых плитах средней плотности**

Е. В. Михайлова, Д. Е. Зырянов
Сибирский государственный университет науки
и технологий им. М. Ф. Решетнева, Красноярск

Перспектива нашего исследования находится в области получения композиционных материалов на основе наномодифицированного полимерного связующего и древесноволокнистых наполнителей. Для получения плит средней плотности, которые могут использоваться в авиационной промышленности, в автомобиле- и судостроении и в других областях промышленности.

Задачей исследования являлось приготовление наномодифицированного диспергированного связующего на основе фенолформальдегидных смол.

Данную задачу мы решили способом получения концентрата путем диспергирования частиц наномодификатора в процессе ультразвукового воздействия и введения полученного концентрата в фенолформальдегидное связующее с вязкостью 71 с по ВЗ-246 (сопло 4 мм). После этого ультразвуковое воздействие во время приготовления концентрата производили с помощью излучения мощностью 630 Вт и временем озвучивания около 3 минут.

В качестве частиц наномодификатора использовались частицы белой сажи (гидротированный диоксид кремния $m \text{ SiO}_2 \text{ n H}_2\text{O}$), выбранные из БС-30, БС-50, БС-100, БС-120, с частицами, не превышающими размер 50 нм — БС-100 (БС-120 не использовалась ввиду недоступности). Наномодифицированное связующее получали вышеописанным способом с содержанием компонентов в трех соотношениях 0,05 %; 0,08 %; 0,1 %.

В дальнейшем приготовленное наномодифицированное связующее добавляется в древесный армирующий материал в форме волокон для запрессовывания плит средней плотности и исследования их физико-механических свойств.

Участие в конференции поддержано Красноярским краевым фондом науки.

Научный руководитель — канд. тех. наук, доц. П. С. Шастовский

**Исследование стабильности
твердых растворов $\text{LaCo}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}_3$ при прокаливании в средах
с разным парциальным давлением кислорода**

М. Д. Михненко

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

В настоящее время твердые растворы со структурой перовскита с общей формулой ABO_3 активно исследуются, так как в качестве А и В катионов может выступать большое количество щелочноземельных металлов и металлов с переменной валентностью, и, как следствие, такие соединения могут иметь очень разные физико-химические свойства. Данные твердые растворы широко используются в качестве катализаторов, высокотемпературных сверхпроводников, кислородопроводящих мембран и др.

Целью настоящей работы было исследование структурных характеристик серии твердых растворов с общей формулой $\text{LaCo}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}_3$, синтезированных методом Печини, исследование с помощью высокотемпературной рентгенографии стабильности образцов при прокаливании на воздухе, в гелии и водороде. В ходе работы было изучены изменения структуры и микроструктуры образцов методами РФА и ПЭМВР. По полученным данным с помощью ПО *Crystallographica Search-Match* и базы данных *PDF-2* был установлен фазовый состав серии образцов. Для уточнения параметров элементарной ячейки и расчетов приведенного объема была использована написанная на языке *Python 3* программа уточнения параметров элементарной ячейки.

Методом РФА было установлено, что образцы с параметрами замещения $x = 0,2$ и $0,8$ являются однофазными твердыми растворами, а образцы $0,4$ и $0,6$, находящиеся в области морфотропного фазового перехода из гексагональной в орторомбическую сингонию, — не однофазными.

Дополнительные данные были получены методом ТПВ для уточнения количества кислорода в образцах.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук Е. Ю. Герасимов,
д-р физ.-мат. наук С. В. Цыбуля

Исследование влияния триацетина на свойства пленок на основе поли-3-гидроксibuтирата

К. А. Носирова

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Получение и исследование биоразлагаемых пластиков, способных составить альтернативу синтетическим полимерам — одна из глобальных задач человечества. Широкое распространение биополимеров ограничено их хрупкостью, что привело к исследованиям по добавлению пластификаторов в полимеры для последующего применения. Перспективными биоразлагаемыми полимерами являются полигидроксиалканоаты (ПГА) — разрушаемые линейные полиэфиры микробиологического происхождения. Наиболее распространенным среди ПГА является поли-3-гидроксibuтират (ПЗГБ). Однако пленки из ПЗГБ получаются крайне жесткими и хрупкими, что является недостатком для их использования в качестве упаковки. Большинство пластификаторов, используемых при переработке синтетических полимеров, не подходят для ПЗГБ, поэтому необходим поиск биоразлагаемых соединений.

Цель данной работы — исследование влияния пластификатора на свойства пленок на основе поли-3-гидроксibuтирата.

В качестве объектов исследования были выбраны П(ЗГБ) ($M_n = 816$ кДа, $S_x = 78\%$), синтезируемый бактериям *Cupriavidus eutrophus* B10646 и пластификатор триацетин (ТАГ) (SIGMA). Полимерные пленки получали методом полива 2%-го полимерного раствора П(ЗГБ), содержащего пластификатор (5, 10, 15, 20 и 30 % от массы полимера), с последующим испарением растворителя (хлороформ). Установлено, что с увеличением включения ТАГ в составе пленки происходит увеличение значения краевого угла смачивания водой с $67,2$ до $89,7^\circ$, что говорит об увеличении гидрофобности полученных пленок. Результаты исследования физико-механических характеристик показали, что при увеличении концентрации пластификатора в пленке Модуль Юнга снижается (с 1460 до 811 МПа), при этом удлинение при разрыве увеличивается незначительно от 1 до 4 %, что говорит о малом пластифицирующем эффекте. Однако такие значения могут быть связаны с высокой молекулярной массой самого полимера, так как проведенные ранее исследования показали увеличение эластичности пленок ПЗГБ в 13 раз [1].

1. Baltieri R. C., Lucia H., Mei I., Bartoli J. Study of the influence of plasticizers on the thermal and mechanical properties of poly(3-hydroxybutyrate) compounds // *Macromolecular Symposia*. 2003. Vol. 197. P. 33–44.

Научный руководитель — канд. биол. наук А. А. Шумилова

**Определение областей однородности импактных алмазов
с использованием кластерного анализа данных сканирования
микроручком синхротронного излучения**

А. А. Паулиш

Новосибирский государственный университет

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

Импактные алмазы (ИА) — это природные высоко дефектные углеродные материалы с алмазоподобной структурой. Образование ИА из одного и того же месторождения происходит в широком диапазоне физико-химических условий (температура, давление, время отжига/закалки, кристалличность исходного углеродного материала и наличие дополнительных фаз). Ранее в ряде работ было показано, что некоторые ИА попигайской астроблемы обладают уникальными абразивными свойствами [1], которые, скорее всего, обусловлены особенностями их строения.

Цель нашего исследования — разработка методик анализа рентгенодифракционных (РД) и рентгенофлуоресцентных (РФл) данных, полученных при сканировании образцов ИА пучком синхротронного излучения ($\varnothing 0,3$ мкм, $\lambda = 0,84685$ Å) для выявления закономерностей строения на микроуровне. Измерения проведены на станции ID13 ESRF (Гренобль, Франция) 2D-сканированием образцов в области 240×240 мкм.

В настоящей работе реализован алгоритм, позволяющий выявить в образцах области сходной дефектности и текстуры алмазной матрицы, а также неуглеродные микровключения методом кластерного анализа. Первичные экспериментальные данные редуцировались до «векторов свойств»: интегральной интенсивности в заданных секторах с одинаковыми значениями 2θ (РД) или мольной доли наблюдаемых химических элементов (РФл). Максимальная размерность векторов не превышала 25 элементов. Программа на языке R успешно производит кластеризацию выборок ≈ 14400 таких векторов (120×120 точек сканирования образца). Показана возможность совместного анализа выборок большего размера, что может быть полезно для обработки более детальных карт образца либо совместного сравнения нескольких образцов. Разработанная методика позволяет в автоматическом режиме эффективно выделять сходные по свойствам области для их дальнейшего детального изучения.

Автор выражает благодарность А. В. Курчеву за редуцицию первичных данных и помощь в физической интерпретации результатов кластерного анализа.

1. Масайтис В. Л., Алмазоносные импактиты Попигайской астроблемы.
М. : ФГБУ «ВСЕГЕИ», 1998.

Научный руководитель — канд. хим. наук В. Ю. Комаров

**Теоретическое и экспериментальное исследование структуры
ионного клатратного гидрата $(i-C_5H_{11})_4NBrg \cdot nH_2O$
и возможности образования новых гибридных фаз
в семействе ионных клатратных гидратов ГС 1 – ТС 2**

Н. А. Паулиш

Новосибирский государственный университет

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

Ионные клатратные гидраты (ИКГ) — соединения, родственные газовым гидратам. Они состоят из водно-анионного каркаса (хозяина), включающего в свои полости ионы гидратообразователя (гостя). Из-за более сильного, чем в газовых гидратах, взаимодействия между гостевой и хозяйской подсистемами ИКГ имеют более высокие температуры плавления. В связи с этим они могут использоваться для хранения и транспортировки природного газа. Цель работы — исследование особенностей локальной структуры ИКГ $(i-C_5H_{11})_4NBrg \cdot nH_2O$ ($n = 35, 38$) и возможности образования новых гибридных фаз в семействе ИКГ ГС1 — ТС2.

Проведены синтез и рентгеноструктурное исследование на монокристалльном дифрактометре ИКГ $(i-C_5H_{11})_4NBrg \cdot nH_2O$ ($n = 35, 38$), определена «усредненная» кристаллическая структура. Проведен анализ возможных вариантов локального упорядочения, связанных с расположением гостевых молекул в каркасе, возможных способов размещения гостя по каркасу хозяина, разупорядочений, связанных с самим каркасом. В структуре с $n = 35$ обнаружен новый тип каркаса-хозяина ромбической сингонии (РС5), гибридного по отношению к двум уже известным типам: тетрагональному ТС2 и гексагональному ГС1. Проведено теоретическое моделирование других возможных гибридных каркасов на их основе. Качественный анализ диффузного рассеяния показал наличие локального упорядочения. В ходе экспериментального исследования образования новых гибридных фаз в системах ГС1 — ТС2 проведен эксперимент на станции порошковой дифракции высокого разрешения ID 22, ESRF. Обработка полученных дифрактограмм выявила образование ранее неизвестных фаз. Начата интерпретация распределения диффузного рассеяния в трехмерном обратном пространстве с помощью сверхструктурных моделей. Реализован расчет масштабных атомных моделей — сверхячеек с заданным упорядочением, расчет дифракционной картины по заданной атомной модели. С помощью перебора различных вариантов сверхструктур произведена попытка поиска модели, лучше всего описывающей дифракционные данные.

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

**Биоразлагаемые полимерные пленки
на основе сополимера ПЗГБ-со-ЗГВ и трибутил-о-ацетилцитрата**

С. А. Печугина

Сибирский федеральный университет, Красноярск

С каждым годом все более актуальным становится вопрос о масштабах использования синтетического пластика и замены его биоразрушаемыми полимерами. Полигидроксиалканоаты (ПГА) — полиэфиры гидроксикарбоновых кислот, которые благодаря биологической совместимости и контролируемой деградации могут стать альтернативой современной упаковки. Среди представителей ПГА — сополимер поли-3-гидроксibuтирата с 3-гидроксивалератом (ПЗГБ-со-ЗГВ), не такой жесткий и хрупкий, как ПЗГБ. Кроме того, ПЗГБ-со-ЗГВ обладает более низкой температурой плавления и, благодаря увеличению доли 3-гидроксивалерата (ЗГВ), становится более гибким. Как правило, недостатками ПЗГБ-со-ЗГВ являются низкое удлинение при разрыве и низкая скорость кристаллизации, которые можно устранить добавлением пластификатора.

В работе получены полимерные пленки на основе сополимера ПЗГБ-ЗГВ ($M_n = 400$ кДа, $S_x = 58\%$) с включением ЗГВ 12 % и трибутил-о-ацетилцитрата методом полива раствора с последующим испарением растворителя (хлороформа). Включение пластификатора в пленки составило 5, 10, 15, 20 и 30 % от массы полимера. В качестве пластификатора использовали трибутил-о-ацетилцитрат — маслянистую, нетоксичную, низкотлетучую (Sigma) жидкость. ПЗГБ-со-ЗГВ был синтезирован в Лаборатории новых биоматериалов СФУ.

Введение пластификатора приводило к изменениям свойств поверхности и физико-механических характеристик пленок. Краевой угол смачивания водой (прибор *Kruss*, Германия) с увеличением концентрации пластификатора в пленках падал (от 99,8 до 81,5), однако пленки оставались гидрофобными. Падение модуля Юнга (с 821,17 до 181,31 мПа) полученных пленок происходило по мере увеличения доли пластификатора в их составе, однако удлинение при разрыве пластифицированных пленок возрастало в 4,5 раза (от 4,19 до 36,86 %) по сравнению с пленками ПЗГБ-со-ЗГВ.

Введение трибутил-о-ацетилцитрата позволило увеличить удлинение при разрыве наливных пленок на основе ПЗГБ-со-ЗГВ.

Научный руководитель — канд. биол. наук А. А. Шумилова

Создание и тестирование детектора рентгеновского микроскопического изображения

Г. Ю. Севостьянов

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

Создание прибора с зарядовой связью (ПЗС) камер открыло широкие возможности для современной оптики. С их использованием разработка микроскопа интерференционного рентгеновского (МИР 15-35 кэВ) для жесткого спектра синхротронного излучения (СИ) позволит проводить наблюдения с нанометровым пространственным разрешением [1]. При сочетании ПЗС с рентгеновской дифракционной оптикой и компьютерной математической обработкой рентгеновских изображений достигается уникальное разрешение визуализации фазового контраста внутреннего строения объектов до величины 10^{-9} для изменения декремента показателя преломления рентгеновского излучения. Особенностью детекторов рентгеновского изображения объектов является необходимость защиты камеры ПЗС от радиационного воздействия.

Задачей данной работы являются расчет, конструирование, изготовление и тестирование детектора рентгеновского микроскопического изображения. Указанное разрешение может быть получено путем добавления в систему оптического микроскопа с объективом планапохромат и использования рентгеновского сцинтиллятора. При сочетании оптического микроскопа детектора размера пиксела ПЗС 4 мкм с рентгеновским микроскопом планируется достижение разрешения 50 нм для пространственной визуализации внутреннего строения наблюдаемых объектов.

Защита камеры от радиационного воздействия достигается за счет использования сцинтиллятора, фильтра, планапохромата в качестве объектива оптического микроскопа детектора, а также путем разделения оптического и рентгеновского излучения наклонным по 45° зеркалом. Сцинтиллятор преобразует рентгеновское излучение в оптическое и является предметной плоскостью для оптического микроскопа детектора.

1. E. Reznikova E., Weitkamp T., Nazmov V. et al. Transmission hard X-ray microscope with increased view field using planar refractive objectives and condensers made of SU-8 polymer // J. Phys. : Conf. Series. 2009. № 186. P. 012070/1-3.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е. Ф. Резникова

Исследование влияния детонационного алмаза на структуру и свойства сплава системы алюминий — магний

М. А. Селиховкин, Н. И. Кахидзе, В. Д. Валихов

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Введение тугоплавких наноразмерных модификаторов в матрицу легких металлов и сплавов позволяет достичь увеличения механических характеристик за счет дисперсного упрочнения, когда наночастицы создают дополнительные центры кристаллизации.

В работе использовался сплав системы алюминий — магний марки АМг5, в качестве модификатора применялся наноразмерный алмаз, полученный методом детонационного синтеза. Проблема плохой смачиваемости наночастиц частично решалась введением их в составе уникальной лигатуры: наночастицы в несколько этапов деагломерировались в микропорошке алюминия, полученная смесь помещалась в ампулы сохранения и подвергалась ударно-волновому компактированию. Методом литья в кокиль при температуре расплава 700 °С с обработкой внешними полями для корректного введения модификаторов были получены отливки с концентрацией наночастиц 0,1 и 0,25 масс. %. Плотность определялась методом гидростатического взвешивания, микроструктура исследовалась на микроскопе *Olympus GX71*, средний размер зерна был посчитан методом случайных секущих. Твердость определялась по методу Бринелля с нагрузкой 250 кг на сферический индентор диаметром 5 мм, микротвердость определялась по шкале Виккерса с нагрузкой на алмазный индентор 50 г.

При введении 0,25 масс. % наночастиц плотность полученных отливок соответствует исходному сплаву 2,63 г/см³, что свидетельствует об успешной обработке внешними полями и применении лигатуры. Наночастицы образовали в расплаве дополнительные центры кристаллизации, и средний размер зерна уменьшился с 205 до 186 мкм. Заметного влияния на значения твердости 60 НВ и микротвердости 66 НВ по отношению к исходному сплаву (58 НВ, 69 НВ) наночастицы не оказали. Введение 0,1 масс. % наночастиц привело к увеличению среднего размера зерна до 225 мкм и к уменьшению показателей плотности 2,60 г/см³, твердости 53 НВ и микротвердости 51 НВ.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента МК-506.2019.8.

Научные руководители — канд. техн. наук И. А. Жуков,
д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

Фазовая диаграмма системы Pt-H при давлении до 100 ГПа и температуре до 2500 К

А. И. Семерикова

Новосибирский государственный университет

Высокобарические гидриды привлекают внимание исследователей как потенциальные высокотемпературные сверхпроводники. Рекордное значение критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние 250 К достигнуто для гидрида лантана LaH_{10} при 170 ГПа [1]. В связи с интересом к гидридным системам было сделано множество расчетов, предсказывающих возможные структуры гидридов различных элементов, в том числе и платины. Однако система гидридов платины остается малоизученной экспериментально. До сих пор получены лишь тригональная и гексагональная фазы в диапазоне давлений 20–42 ГПа и 30–45 ГПа соответственно при комнатной температуре [2].

Высокотемпературная область фазовой диаграммы гидридов платины, не исследованная до сих пор, получена в данной работе.

Для синтеза и исследования гидридов платины был выполнен *in situ* эксперимент с использованием СИ (DESY, Petra-III) в алмазных ячейках высокого давления с лазерным нагревом. Платиновая проволока сжималась в среде метана, который был выбран в качестве источника водорода. Для получения высоких температур использовался двухсторонний лазерный нагрев ($\lambda = 1064$ нм). Температура образца оценивалась спектрометрическим методом.

В результате исследования получена фазовая диаграмма гидридов платины. ГЦК гидрид платины, предсказанный расчетами и впервые синтезированный в данной работе, стабилен при высокой температуре в широком диапазоне давлений. ГПУ гидрид платины, стабильный в диапазоне давлений от 28 до 128 ГПа при комнатной температуре, возможно, является стабильной фазой и при более высокой температуре (до 2000 К). В области низких давлений (до 30 ГПа) $Pm\bar{3}m$ структура гидрида платины, впервые закаленного с 1800 К в данной работе, соответствует предсказаниям расчетов [3]. Гидрид платины, наблюдавшийся ранее экспериментально при комнатной температуре при 27 ГПа, имеет тригональную структуру ($P321$) [2].

1. Drozdov A. P. et al. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures // Nature. 2019. Vol. 569. P. 528–531.

2. Scheler T. et al. Synthesis and properties of platinum hydride // *Physical Review B*. 2011. Vol. 83. № 21. P. 214106.

3. Zhang C. et al. Phase transitions and electron–phonon coupling in platinum hydride // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2012. Vol. 24. P. 035701.

Научный руководитель — канд. геол.-минерал. наук С. В. Рашенко

**Исследование структуры продукта совместной кристаллизации фаз
с близкими параметрами элементарной ячейки
на примере $[\text{NiEn}_3](\text{MoO}_4)_{0,5}(\text{WO}_4)_{0,5}$**

П. С. Серебренникова

Новосибирский государственный университет

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

Кристаллические структуры $[\text{NiEn}_3]\text{MoO}_4$ и $[\text{NiEn}_3]\text{WO}_4$ являются перспективными предшественниками металлических сплавов-катализаторов. Ожидается, что при термоллизе продуктов совместной кристаллизации (ПСК) этих солей можно получить более разнообразный набор сплавов, однако параметры элементарных ячеек (ПЭЯ) этих фаз близки ($\Delta a = 0,0398(8)$, $\Delta c = 0,0285(9)$ Å), поэтому возникает сложность при характеристике фазового состава ПСК. Целью данной работы является изучение $[\text{NiEn}_3](\text{MoO}_4)_{0,5}(\text{WO}_4)_{0,5}$ и продукта его термоллиза.

По рентгенограмме ПСК, полученной на лабораторном дифрактометре *SHIMADZU-7000* (схема Брэгга — Брентано, $\text{CuK}\alpha$ — излучение, внутренний эталон LaB_6), определены ПЭЯ ПСК: $a = 9,2451(5)$, $c = 9,9682(8)$ Å (пр. гр. $P-31c$), однако большая полуширина рефлексов не позволила сделать вывод об однофазности ПСК. Эксперимент на станции синхротронного излучения высокого разрешения (СИ ВР, ID22 ESRF, $\lambda = 0,354395$ Å) позволил уточнить ПЭЯ ПСК ($a = 9,2409(2)$, $c = 9,9576(3)$ Å) и выявить расщепления одиночных рефлексов на дальних углах 2θ . Это позволило предположить, что ПСК неоднороден по составу. РСТА 6 монокристаллов показал их различие по соотношению W/Mo и ПЭЯ, однако ожидаемой линейной зависимости между объемом элементарной ячейки (V) и соотношением W/Mo не наблюдалось. Предположительно, это связано с низкой точностью определения ПЭЯ по данным РСТА. Нами была разработана методика более точного определения ПЭЯ по данным монокристалльного эксперимента, основанная на расчете ПЭЯ методом наименьших квадратов по положениям $K\alpha_1$ -составляющих рефлексов на дальних углах 2θ . Методика протестирована на $[\text{NiEn}_3]\text{MoO}_4$ и $[\text{NiEn}_3]\text{WO}_4$: ПЭЯ, определенные этим методом, ближе к ПЭЯ, определенным по данным СИ ВР, чем ПЭЯ, определенные методом РСТА и на *SHIMADZU*. Разработанная методика использована для нахождения ПЭЯ монокристаллов $[\text{NiEn}_3](\text{MoO}_4)_{1-x}(\text{WO}_4)_x$ и зависимости $V(\text{W/Mo})$.

Также на *SHIMADZU* получены дифрактограммы продуктов термоллиза ПСК, определен фазовый состав, по формуле Селякова — Шеррера рассчитаны размеры отдельных монофазных блоков (50–500 нм).

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

Построение реконструкций распределения рентгенодифракционной интенсивности в обратном пространстве

К. В. Сопов

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

Рентгенодифракционный метод является одним из наиболее информативных методов определения атомной периодической структуры кристаллического вещества. В случае бездефектных кристаллов детектируемая дифракционная интенсивность на двухмерном детекторе представлена в виде локализованных брэгговских пиков. Основная часть современного программного обеспечения по предварительной обработке экспериментальных данных (APEX3 и др.) направлена на получение данных по интегральной интенсивности вблизи брэгговских пиков для последующего определения усредненных структурных моделей. Однако многие перспективные функциональные материалы обладают целевыми свойствами благодаря наличию дефектов в кристаллической структуре и ориентационных особенностей кристаллических блоков. Информация об этих особенностях может быть получена при более полной обработке экспериментальных данных, включающей определение параметров профилей пиков и интенсивности диффузного рассеяния. Для предварительного анализа характера отклонений наблюдаемой дифракции от брэгговской наиболее информативно использовать реконструкции распределения интенсивности в трехмерном обратном пространстве (ОП).

В данной работе сообщается об оригинальном программном обеспечении, позволяющем рассчитывать и визуализировать многослойные плоские и сферические сечения ОП, построенные по данным дифрактометров *Bruker APEX* с 2D-, CCD-детекторами. Графический интерфейс позволяет: 1) управлять способом отображения реконструкций, 2) отображать положение брэгговских пиков для нескольких дифракционных доменов с известными матрицам ориентации, 3) измерять угловые размеры элементов реконструкций.

Разработанный комплекс программ применен для анализа дифракционных данных от сложных образцов — синтетических Ni-Cu-Fe-S руд (многофазный образец, продукт распада твердого раствора) и природных импактных алмазов (высокодефектные алмазоподобные углеродные композиты).

Научные руководители — канд. хим. наук В. Ю. Комаров, С. Е. Киреев

Взаимодействие CVD-выращенного графена с молекулами водыД. В. Сорокин¹, Е. В. Бойко²¹Новосибирский государственный университет²Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Графен является одним из наиболее перспективных материалов в микро- и нано-электронике, в частности, его применяют в качестве датчика влажности. В [1] показано сравнение сенсора на основе графена на подложке из SiO₂ с другими коммерческими сенсорами влажности, и особенно отмечается более быстрый отклик к изменению влажности у графена. Известно, что высокая чувствительность графена к составу окружающей атмосферы обусловлена наличием несвязанных π -электронов, которые взаимодействуют с адсорбированными атомами и молекулами. Данное взаимодействие влияет на подвижность электронов в двумерном кристалле графена и приводит к изменению его проводимости. Целью настоящей работы является исследование резистивных свойств графена при взаимодействии с молекулами различных жидкостей.

Измерения проводились с графен-полимерными (ПЭТ/ЭВА) композитами. Параметры синтеза графена, методом осаждения из газовой фазы (CVD) на медную подложку и последующий перенос на полимер подробно описаны в [2]. Сопротивление графена исследовалось двухзондовым методом в воздушной атмосфере и в воде, спирте и бензине.

Эксперименты показали, что с увеличением влажности в вакуумной камере и при взаимодействии с водой увеличивается сопротивление графенового образца. Максимальное увеличение сопротивления образца, зафиксированное при погружении в воду, составило 120 %. В ходе циклических испытаний, при погружении в воду и сушке образца, было показано, что изменение сопротивления графена носит обратимый характер с постоянной амплитудой. В результате исследования показано что используемые образцы обладают высокой чувствительностью к молекулам воды, данное влияние объяснено ван-дер-ваальсовым взаимодействием молекул воды и графеновой плоскости.

1. Melios C., Giuscal C. E. et. al. Water on graphene: Review of recent progress // *Materials Science*. 2018. P. 8–17.

2. Kostogrud I. A., Boyko E. V., Smovzh D. V. The main sources of graphene damage at transfer from copper to PET/EVA polymer // *Materials Chemistry and Physics*. 2018. Vol. 219. P. 67–73.

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

Проект сверхпроводящего ондулятора с уширенными гармоникамиА. Е. Требушинин^{1,2}, М. Э. Веремчук³¹Новосибирский государственный университет²Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск³Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

В работе предлагается схема ондулятора со ступенчатым профилем магнитного поля. Заданная конфигурация магнитного поля дает уширение гармоник ондуляторного излучения на два порядка (до 1 кэВ на энергии в 4.5 кэВ). Полученные спектры излучения могут быть полезны для реализации методов спектроскопии, где необходимо проводить быстрое сканирование по спектру на временных масштабах до 20–100 мс (*quick-EXAFS*) [1, 2].

В работе мы даем аналитическое описание спектра излучения на оси и подтверждаем его численным моделированием с использованием кода OCELOT на примере сверхпроводящего ондулятора, разрабатываемого в ИЯФ СО РАН [3]. Кроме того, проведен расчет рентгенооптической системы и решена задача сглаживания модулированного спектра излучения на образце. Рассчитаны параметры фокусирующей системы и входной апертуры. Найдено оптимальное решение, включающее рассмотрение случая сильной фокусировки излучения до поперечных размеров излучения 1×1 мкм.

1. Iwasawa Y. et.al. XAFS Techniques for Catalysts, Nanomaterials, and Surfaces // Springer. 2017. doi: 10.1007/978-3-319-43866-5.

2. Bornmann B., et.al. The quick EXAFS setup at beamline P64 at PETRA III for up to 200 spectra per second. 2019. doi: 040008. 10.1063/1.5084609.

3. Shkaruba V. A. et al. Status of Development of Superconducting Insertion Devices for Generation of Synchrotron Radiation at Budker INP // Proc. RUPAC'18. 2018. Oct 2018. P. 94–99. doi:10.18429/JACoW-RUPAC2018-THX-MH01.

Научные руководители — PhD С. Д. Серкез, PhD Д. Гелони,
канд. физ.-мат. наук Я. В. Ракшун

Исследование реологии и структуры водных дисперсий с одностенными углеродными нанотрубками

Д. С. Третьяков

Новосибирский государственный университет

Известно, что одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают уникальными механическими, электрическими и термическими свойствами. Обычно для практических применений ОУНТ должны быть диспергированы в жидкости. Однако для ОУНТ свойственно образование агломератов, поэтому чтобы сделать соответствующую наножидкость максимально однородной, используют, с одной стороны, различные дисперсанты, а с другой — подвергают наножидкость ультразвуковой обработке (УЗО). В общем случае и от того, и от другого теплофизические свойства данных наножидкостей могут заметно меняться.

Цель данной работы состоит в экспериментальном изучении реологии и структуры дисперсий на основе воды с ОУНТ. В качестве дисперсантов были использованы додецилбензолсульфат натрия, а также поливинилпирролидон. Изучены около десятка различных наножидкостей. Весовые концентрации ОУНТ варьировались от 0,05 до 0,6 %.

Вязкость и реология изучались с помощью ротационного вискозиметра *Brookfield DV3RV*. Анализ размера частиц производился методом динамического рассеяния света на приборе *Malvern Zetasizer ZSP*.

Установлено, что метод динамического рассеяния света применим для качественной оценки размеров и количества пучков и индивидуальных ОУНТ в дисперсии

Получено, что дисперсии с ОУНТ являются неньютоновскими, причем псевдопластичными. Их реология неплохо описывается моделью степенной жидкости. Установлено, что относительная вязкость растет с увеличением температуры.

Изучено влияние ультразвуковой обработки на дисперсии с ОУНТ и установлено, что начальная УЗО приводит к уменьшению длины пучков и резкому падению вязкости, дальнейшее воздействие УЗ приводит к расщеплению пучков, отделению индивидуальных ОУНТ и медленному падению вязкости дисперсии.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-01-00041).

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. Я. Рудяк

Исследование ползучести композитов на основе политетрафторэтилена

А. А. Ушканов

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

Достаточно частые случаи выхода из строя полимерных деталей и элементов вызваны эффектом ползучести. Исследование ползучести полимеров дает чрезвычайно важную практическую информацию и вносит существенный вклад в теоретические представления о поведении полимеров под действием механических нагрузок.

Целью работы является исследование ползучести полимерных композиционных материалов на основе политетрафторэтилена (ПТФЭ).

Объектами исследования служили ПТФЭ и композиты на его основе, содержащие в качестве наполнителей базальтовые волокна (БВ) и оксид алюминия (Al_2O_3). Подготовка компонентов заключалась в сушке при температуре $180^\circ C$ в течении 4 ч. Высушенный Al_2O_3 подвергали активации на планетарной мельнице «Активатор-2S» в течение 2 минут с частотой вращения барабанов 1800 оборотов/мин. Композиты для испытаний получали сухим смешением компонентов с последующим холодным прессованием для их формования, после чего спекали в муфельной печи при температуре $375^\circ C$ и производили калибровку для корректировки формы образцов, устранения последствий термической усадки при спекании. Ползучесть ПКМ определяли по ГОСТ 18917-2014 «Пластмассы. Определение ползучести при растяжении». Настоящий стандарт устанавливает метод определения ползучести пластмасс при растяжении. Сущность метода заключается в приложении к испытуемому образцу постоянной растягивающей нагрузки в течение длительного времени при постоянной температуре и влажности.

Полученные данные позволяют сделать вывод о том, что композит с содержанием 18 мас. % БВ и 0,5 мас. % Al_2O_3 акт. обладает высокими значениями модуля ползучести и, соответственно, меньшей ползучестью почти в 2,8 раза при напряжении 3 МПа относительно исходного ПТФЭ.

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

**Исследование диффузионных свойств непланарных
кристаллических поверхностей методом молекулярной динамики**

Хоу Мэйна

Новосибирский государственный университет

Пространственно упорядоченные массивы квантовых точек (КТ) представляют интерес для приложений в перспективных электронных приборах и устройствах, таких как светодиодные матрицы, лазеры на КТ, спинтронная память и логические элементы для квантовых вычислений. Наиболее эффективным методом для получения пространственно упорядоченных массивов КТ является гетероэпитаксиальный рост на структурированных (*pre-patterned*) подложках, т. е. на подложках, поверхность которых содержит систему упорядоченных ямок, сформированных с помощью литографии. Ямки служат местами преимущественного зарождения КТ при последующей гетероэпитаксии. Механизм роста и, в частности, атомная диффузия на поверхности со сложным рельефом недостаточно изучены.

В данной работе методом молекулярной динамики рассчитан потенциальный рельеф ямки в форме перевернутой усеченной пирамиды. С помощью анализа полученного потенциального рельефа определены энергия активации поверхностной атомной диффузии и характерные маршруты миграции атомов по стенкам ямки. Показано, что в вершинах квадратного доньшка ямки расположены минимумы потенциальной энергии. Предположено, что в этих точках происходит преимущественное зарождение КТ при гетероэпитаксии Ge на Si с ямками указанной формы. Приведены сравнения результатов моделирования МД с экспериментами, в которых удалось повысить плотность пространственно-упорядоченных массивов КТ за счет зарождения четырех островков на ямку.

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

ЯМР-спектроскопия твердого тела для исследования строения нанесенных ванадиевых катализаторов

Н. Е. Черепанова

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

Цель данной работы состоит в определении строения активных VO_x центров катализатора VO_x/SiO_2 . Для достижения цели использован метод ЯМР-кристаллографии, который сочетает в себе современную ЯМР спектроскопию в твердом теле с квантово-химическими расчетами. Апробация метода ^{51}V ЯМР-кристаллографии проводилась на модельном соединении $\text{VO}(\text{-OSi}(\text{O-tBu})_3)_3$.

Современная ЯМР-спектроскопия является одним из мощных методов определения строения локального окружения ядра в неорганических объектах, включая катализаторы. Единого алгоритма для анализа ЯМР-спектров квадрупольных ядер нет, но существуют различные методики, позволяющие достаточно точно определять полный набор ЯМР-параметров.

Данная работа выполнена на ядре ^{51}V (спин $I = 7/2$), небольшая величина квадрупольного момента ядра позволяет использовать метод *MASSA* — *Magic Angle Spinning Static spectra Analysis*, одновременный анализ статических и MAS-спектров с привлечением методики *SATRAS* (*Satellite Transition Spectroscopy*, спектроскопия спутников вращения). Определение ^{51}V ЯМР-параметров проводилось моделированием экспериментальных статических и MAS ^{51}V ЯМР-спектров. Для соединения $\text{VO}(\text{-OSi}(\text{O-tBu})_3)_3$ получены следующие ^{51}V ЯМР-параметры: $C_Q = 2$ МГц, $\eta_Q = 0$, $\delta_{\text{iso}} = -767$ м.д., $\delta_s = -421$ м.д., $\eta_s = 0,06$.

Квантово-химические расчеты ^{51}V ЯМР-параметров проводились методом *GIAO* (*Gauge-Including Atomic Orbital*, калибровочно инвариантные атомные орбитали), для $\text{VO}(\text{-OSi}(\text{O-tBu})_3)_3$ получены параметры $C_Q = 2$ МГц, $\eta_Q = 0$, $\delta_{\text{iso}} = -739$ м.д., $\delta_s = -347$ м.д., $\eta_s = 0$.

Видно, что ^{51}V ЯМР-параметры, полученные из экспериментальных спектров, и ^{51}V ЯМР-параметры, определенные квантово-химическими расчетами, очень хорошо совпадают, что позволяет использовать метод ^{51}V ЯМР-кристаллографии для исследования реальных катализаторов VO_x/SiO_2 .

Научные руководители — И. В. Яковлев, д-р хим. наук О. Б. Лапина

Вытеснение толуолом молекулярной воды на поверхности высококремнистых цеолитов

М. А. Яранова

Новосибирский государственный университет

В настоящее время существенно ужесточаются требования по содержанию вредных органических примесей в атмосфере. Основным источником вредных выбросов являются предприятия хим. промышленности. Для удаления органических соединений из промышленных газов используется каталитические технологии. С этой целью применяются роторные концентраторы, в которых реализуется цикл адсорбции и десорбции органических соединений в присутствии влажного воздуха. Для концентраторов в качестве адсорбентов используются высококремнистые цеолиты. Целью предлагаемой работы является исследование процесса вытеснения толуола молекулярной водой на поверхности dealюминированных (высококремнистых) цеолитов.

В работе были исследованы два цеолита со структурой ZSM-5, отличающихся отношением Si/Al и составляющим 100 и 890. Исследование образцов проводилось методом ИК-Фурье-спектроскопии. Изучена десорбция воды при температурах 300–923 К, последовательная, а также одновременная адсорбция воды и толуола из газового потока. Кроме того, по низкотемпературной адсорбции оксида углерода были охарактеризованы свойства поверхности образцов. Регистрацию спектров проводили на спектрометре *Shimadzu FTIR Tracer-100* со спектральным разрешением 4 см^{-1} в диапазоне 600–6000 см^{-1} при температурах 77–523 К.

Был сделан вывод, что высокая степень dealюминирования цеолита не является достаточным условием для получения гидрофобного цеолита. Установлено, что наличие силанольных гнезд обращает dealюминированный цеолит в гидрофильный. Найдены спектральные признаки существования этих гнезд. Вытеснение воды толуолом происходит вследствие более прочных ван-дер-ваальсовых сил взаимодействия между толуолом и поверхностью каналов цеолита в сравнении с водой [1, 2].

1. Kovalyov E. V., Ivanov S. Yu., Toktarev A. V. et al. Effect of water on toluene adsorption over high silica zeolites // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2019. Vol. 277. P. 70–77.

2. Paukshtis E. A., Yaranova M. A., Batueva I. S., Bal'zhinimaev B. S. A FTIR study of silanol nests over mesoporous silicate materials // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2019. Vol. 288. P. 109582.

Научный руководитель — д-р. хим. наук Е. А. Паукштис

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК-53.01

Влияние длины алкильной цепи на структурные аномалии в ионных жидкостях

О. Д. Бакулина, М. Ю. Иванов, С. А. Приходько,
Н. Ю. Адонин, М. В. Федин

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Неоднородности в ионных жидкостях (ИЖ) были объектом многих исследований в последнем десятилетии. Они важны не только как фундаментальное явление — такие неоднородности могут использоваться для многих практических приложений, включая гетерогенный катализ, доставку лекарств, химический синтез и т. д. Поэтому число исследований гетерогенностей и самоорганизации в ИЖ быстро растет.

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) помогает получить уникальную информацию о структурной организации вещества на молекулярном уровне. При таком подходе парамагнитный зонд (в большинстве случаев нитроксильные радикалы) растворяется в ИЖ в незначительных «невозмущающих» концентрациях.

Ранее нашей группой были изучены неоднородности ИЖ методами ЭПР [1, 2]. Вблизи температуры стеклования (T_g) было обнаружено подавление молекулярной подвижности, связанное с необычными структурными перестройками ИЖ на нанометровом масштабе. Импульсный и стационарный ЭПР четко указывают на наличие неоднородностей вблизи T_g в температурном интервале ~ 50 К. Подробный характер наблюдаемых структурных аномалий до сих пор неясен, и дополнительная информация об этом явлении крайне необходима.

Данная работа посвящена исследованию влияния длины алкильной цепи на структурную аномалию в ИЖ на основе имидазолия $[C_n\text{mim}] BF_4$ с различными n .

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФ 19-13-00071.

1. Ivanov M. Yu. et al. Structural Anomalies in Ionic Liquids near the Glass Transition Revealed by Pulse EPR // J. Phys. Chem. Lett. 2018. Vol. 9. № 16. P. 4607–4612.

2. Ivanov M. Yu., Fedin M. V. Nanoscale heterogeneities in ionic liquids: insights from EPR of spin probes // *Mendeleev Commun.* 2018. Vol. 28. P. 565–573.

Научный руководитель — М. Ю. Иванов

Влияние антипиренов различных типов на распространение пламени по жесткому пенополиуретану

А. С. Беспалова

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

Эффективным способом понижения горючести полимеров является добавление в их состав химически и физически активных антипиренов. Выявление механизма действия антипиренов может помочь расширить область применения полимерных материалов и снизить риски возникновения чрезвычайных ситуаций и неконтролируемых происшествий, таких как пожары, в тех местах, где изделия из полимерных материалов активно используются, например, в жилых и производственных помещениях.

Объектом исследования в данной работе являлся пенополиуретан (ППУ) с плотностью в диапазоне 60–90 кг/м³. ППУ находит широкое повсеместное применение во многих областях промышленности, например, в строительстве в качестве теплоизоляционного и шумоизоляционного материала. Однако он является сильногорючим, легковоспламеняемым, чрезвычайно токсичным при горении материалом с высокой дымообразующей способностью. Поэтому для снижения горючести ППУ в его состав были предварительно введены добавки антипиренов, таких как полифосфат меламина (МРР), [расширяющийся] графит (EG), антипирен на основе биологических соединений (BIO), дисфламол (DIS).

Цель работы заключалась в установлении физического и химического действия антипиренов различных типов на характеристики горения ППУ.

В ходе экспериментов для образцов чистого пенополиуретана и с добавками антипиренов были измерены и рассчитаны: линейная скорость распространения пламени по поверхности ППУ; массовая скорость горения ППУ; температура поверхности; температура в газовой фазе; тепловые потоки из пламени; процентное соотношение доли образца, ушедшей в газовую фазу, и доли образца, образовавшей углеродистый слой на поверхности ППУ после горения; эффективная глубина прогорания. Кроме того, представлены результаты термогравиметрического анализа и тепловая структура пламени для некоторых образцов. Проведено исследование механизма действия антипиренов на горение ППУ и сравнение с ППУ без добавок.

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

Влияние полифосфата меланина на горение и термическое разложение жесткого пенополиуретана

Р. К. Глазнев

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

Жесткий пенополиуретан (ППУ) — один из наиболее распространенных теплоизоляционных материалов, широко используемых в строительстве. ППУ отличается низкой плотностью, теплопроводностью и высокой адгезией. Однако ППУ легко воспламеняется вследствие пористой структуры, что существенно ограничивает возможности его применения. Одним из эффективных методов понижения горючести полимеров является добавление в их состав химически активных антипиренов. Полифосфат меланина (ПФМ) — антипирен, отличающийся высокой термостойкостью и низкой токсичностью. Для эффективного использования ПФМ необходимо знать механизм его влияния на горение ППУ.

Цель работы — изучение влияния малой добавки ПФМ (до 3 масс. %) на термическое разложение ППУ и основные характеристики пламени, распространяющегося по горизонтально расположенной пластине ППУ: скорость распространения пламени, скорость убыли массы, тепловой структуры в газовой и конденсированной фазах.

Скорости реакций термического разложения чистого ППУ и ППУ с добавкой ПФМ были получены методом термогравиметрического анализа. Кинетические параметры термического разложения были рассчитаны путем численного решения системы дифференциальных уравнений и оптимизированы с помощью генетического алгоритма. Скорость распространения пламени по образцу полимера была получена из обработки видеозаписи эксперимента. Тепловая структура пламени была изучена с помощью Pt-Pt+10 %Rh микротермопары, приводимой в движение в газовой фазе пламени 3D-позиционирующим устройством. Были получены профили выгорания полимера в конденсированной фазе вдоль зоны пиролиза. Элементный анализ углеродистого остатка показал, что при горении ППУ + ПФМ основная доля фосфора вылетает в газовую фазу. Полученные данные будут использованы при создании модели горения пенополиуретана.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №19-58-53016 с консультациями и участием О. П. Коробейничева, А. С. Беспаловой, С. А. Трубачёва, А. Г. Терещенко.

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

**Исследование методом спектроскопии ЯМР
метаболических профилей тканей лабораторных мышей линии SCID
как модельных объектов злокачественных опухолей человека**

А. В. Глинских

Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Исследования злокачественных опухолей человека с использованием животных моделей широко применяются для разработки новых подходов к диагностике и терапии онкологических заболеваний. Одним из наиболее перспективных методов при этом является метаболический подход, позволяющий с высокой точностью выявлять потенциальные биомаркеры патологий. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является эффективным аналитическим инструментом, широко применяемым в метаболических исследованиях.

В данной работе были исследованы глиобластома человека U87 и гепатоцеллюлярная карцинома человека HepG2. Для моделирования злокачественных опухолей человека на животных моделях были выбраны мыши линии SCID, характеризующиеся тяжелой формой наследственного иммунодефицита. Ксенотрансплантация клеток HepG2 лабораторным мышам линии SCID была проведена подкожно, а клеток U87 — как подкожно, так и ортотопически (в левое полушарие мозга). В качестве объектов для ЯМР-исследования были взяты образцы тканей: у мышей с U87 — ткани мозга (левое и правое полушария), подкожной опухоли и крови, у мышей с HepG2 — ткани печени, подкожной опухоли и крови.

В результате ЯМР-исследования были количественно определены концентрации более 50 метаболитов для каждой группы образцов. Использование t-теста Стьюдента позволило найти достоверные отличия концентраций метаболитов в тканях групп с опухолями в сравнении с контрольной группой. Для U87 — левое полушарие опухоль/контроль — 19 отличий, правое полушарие опухоль/контроль — 11 отличий, левое полушарие/подкожная опухоль — 45 отличий, кровь опухоль/контроль — 10 отличий. Для HepG2 — печень опухоль/контроль — 15 отличий, печень/подкожная опухоль — 37 отличий, кровь опухоль/контроль — 18 отличий. Данное исследование предоставляет новые знания о метаболизме тканей мышей при развитии злокачественных опухолей человека и демонстрирует эффективность метода ЯМР в метаболической микробиологии.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ 17-54-33037.

Научные руководители — канд. биол. наук А. Е. Акулов,
канд. хим. наук О. А. Снытникова

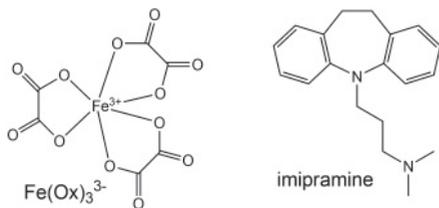
Фотодеградация имипрамина, стимулированная фотолизом оксалатных комплексов трехвалентного железа

С. Е. Ерохин

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

Имипрамин (ИМИ) является представителем трициклических антидепрессантов, проявляющий себя не только как лекарственное вещество, но и как загрязнитель природных вод. Его наличие в водных системах обуславливается сбросом терапевтических средств в стоки производственными компаниями, больницами, частными лицами, а также неправильной утилизацией неиспользованных лекарств. Ввиду этого ИМИ может оказывать негативное влияние на водные экосистемы, поэтому присутствует интерес к изучению способов и механизмов деградации данного соединения в процессах водоочистки, в том числе с использованием фотохимических методов.

В данной работе эксперименты проводились методами стационарного (эксимерная лампа XeCl, 308 нм) и лазерного импульсного фотолиза (3-я гармоника Nd:YAG лазера, 355 нм).



Структурная формула оксалатного комплекса железа и имипрамина

На данный момент получены данные, демонстрирующие полное окисление ИМИ при фотолизе оксалатного комплекса железа. Продемонстрировано, что добавка персульфата калия улучшает эффективность процесса фотодеградации ИМИ. Полученная информация будет далее использована для определения квантовых выходов фотодеградации целевого соединения и природы конечных фотопродуктов хроматографическими методами.

Начаты эксперименты по лазерному импульсному фотолизу ИМИ в присутствии гидроксиокомплекса Fe(III), что позволит определить константу скорости реакции гидроксильного радикала с ИМИ и спектрально-кинетические характеристики радикального аддукта этой реакции.

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

Исследование возможности усовершенствования природных УФ-фильтров: влияние положения метокси-группы в ароматической системе на фотофизические свойства аминокетофенона

Д. Е. Жагупаров

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Кинурины (KN) и его производные выполняют функцию молекулярных УФ-фильтров хрусталика глаза человека. Ключевой особенностью этих молекул является сверхбыстрый переход из синглетного возбужденного (S_1) в основное состояние (S_0) с малым выходом реакционно-активных короткоживущих состояний в протонных растворителях. Высокая эффективность перехода $S_1 \rightarrow S_0$ обусловлена двумя особенностями фотофизики KN: 1) внутримолекулярным переносом заряда с амино- на карбонильную группу молекулы в возбужденном состоянии и 2) эффективной конверсией энергии электронного возбуждения в энергию колебаний молекул растворителя посредством межмолекулярных водородных связей.

Недавно было показано, что введение в структуру KN электрон-донорной группы, которая увеличивает степень переноса заряда на кислород карбонильной группы, приводит к существенному ускорению гибели S_1 состояний в широком наборе растворителей за счет конического пересечения уровней S_1 и S_0 . К сожалению, предложенная молекула является термически нестабильной, что делает невозможным ее практическое применение. Целью данной работы является исследование возможности улучшения УФ фильтрационных свойств KN на примере введения электрон-донорной метокси-группы по различным положениям ароматической системы хромофорного ядра KN — аминокетофенона (AAP).

В данной работе были исследованы спектральные и фотофизические свойства метокси-производных AAP в широком наборе растворителей (от неполярных апротонных до полярных протонных) методами стационарной и время-разрешенной оптической спектроскопии.

Было обнаружено, что независимо от положения метокси-группы наблюдается увеличение переноса заряда на карбонильную группу. Сравнение фотофизических свойств по всему набору растворителей показывает, что замещение ароматической системы по положениям 4 и 6 электрон-донорными группами является наиболее перспективным для дальнейшего улучшения УФ фильтрационных свойств природных УФ-фильтров.

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

**Исследование везикул фосфолипидов DPPC и DPPC-d62
методом комбинационного рассеяния света**

Ю. В. Зайцева

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электротехники СО РАН, Новосибирск

Комбинационное рассеяние света (КРС) широко применяется для изучения фазового состояния липидного бислоя. Некоторые линии в спектрах КРС чувствительны как к конформационным состояниям молекулы, так и к межмолекулярным взаимодействиям.

При изучении методом КРС липидных смесей линии различных компонентов перекрываются, что значительно затрудняет интерпретацию спектра. Возможным решением является дейтерирование одного из компонентов смеси, однако в настоящий момент не все линии в спектре дейтерированного липида однозначно соотнесены с конкретным молекулярным колебанием.

В данной работе исследованы спектры КРС насыщенного фосфатидилхолина DPPC и его дейтерированного аналога DPPC-d62. Для обоснования интерпретации спектра DPPC-d62 выполнено сравнение температурного поведения линий протонированного и дейтерированного липидов в частотном диапазоне $700\text{--}1800\text{ см}^{-1}$. Показано, что по линиям КРС дейтерированных липидов можно делать вывод о конформационном порядке молекул липидного бислоя.

Получены спектры КРС смесей DPPC и DPPC-d62. Исследована зависимость температурного поведения линий CH_2 - и CD_2 -колебаний от концентрации дейтерированного липида. Показано, что линия антисимметричных CD_2 -колебаний имеет низкую интенсивность и не отображает межмолекулярные взаимодействия липидного бислоя, в отличие от линии антисимметричных CH_2 -колебаний.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-12-00127.

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

**Свойства комплексов фосфорил-гуанидиновых
олигонуклеотидов(ФГО) с ДНК в водно-спиртовых растворах**

М. А. Канарская

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии и фундаментальной медицины,
Новосибирск

Производные нуклеиновых кислот (НК) с незаряженным остовом являются перспективными терапевтическими агентами и инструментами молекулярной диагностики. В 2014 г. в ИХБФМ был создан новый класс незаряженных производных нуклеиновых кислот — фосфорил-гуанидиновые олигонуклеотиды (ФГО). Ранее было показано, что ФГО могут образовывать комплексы с комплементарными цепями НК [1].

Целью данной работы является исследование влияния спиртов на гибридационные свойства ФГО.

В качестве модельных были выбраны двенадцатизвенные комплексы олигонуклеотидов, состоящие из нативных и/или полностью ФГ-замещенных цепей ДНК. Типичными представителями спиртов для этого типа исследований были выбраны этанол, этиленгликоль и полиэтилен-гликоль.

Методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала исследована термическая стабильность комплементарных комплексов при различной доле модельных спиртов в водном буферном растворе. Термодинамические параметры формирования комплексов были определены методом оптимизации кривых плавления согласно модели двух состояний.

Показано влияние этанола и этиленгликоля на термическую стабильность комплексов ДНК/ФГО и ФГО/ФГО симбатно с зависимостью для аналогичного ДНК/ДНК комплекса. В случае увеличения доли спирта наблюдается снижение термостабильности комплексов, причем влияние этанола на температуры плавления проявляется более выражено, чем влияние этиленгликоля.

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

1. Dyudeeva E. S. et al. Physicochemical Properties of the Phosphoryl Guanidine Oligodeoxyribonucleotide Analogs // Russian Journal of Bioorganic Chemistry. 2019. Vol. 45(6). P. 709–718.

Научные руководители — В. М. Гольшев,
канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов

Исследование начальных стадий формирования активной фазы Ni-содержащих катализаторов 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 значительную роль играет взаимодействие частиц активной фазы с материалами носителя. В ходе восстановления оксидных частиц водородом могут наблюдаться процессы массопереноса и агломерации частиц, интенсивность которых напрямую связана с энергией взаимодействия активной фазы и носителя.

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, роли носителя.

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.

В данной работе методом ЭМР в режиме *in situ* исследован процесс формирования и эволюции частиц никеля, образующихся в ходе восстановления нанесенных оксидных систем Ni/SiO₂, Ni/TiO, Ni/Al₂O₃ 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

**Перенос индуцируемой параводородом поляризации ядер
в сильных и слабых магнитных полях
для создания гиперполяризованных биомолекул**

В. П. Козиненко

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Получение гиперполяризованных биологических молекул для *in vivo* МРТ-измерений является одним из наиболее перспективных применений ИППЯ (индуцируемая параводородом поляризация ядер). Неравновесная населенность ядерных спиновых состояний молекулы параводорода позволяет получать усиления в 10^3 – 10^5 раз за времена порядка нескольких секунд без использования дорогого оборудования или трудоемких процедур. Однако основной интерес представляет перенос ИППЯ на магнитные гетероядра (^{13}C , ^{15}N и др.). Такие гетероядра менее подвержены релаксационным потерям поляризации по сравнению с протонами и позволяют регистрировать спектры, практически свободные от фоновых сигналов.

В данной работе проводится анализ методов переноса ИППЯ на ядра ^{13}C в сильных и слабых магнитных полях. Использование слабых и ультраслабых магнитных полей позволяет переносить поляризацию с протонов на гетероядра с высокой эффективностью, однако требует специфического оборудования для создания магнитного поля с заданными параметрами и транспорта образца. РЧ-методы, применяемые в сильном поле спектрометра, можно разделить на когерентные (PH-INEPT) и адиабатические (APSOC). Перенос ИППЯ в сильных полях осуществим практически на любом ЯМР-оборудовании, однако часто требует предварительных расчетов и точного подбора реакционных условий.

В качестве модельных систем в работе используются молекулы, представляющие интерес для биологических исследований — малеиновая и фумаровая кислоты, эфиры метаболитов ацетата и пирувата. Для всех соединений исследуется зависимость эффективности переноса ИППЯ от магнитного поля. Для импульсных последовательностей в сильных полях проводится оптимизация всех параметров для получения максимальной поляризации ядер ^{13}C . Проводится сравнительный анализ различных методов переноса ИППЯ в слабых и сильных полях и оценивается эффективность их использования для конкретных биологических систем.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. Л. Иванов,
канд. хим. наук А. С. Кирютин

Селективная МРТ-визуализация реакторов каталитического гидрирования с использованием параводорода

Е. С. Кононенко

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Магнитно-резонансная томография (МРТ) часто используется для получения информации о гетерогенных каталитических реакциях. Однако МРТ обладает рядом недостатков, в особенности при работе с газовой фазой, где спиновая плотность реагентов и продуктов значительно ниже, чем, например, спиновая плотность в жидкой фазе. Кроме того, неоднородность магнитного поля, вызванная присутствием гетерогенных систем, дополнительно затрудняет исследования. Данные ограничения можно преодолеть с помощью методов гиперполяризации, например, посредством индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ), что позволяет усилить сигнал ЯМР на несколько порядков величины и приводит к возможности МРТ-визуализации процессов гидрирования в газовой фазе.

Целью данной работы является развитие методов МРТ-визуализации каталитических процессов гидрирования. Для уменьшения возмущения однородности магнитного поля использовался реактор, представляющий собой стеклянную трубку с нанесенным на поверхность тонким слоем SiO_2 , на который были нанесены предшественники палладия, платины и родия. В качестве субстрата был выбран 1,3-бутадиен. Установлено, что палладиевые катализаторы наиболее селективны к образованию 2-бутена, а платиновые и родиевые катализаторы показали максимальную величину ИППЯ. Кроме того, была получена пространственная информация о распределении продуктов реакции в реакторе.

В результате проведенных исследований были оптимизированы параметры импульсной последовательности *true FISP*, что позволило получить изображения с высоким пространственным разрешением (0,0625 см/пиксель) в псевдо-3D-режиме (8 срезов толщиной 3 мм). Время регистрации изображения составило 18 минут. Полученные результаты однозначно указывают на возможность использования МРТ как высокочувствительного *operando*-метода при исследовании каталитических процессов. Более того, селективная визуализация продуктов реакции по слою катализатора позволяет детальнее исследовать процессы, протекающие в работающем реакторе *in situ*.

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

Поляризация ядер ^{15}N методом *SABRE* в сильных магнитных полях: перенос поляризации и спиновый порядок

Д. А. Маркелов

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является одним из наиболее универсальных методов, позволяющих установить структуру сложных молекулярных соединений, однако при проведении экспериментов в равновесных условиях методы ЯМР обладают низкой чувствительностью. Существенно неравновесное распределение населенностей (гиперполяризация) спиновых уровней энергии позволяет добиться усилений сигналов в 10^3 – 10^4 раз и, следовательно, повысить чувствительность ЯМР-спектроскопии. В настоящее время существует ряд методов создания гиперполяризации, одним из наиболее популярных и эффективных признано семейство методов индуцируемой параводородом поляризации ядер (ИППЯ) в варианте *SABRE*, не требующем гидрирования ненасыщенных связей, при этом особый интерес для исследования представляют магнитные гетероядра со спином $\frac{1}{2}$ (^{15}N , ^{13}C).

В работе проводится анализ методов переноса поляризации методом *SLIC-SABRE* в высоком магнитном поле на ядра ^{15}N . Применение последовательностей РЧ-импульсов создает условия для переноса поляризации в произвольном поле и не требует быстрого переноса образца из поляризатора в спектрометр, однако для достижения значительных усилений сигнала требуется оптимизация большого количества параметров (амплитуда магнитного поля, длительность импульса и др.).

В качестве поляризуемого субстрата в работе используется ^{15}N -меченый пиридин, для которого установлены оптимальные параметры: продолжительность и частота импульса, временная задержка между импульсами, их амплитуды, число циклов переноса поляризации, температура образца. Экспериментально обнаружена S - T_0 -конверсия в молекулярном водороде, зависящая от концентрации субстрата, связанная с временной эволюцией синглетного порядка параводорода в растворе и негативно влияющая на усиление сигнала, разработан метод определения доли синглетного порядка и апробирован метод частичного восстановления синглетного порядка с помощью РЧ-импульсов. Проведено численное моделирование процесса переноса поляризации.

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

Разработка нового метода обработки метаболомных данных ВЭЖХ-МС с применением нейросетей

А. Д. Мельников

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Высокоэффективная жидкостная хроматография с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС) позволяет детектировать большое число метаболитов, что дает возможность достаточно глубоко изучать сложные биологические образцы. Для проведения статистического анализа в метаболомике предварительно необходимо определить все пики в «сырых» ВЭЖХ-МС-данных и проинтегрировать их. Данный шаг является сложным из-за наличия огромного числа сигналов (число пиков может достигать до нескольких десятков тысяч) и сложностью их формы: лишь малое количество сигналов хорошо описывается гауссом. Широко используемые классические методы обработки ВЭЖХ-МС-данных обладают достаточно низкой точностью (от 50 до 80 %), т. е. доля ложноположительных сигналов среди найденных оказывается достаточно высокой. Это может привести к ложным научным открытиям или сильно усложнить работу исследователя.

Данная работа посвящена созданию алгоритма поиска и интегрирования пиков в «сырых» ВЭЖХ-МС-данных с помощью двух сверточных нейронных сетей (CNN). История применения нейронных сетей уже неоднократно показала, что данный метод позволяет справляться с множеством различных задач, которые раньше считались нерешаемыми, например, с автоматической классификацией животных по изображению.

В данной работе предложен и разработан алгоритм, названный *peakonly*. Работу алгоритма можно разбить на три шага: 1) определение потенциально интересных областей в ВЭЖХ-МС-данных (ROI); 2) классификация ROI на три класса с помощью первой CNN — шум, пик (пики), пограничная ситуация; 3) определение границ интегрирования пиков внутри одной ROI, классифицированной как пик (пики), с помощью второй CNN. *Peakonly* показал на настоящий момент наилучшую точность (97 %), среди существующих инструментов. Реализованный подход уже активно используется внутри нашей лаборатории и показывает практически безупречное качество работы.

Peakonly написан на языке Python v3.5 и находится в свободном доступе на GitHub (<https://github.com/arseha/peakonly>).

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 18-29-13023.

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

Определение параметров расщепления в нулевом поле мономолекулярных магнитов на основе ионов кобальта и диспрозия методом терагерцовой ЭПР-спектроскопии

О. В. Минакова

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Молекулярный магнетизм представляет собой динамично развивающуюся научную область, целью которой является дизайн новых полифункциональных материалов с заданными магнитными свойствами. Интерес к исследованию мономолекулярных магнитов (МММ) — один из типов объектов молекулярного магнетизма — обусловлен способностью данных соединений проявлять свойства классического магнита на уровне изолированной молекулы. Важной прикладной задачей в исследовании мономолекулярного магнетизма является создание систем с долгоживущими магнитными состояниями. Такие мономолекулярные магниты в перспективе могут быть использованы в качестве элементарных ячеек хранения информации в устройствах магнитной памяти.

Определение параметров спинового гамильтониана и значения расщепления в нулевом поле (РНП) магнитных подуровней является важным этапом в характеристике МММ систем. В настоящее время появились новые спектральные методы, позволяющие с высокой точностью определить магнитоструктурные параметры мономолекулярных магнитов. К таким методам, в частности, относится метод терагерцовой ЭПР-спектроскопии (ТГц-ЭПР), способный детектировать магнитоструктурные переходы в высокоспиновых системах терагерцовом и дальнем ИК-диапазонах. Данная работа представляет результаты, полученные автором на пользовательской установке ТГц-ЭПР синхротронного центра *BESSY II* в Берлине. Автором были экспериментально задетектированы магнитоструктурные переходы, обусловленные расщеплением в нулевом поле для 8 комплексов на основе кобальта(II) и диспрозия(III), и определены непосредственно их значения расщепления. Для систем $[\text{Co}(\text{L})_2]$ и $[\text{Co}(\text{L})^{\text{Br}}_2]$ ($\text{L}=\text{N}$ -циклогексилсалицилалдиминат) показано, что использование бромзамещенных лигандов слабо влияет ($< 3 \text{ см}^{-1}$) на величину РНП иона кобальта. Представленные результаты являются частью работы по поиску перспективных комплексов для исследования спиновой динамики возбужденных крамерсовых дублетов ионов кобальта(II) на станции ЭПР-спектроскопии лазера свободных электронов.

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

Проникновение неупорядоченного белка в клетки человека: мониторинг в реальном времени по ЭПР

С. С. Овчеренко

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

Неупорядоченные белки (*intrinsically disordered protein (IDP)*) — функционально важный класс белков с природной неупорядоченностью, которые участвуют в передаче сигналов, регуляции, имеют прямое отношение к ряду человеческих заболеваний, включая рак, амилоидоз, сердечно-сосудистые и нейродегенеративные заболевания, а также диабет. Неупорядоченный белок RL2 — рекомбинантный аналог фрагмента человеческого каппа-казеина — способен проникать в клетки человека, индуцируя апоптоз раковых клеток без проявления цитотоксичности в здоровых клетках.

В данной работе мы используем высокостабильную спиновую метку на основе 3-карбоксии-2,2,5,5-тетраэтилпирролидин-1-оксил (**1**) для изучения механизма проникновения RL2 в клетки A549 рака легкого человека методом стационарного ЭПР. Целью работы являлось изучить механизм проникновения спин меченого RL2 и его стабильность внутри клеток.

Проведенные эксперименты показали высокую стабильность метки к окислительно-восстановительному статусу клеток. Таким образом, спиновая метка **1** может успешно применяться для внутриклеточных измерений ЭПР в X диапазоне для меченых белков. Минимальная концентрация спин-меченого белка составила 30 μM , а максимальное время кинетики составило 25 часов. Показано, что RL2 прочно связывается с внешней поверхностью мембраны перед проникновением в клетки. Форма спада сигнала меченого RL2 различается для разных начальных концентраций белка в клетках и демонстрирует наличие разных путей проникновения RL2: эндоцитоз, прямое проникновение. Форма ЭПР-спектров меняется с течением времени после инкубации клеток и хорошо воспроизводится как суперпозиция трех спектров с разными вкладами, которые имеют одинаковые g- и A- тензоры, но разное время корреляции: 0,522 нс, 5,62 нс, $5,62 \cdot 10^{-2}$ нс. Таким образом, мы наблюдаем переходы между тремя разными состояниями RL2: белок в цитоплазме; белок, локализованный на мембране (плазматической или эндосомальной); спиновая метка после расщепления белка.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Е. Г. Багрянская

Диффузионные ЯМР-измерения с использованием долгоживущих спиновых состояний

Н. Ю. Палаткин

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В области спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) можно выделить методики измерения коэффициентов диффузии с использованием импульсных градиентов магнитного поля. Одной из типичных проблем в таких экспериментах являются короткие времена продольной и поперечной релаксации. Так, при измерении диффузии задержка между градиентными импульсами и их длительность выбираются оптимальными. При этом короткие времена релаксации не позволяют использовать длительные задержки, поскольку это приводит к существенному уменьшению отношения сигнал — шум. Использование долгоживущего синглетного порядка во временном промежутке между градиентными импульсами позволяет в значительной степени обойти это ограничение, так как время релаксации синглетного порядка T_s во многих случаях значительно превосходит время T_1 . Одним из наиболее общих методов генерации синглетного порядка является APSOC, в котором применяются импульсы с медленно (адиабатически) изменяемой амплитудой радиочастотного (РЧ) поля.

В работе применялся метод измерения коэффициента диффузии с использованием долгоживущих спиновых состояний. Применение импульсной последовательности требует оптимизации целого ряда параметров, которые находились экспериментально. В качестве объекта исследования выбрана система двух спинов, близких к эквивалентности: в такой системе одно из собственных состояний пары спинов почти совпадает с синглетным состоянием даже в отсутствие РЧ-поля. По этой причине для удержания долгоживущего состояния достаточно применять слабое РЧ-поле во избежание нежелательных конвекционных потоков в образце.

В качестве образца использовался водный раствор дипептида аланин-глицин, а также синглетный порядок протонов CH_2 -группы. Были проведены измерения T_1 и T_s , оптимизированы параметры градиентов поля и APSOC-импульсов, был проведен численный расчет оптимального профиля переключающих РЧ-импульсов. Измерен коэффициент диффузии молекулы аланин-глицин.

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

Исследование продольной акустической моды в спектрах комбинационного рассеяния везикул фосфолипидов

И. В. Решетников

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электротметрии СО РАН, Новосибирск

Изучение фосфолипидов является актуальной задачей, так как они являются составляющими биологических мембран в живых клетках. Для исследования свойств мембран используют модельные системы — синтетические фосфолипидные мембраны (СФМ), так как в случае живой клетки мембраны имеют сложную структуру. В зависимости от температуры СФМ может находиться в различных фазовых состояниях. В упорядоченной гель-фазе фосфолипидные хвосты монослоев параллельны и находятся преимущественно в *all-trans* состоянии. При повышении температуры в хвостах возникают другие конформационные состояния (гош-связи) и мембрана переходит в неупорядоченную флюид-фазу.

Одной из актуальных задач при характеристике исследуемой СФМ (в том числе и в случае многокомпонентной мембраны) является определение доли упорядоченных фосфолипидов. Предполагается, что продольная акустическая мода (ПАМ), которая соответствует сжатию и растяжению С—С—...—С хвостов фосфолипидов, проявляется только в упорядоченном состоянии и может использоваться для решения этой задачи.

В работе исследована ПАМ фосфолипидов DPPC, DOPC и POPC. Исследование проводилось методом комбинационного рассеяния света (КРС). Были измерены спектры КРС для везикул фосфолипидов в водной суспензии в спектральном диапазоне 20–750 см⁻¹. Пик ПАМ для DPPC наблюдается на частотах 150–180 см⁻¹. В температурном диапазоне 100–310 К были определены характеристики пика ПАМ: положение, амплитуда и интегральная интенсивность. Также была получена зависимость интенсивности пика ПАМ как функция доли DPPC в смесях DPPC/DOPC.

В работе показано, что позиция пика ПАМ слабо меняется с ростом температуры, амплитуда пика и его интегральная интенсивность резко спадают с ростом температуры, и пик ПАМ полностью исчезает при переходе мембраны в неупорядоченное состояние. На основании проведенного исследования можно сделать вывод, что интенсивность ПАМ в спектрах DPPC может считаться параметром, определяющим долю фосфолипидов в *all-trans* состоянии.

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

Влияние ионного состояния на электронные спектры галогензамещенных производных флуоресцеина

А. В. Рогова

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Флуоресцеин и его галогензамещенные (эозин, эритрозин и др.) являются хорошо известными флуоресцентными зондами. Благодаря высокой способности поглощать свет и флуоресцировать, красители на основе флуоресцеина используются для маркирования и визуализации бесцветных систем (живых клеток, белков, углеродных нанотрубок и т. д.). В отличие от хорошо изученных спектров поглощения различных протолитических форм флуоресцеина, эозина, эритрозина, сложная структура спектров флуоресценции в широком диапазоне рН не до конца понятна из-за переноса протона в электронных возбужденных состояниях. Это стимулирует интерес к дальнейшим фундаментальным исследованиям их флуоресцентных свойств в водных растворах как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Молекулы рассчитывались в рамках теории функционала плотности с помощью ВЗЛР-функционала в базисе ADZP. На первом этапе была проведена оптимизация геометрий в основном состоянии для ряда флуоресцеиновых красителей (флуоресцеина, эозина, эритрозина) в различных протолитических формах, рассчитаны спектры поглощения с помощью процедуры *Time-Dependent* (TD) [1] с учетом растворителя (*Polarizable Continuum Model*) [2] неравновесной сольватации [3]. На втором этапе оптимизировали геометрию в возбужденном состоянии и получили длину излучения с помощью процедуры TD с учетом растворителя (PCM) в неравновесной сольватации.

Результаты, полученные при рассмотрении неравновесной сольватации, продемонстрировали согласие с экспериментальными данными как для флуоресцеина, так и для его галогензамещенных форм. С помощью теоретических методов можно разобраться с протолитическими формами в широком диапазоне рН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-02-00450.

1. Gross E. K. U., Kohn W. Time-dependent density-functional theory // *Ad. Quantum Chem.* 1990. P. 255–291.

2. Tomasi J., Mennucci B., Cammi R., Quantum mechanical continuum solvation models // *Chem. Rev.* 2005. P. 2999–3094.

3. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev.* 1988. P. 785–789.

Научный руководитель работы — канд. хим. наук, доц. Ф. Н. Томилин

Влияние внешнего магнитного поля на процессы кристаллизации парамагнитных веществ

М. А. Рыбаков

Новосибирский государственный университет

Разработка стратегии синтеза новых магнитоактивных веществ является крайне актуальной задачей наряду с задачей последующей комплексной характеристики их свойств физическими методами. На структуру и свойства продуктов химической реакции и/или кристаллизации веществ могут влиять не только исходные компоненты, но и условия реакции/кристаллизации (температура, растворитель, внешнее давление). Данная работа нацелена на исследование воздействия внешних сильных магнитных полей на процессы кристаллизации магнитоактивных комплексов меди(II) с нитроксильными радикалами.

В качестве источников сильных однородных и градиентных магнитных полей нами были использованы сверхпроводящие магниты ЯМР-спектрометров, имеющие протонную частоту 300 и 700 МГц. Были исследованы профили магнитного поля динных спектрометров вдоль оси симметрии магнита. Были разработаны и изготовлены приспособления для обеспечения безопасной кристаллизации веществ внутри магнита ЯМР-спектрометра, а также для измерения веса веществ, помещенных внутрь магнита, с помощью лабораторных весов.

В ходе проведенных экспериментов с использованием магнита ЯМР-спектрометра 300 МГц были получены зависимости изменения удельного веса соли CuSO_4 , воды и гексана C_6H_{14} в однородных и высокоградиентных магнитных полях. Продемонстрировано достижение условий левитации соли CuSO_4 в магнитном поле ЯМР-спектрометра 300 МГц, что с хорошей точностью согласуется с проделанными теоретическими расчетами. Были получены первые результаты процессов кристаллизации парамагнитных комплексов меди и нитроксильных радикалов в сильном поле ЯМР-спектрометра 700 МГц. Обсуждаются свойства полученных комплексов и возможные дальнейшие направления исследований.

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

Распространение пламени по слою сосновой хвои

А. Р. Сагитов

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

Распространение низового пожара по слою лесных горючих материалов (ЛГМ) является часто используемой моделью лесного пожара. Рассмотрение этой модели имеет практическое значение, так как в ней описаны общие особенности механизма распространения низовых лесных и степных пожаров. Имеется огромное количество работ по математическому моделированию распространения пожара по слою ЛГМ. В то же время имеется несравнимо малое количество работ по экспериментальному исследованию этого процесса и измерению детальных характеристик параметров пламени, таких как профили температуры в слое ЛГМ и вне него. Все эти данные необходимы для проверки достоверности предположений, сделанных в тех или иных моделях, путем сопоставления эксперимента с результатами расчета.

Цель работы — в лабораторных условиях исследовать скорость распространения пламени по слою сосновой хвои сибирских лесов, его тепловую структуру, включая измерение теплового потока из пламени в слой, при разной скорости ветра и плотности слоя.

Эксперименты проводились в проточной камере сгорания, в которую подавался поток воздуха с различным расходом, обеспечивающим скорость движения воздуха в камере до 0,5 м/с. Слой хвои находился в нижней части камеры. Тепловая структура пламени была изучена с помощью датчика теплового потока, находящегося в зоне горения слоя ЛГМ при прохождении пламени, и микротермопарой, установленной на 3D-координатном сканирующем устройстве. Скорость распространения пламени по слою сосновой хвои была получена из обработки видеозаписи эксперимента. Полученные в работе экспериментальные данные по скорости распространения пламени вдоль слоя хвои, структуре фронта пламени могут быть использованы при разработке модели распространения низового пожара с учетом специфики сибирских лесов.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ-БРИКС

№19-58-80002 (руководитель проф. О. П. Коробейничев) с участием канд. хим. наук А. Г. Шмакова, канд. физ.-мат. наук А. Г. Терещенко и С. А. Трубачёва.

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

Исследование влияния протоколов криоконсервации на зарядовое состояние цитохромов в эмбрионах мыши

Е. А. Сажина

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электротехники СО РАН, Новосибирск

Технология криоконсервации преимплантационных эмбрионов мыши — единственный способ сохранения такого вида генетического материала. Криоконсервация реализуется по одному из трех протоколов: программное замораживание, витрификация с проникающими и непроникающими криопротекторами. Основные отличия этих методик — скорость замораживания и криопротекторные растворы. Программное замораживание проводится со скоростями охлаждения ~ 1 °С/мин, а при витрификации образец охлаждается со скоростью более 1000 °С/мин. Обычно при витрификации используются проникающие криопротекторы. Недавно было показано, что с помощью лазерного разогрева возможно витрифицировать клетки без применения проникающих криопротекторов [1].

Каждый протокол криоконсервации оказывает влияние на клетку. Чаще всего изучаются последствия после криоконсервации и практически отсутствуют работы, в которых бы исследовалось влияние охлаждения на состояние клеток при низких температурах. В настоящей работе мы проанализировали влияние трех подходов на состояние цитохромов в дыхательной электрон-транспортной цепи (ЭТЦ). Для этого использовался безметочный и бесконтактный метод резонансного комбинационного рассеяния света (РКРС).

Было проведено исследование интенсивностей пиков цитохромов *c* для каждого протокола охлаждения. Показано, что для протокола витрификации с проникающими криопротекторами цитохромы находятся в окисленном состоянии. Сделано предположение, что окисление цитохромов происходит из-за проникновения в клетку токсичных криопротекторов, при комнатной температуре. Из этого предположения следует, что программное замораживание и витрификация с непроникающими криопротекторами не приводят к значительному окислительному стрессу, в отличие от витрификации с проникающими криопротекторами.

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

1. Jin B., Peter Mazur P. High survival of mouse oocytes/embryos after vitrification without permeating cryoprotectants followed by ultra-rapid warming with an IR laser pulse // Scientific Reports. 2015. Vol. 5 P. 9271.

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

Комплексы порфиринов с человеческим сывороточным альбумином: структурная информация, полученная методом ЭПР-спектроскопии

Н. Э. Санникова

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) широко используется для исследования структурных и функциональных характеристик биополимеров. Для этих целей в исследуемый объект селективно вводится спиновая метка. Недавно был предложен совершенно новый класс спиновых меток на основе фотовозбужденных триплетных состояний порфирина и фуллерена. Преимущество в использовании фотоиндуцированных триплетных состояний по сравнению со стандартными спиновыми метками заключается в многократном увеличении интенсивности регистрируемого ЭПР-сигнала за счет сформированной электронной поляризации, что позволяет сократить количество необходимых накоплений. Важными параметрами для спиновых меток, которые определяют область их применения в ЭПР, являются времена электронной спин-спиновой (T_1) и спин-решеточной релаксации (T_2).

В данной работе проведено исследование механизмов электронной спиновой релаксации для меток на основе фотоиндуцированного состояния порфирина с использованием в качестве модели водорастворимого катионного порфирина ТМРурР4 (5,10,15,20-тетракис (4-N-метилпиридилпорфирина)). В результате была получена линейная зависимость $1/T_2$ от доли ядер дейтерия в окружении порфирина, что свидетельствует о значительном вкладе электрон-ядерного взаимодействия с ядрами растворителя в спин-спиновую релаксацию триплетного состояния порфирина. Максимальное значение T_2 (14 мкс) наблюдается в полностью дейтерированном окружении. Столь высокое значение T_2 имеет особое значение для дальнейшего применения порфиринов в качестве спиновых меток и показывает возможность их применения для измерения относительно длинных расстояний в биомолекулах.

Зависимость T_2 порфиринов от дейтерирования окружения позволяет использовать данный параметр для определения локализации фотоактивных молекул в комплексах с биополимерами. Для демонстрации преимуществ данного подхода нами были исследованы комплексы человеческого сывороточного альбумина (ЧСА) с двумя производными порфирина: водорастворимым порфирином ТМРурР4 и гидрофобным тетра (гидроксифенил) порфирином. Похожие по химическому строению порфирины используются в фотодинамической терапии, и эффективность фотосенсибилизаторов, связанных с ЧСА, зависит от его локализации на белке. Для получения наиболее

полной информации о комплексе мы также анализировали относительную интенсивность пика дейтерия в Фурье- спектрах в экспериментах ESEEM и функции распределения по расстояниям между фотовозбужденным триплетом фотосенсибилизаторов и нитроксильным радикалом, селективно введенным в ЧСА, полученных методом PELDOR. В результате разработанный подход позволил установить сайты связывания исследуемых порфиринов на ЧСА и определить их доступность для молекул растворителя.

Работа выполнена при поддержке РФФ № 18-73-00292.

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

Исследование димеров человеческого сывороточного альбумина методом ЭПР-спектроскопии

А. С. Спицына

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

Человеческий сывороточный альбумин выполняет в организме транспортную функцию и часто используется в роли доставщика лекарств, в том числе в раковые клетки. Также альбумин участвует в формировании амилоидных бляшек в головном мозге при нейродегенеративных заболеваниях, таких как болезнь Альцгеймера. Исследование олигомеризации альбумина представляет интерес для выяснения механизмов, приводящих к этим заболеваниям. Введение спиновых меток в белок и последующее использование методов ЭПР-спектроскопии позволяют исследовать конформацию этого белка и измерять распределения по расстояниям между метками.

В качестве спиновых меток часто используются нитроксильные радикалы, но они имеют короткие времена фазовой релаксации, что не позволяет применять их для импульсных дипольных ЭПР-методов при температурах выше 80 К. В качестве альтернативы можно использовать триарилметильные радикалы, имеющие требуемые времена релаксации уже при комнатных температурах. В этой работе использовалась гидрофильная триарилметильная спиновая метка ОХ063, разработанная и синтезированная в НИОХ СО РАН.

Мы исследовали ковалентные и нековалентные димеры альбумина: распределения по расстояниям между спиновыми метками в димере, времена фазовой релаксации, стационарные ЭПР-спектры. В качестве спиновых меток использовались нитроксильный радикал МТSL и триарилметильный радикал ОХ063 с новым линкером. Также был проведен анализ возможной структуры димеров, которые предположительно представляют из себя первую стадию олигомеризации альбумина.

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

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

Испускание флуоресценции в экстремально кислых средах

Д. П. Суржикова

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Флуоресцеин, благодаря высокой поглощательной способности и выраженным флуоресцентным свойствам, широко применяется для визуализации бесцветных систем (живых клеток, белков). Способность обратимым образом менять ионное состояние при изменении кислотности среды предполагает также его использование в качестве рН-индикатора. Если спектры поглощения ионных форм флуоресцеина изучены достаточно подробно, то контуры флуоресценции до сих пор не определены из-за спектрального перекрытия и переноса протона в возбужденном состоянии. Наибольшую неопределенность характеристик (спектры, времена жизни) имеют нейтральная хиноидная и цвиттер-ионная формы, которые образуются при $\text{pH} < 3,5$ и существуют лишь в составе смеси с другими ионными состояниями. Мы использовали ряд взаимодополняющих методов стационарной флуоресцентной спектроскопии, чтобы выявить индивидуальные свойства нейтральных форм флуоресцеина.

Из составных спектров флуоресценции при $\text{pH} 0 \div 3$ методом Аленцева — Фока были выделены контуры испускания, отнесенные нами к нейтральной цвиттер-ионной и хиноидной формам с максимумами 480 и 515 нм соответственно. Показано, что за пределами этого диапазона рН становится значимым вклад других ионных состояний. Были найдены частоты 0–0 перехода, радиационное время жизни, оценен квантовый выход для каждой из форм. Методом синхронного сканирования флуоресценции был выявлен эффективный перенос протона в возбужденном состоянии, приводящий к тому, что в кислых средах поглощает катионная форма флуоресцеина, а испускает хиноидная с разницей максимумов спектров испускания около 75 нм.

Результаты работы направлены на разработку флуоресцентных маркеров в экстремально кислых средах, актуальных для гастроэнтерологии и экологического мониторинга.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 19-02-00450).

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. Е. А. Слюсарева

Применение оксалатных комплексов железа и персульфата калия для фотодеградациии растворов пара-арсаниловой кислоты

Ю. Е. Тютерева

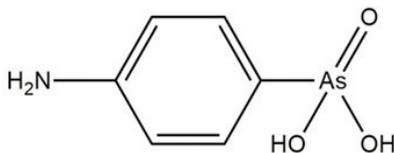
Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Пара-арсаниловая кислота (p-ASA) является представителем мышьяксо-держащих кормовых добавок, широко используемых в животноводстве и птицеводстве в качестве антибиотиков для стимулирования роста и профилактики заболеваний животных [1]. Хотя сами кормовые добавки обладают низкой токсичностью, продукты их биологического и (фото)химического разложения — неорганические соединения мышьяка и другие органические побочные продукты — проявляют значительную токсичность для живых организмов [2]. В связи с этим наблюдается интерес к изучению механизмов деградации данных соединений в окружающей среде и в процессах водоочистки.

Оксалатные комплексы железа и персульфата калия часто применяются для повышения результативности фотодеградациии целевых соединений, так как при их облучении происходит генерация активных окислительных радикалов.

В данной работе эксперименты проводились методами стационарного (эксимерная лампа XeCl, 308 нм) и лазерного импульсного фотолиза (Nd:YAG лазер, 355 нм).

В ходе работы были получены данные об интермедиатах и квантовых выходах фотодеградациии целевого соединения в присутствии добавок оксалата железа и персульфата калия. Полученные данные важны для понимания эффективности фотодеградациии p-ASA под действием УФ-облучения в процессах водоочистки с применением вышеуказанных добавок по сравнению с фотодеградациией в их отсутствие.



Структурная формула
пара-арсаниловой кислоты

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

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

Спектральные свойства связанных с биополимером родаминовых красителей

Е. В. Хименко

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Биоконъюгаты из полимеров и флуоресцирующих красителей позволяют визуализировать биологически активные вещества и системы доставки лекарственных средств. Одним из таких веществ является арабиногалактан — водорастворимый растительный полисахарид, повышающий всасываемость лекарственных средств с низкой биодоступностью и являющийся гепариноидом. В связи с тем, что молекулы полисахаридной структуры не обладают выраженными спектральными свойствами в ближней УФ- и видимой области спектра, арабиногалактан (из лиственницы сибирской) был химически связан с родаминовыми красителями (родамин В, родамин 6G), известными своими флуоресцентными свойствами (высокий квантовый выход). В своей работе мы исследовали спектрально-флуоресцентные свойства новых биоконъюгатов и сравнили их со свойствами водных растворов родаминов.

Было установлено, что спектры поглощения биоконъюгатов уширены и смещены в красную область по сравнению со спектрами родаминов. При этом наибольшие изменения показывает родамин 6G (максимум сдвинут на 11 нм). Наблюдаемая разница в спектральных свойствах была соотнесена с химической структурой красителей, один из которых имеет катионную природу, а другой — цвиттер-ионную. Спектры флуоресценции отличаются незначительно по отношению к спектрам исходных веществ. Квантовый выход флуоресценции биоконъюгатов, определенный относительным методом, оказался в 2–3 раза ниже, чем у исходных красителей, но оказался достаточно высоким для их визуализации спектрально-флуоресцентными методами. Времяразрешенные измерения показали уменьшение флуоресцентного времени жизни биоконъюгатов по сравнению с исходными красителями.

Полученные результаты могут быть использованы в задачах биомаркирования и биосенсорики.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. Е. А. Слюсарева

Нелинейные оптические свойства красных флуоресцентных белковА. А. Царенко¹, Э. Йованович²¹ Московский физико-технический институт² Белградский университет, Белград, Сербия

Флуоресцентные белки используются для отслеживания молекулярных процессов в живых клетках и организмах [1]. Среди флуоресцентных белков выделяются красные флуоресцентные белки (*Red Fluorescent Proteins*, RFP), которые позволяют проводить наблюдения в глубоких тканях и использовать длины волн возбуждающего света, которые не повреждают биологическую систему [2]. Важным способом визуализации молекулярных процессов с использованием флуоресцентных белков является двухфотонная поляризационная микроскопия (*Two-photon polarization microscopy*, 2PPM) [3, 4]. Эффективное использование красных флуоресцентных белков в двухфотонной поляризационной микроскопии требует детального знания их нелинейных оптических свойств.

Целью этого проекта было определение направлений, по которым красные флуоресцентные белки поглощают свет посредством нелинейного оптического процесса двухфотонного возбуждения.

Для достижения этой цели было необходимо кристаллизовать RFP, измерить оптические свойства их кристаллов и интерпретировать полученные результаты с помощью математического моделирования. Белки были получены с помощью стандартных методов молекулярной биологии, а именно методом трансформации плазмидной ДНК в клеточные линии *E. Coli* BL21 и DH5 α . Полученные белки mScarlet, mCherry, eqFP670, DsRed2 и mPlum были кристаллизованы. Кристаллизация белка нужна была для того, чтобы молекулы белка были жестко закреплены в структуре кристалла и можно было наблюдать, как меняются флуоресценция от угла поляризации возбуждающего света по отношению к моменту флуорофора. В дальнейшей работе были использованы только кристаллы mCherry, так как остальные кристаллы не выросли.

Анализ кристаллов включал измерение флуоресценции и описание ее значения. Наблюдение флуоресценции полученных кристаллов проводилось с помощью двухфотонного поляризационного микроскопа при двух длинах волн 700 и 1020 нм.

После получения экспериментальных данных последовала теоретическая интерпретация полученных результатов как с помощью тензорного описания значения флуоресценции для двухфотонного возбуждения, так и упрощенной векторной аппроксимацией, которая используется для одно-

фотонного возбуждения. Было проведено сравнение двух этих методов описания оптических свойств белков, а также попытка вычисления некоторых элементов двухфотонного тензора поглощения.

Таким образом, в ходе исследования мы пришли к следующим заключениям:

- 1) mCherry демонстрирует различную направленность 2P поглощения при 700 и 1020 нм;
- 2) оптические свойства при 1020 нм могут быть аппроксимированы вектором;
- 3) оптические свойства при 700 нм не могут быть описаны вектором. Определено несколько элементов тензора поглощения.

1. Chalfie M., Tu Y., Euskirchen G. et al. Green fluorescent protein as a marker for gene expression // *Science*. 1994. Vol. 263(5148). P. 802–805.

2. Drobizhev M., Tillo S., Makarov N. S. et al. Absolute two-photon absorption spectra and two-photon brightness of orange and red fluorescent proteins // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2009. Vol. 113. P. 855–859.

3. Lazar J., Bondar A., Timr S., Firestein S. J., Two-photon polarization microscopy reveals protein structure and function // *Nature Methods*. 2011. Vol. 8. P. 684–690.

4. Bondar A., Lazar J. Dissociated $G\alpha$ GTP and $G\beta\gamma$ Subunits are the Major Activated Form of Heterotrimeric Gi/o Proteins // *The Journal of biological chemistry*. 2013. Vol. 289. doi: 10.1074/jbc.M113.493643.

Научный руководитель — канд. хим. наук, доц. Й. Лазар

Изучение неоднородностей микронного масштаба в многослойных липидных пленках методом комбинационного рассеяния света

Д. В. Шамаева

Новосибирский государственный университет

Изучение фосфолипидных бислоев представляет интерес для биофизики, так как они являются основным компонентом мембран биологических клеток. В смесях фосфолипидов могут формироваться разные по составу фазы. Пространственное распределение фаз, а также масштаб этих областей определяют свойства бислоя. В качестве метода исследования липидных структур хорошо подходит спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС), поскольку это метод бесконтактный, неразрушающий и с высоким пространственным разрешением. Данная работа посвящена изучению состава многокомпонентных фосфолипидных смесей методом спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Для исследования использованы липиды: дипальмитоилфосфатидилхолин протонированный (DPPC) и дейтерированный (dDPPC), диолеилфосфатидилхолин (DOPC), холестерин (Chol). Приготовлены планарные структуры фосфолипидов, смешанных в соотношении DPPC:dDPPC = 1:1, DOPC:dDPPC = 1:2 и DOPC:dDPPC:Chol = 1:1:1. Многослойные фосфолипидные образцы синтезированы из водной суспензии однослойных липидных везикул осаждением на стекло. Спектры КРС получены на установке, оборудованной твердотельным лазером, излучающим на длине волны 532 нм, микроскопом, монохроматором с охлаждаемым жидким азотом ПЗС-детектором, а также системой картирования. Анализ состава образцов проводился по интенсивностям пиков симметричных валентных колебаний водорода (sCH_2) и дейтерия (sCD_2). Было проведено КРС-картирование образцов с пространственным разрешением 0,6 мкм.

Обнаружено, что в образце DPPC:dDPPC состав однородный. В образце DOPC:dDPPC наблюдаются пространственные неоднородности состава, масштаб которых соответствует ~ 1 мкм. В смеси DOPC:dDPPC:Chol присутствуют области масштаба ~ 5 мкм с резкими границами и повышенной концентрацией молекул dDPPC. Таким образом, было продемонстрировано, что метод комбинационного рассеяния света позволяет получить информацию о химическом составе фаз и их пространственном распределении в липидных структурах.

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

Указатель авторов

Абдыкеримов А. Д.	5	Канарская М. А.	83
Адонин Н. Ю.	75	Кандаракова И. Т.	84
Айдаков Е. Е.	28	Кахидзе Н. И.	30, 33, 42, 63
Атаманова М. В.	29	Кашцев А. С.	43
Ахмадиева А. А.	30	Козиненко В. П.	85
Бакулина О. Д.	75	Кокорина А. И.	44
Белобров П. И.	15	Коновалов А. Н.	13
Беспалова А. С.	77	Коновалова В. П.	45
Богословцева А. Л.	31	Кононенко Е. С.	86
Бойко Е. В.	32, 68	Костогруд И. А.	32
Булушева Л. Г.	49	Кравчук В. Ю.	46
Буянов Д. А.	7	Кудрявцев А. Л.	47
Валихов В. Д.	33, 63	Кузнецов Т. А.	48
Венедиктова И. А.	34	Кузнецова В. Р.	49
Веремчук М. Э.	69	Курчев А. В.	50
Винарский В. П.	35	Лиз Е. А.	14
Винокуров Д. Д.	36	Лобяк Е. В.	49
Волошин Б. В.	37	Лукьяненко К. А.	15
Гизатулина Н. Р.	30	Лунев Н. А.	51
Гисич А. В.	8	Майдан М. Т.	52
Глазнев Р. К.	78	Маркелов Д. А.	87
Глинских А. В.	79	Мельников А. Д.	88
Гурко М. А.	9	Меркулова И. Е.	51
Денисов И. А.	15	Минакова О. В.	89
Дмитриев Д. В.	53	Митрофанов И. А.	53
Добош А. Ю.	38	Михайлова Е. В.	55
Долгих И. А.	10	Михненко М. Д.	56
Дудко С. Г.	11	Носирова К. А.	57
Дюсенова С. Е.	39	Овчеренко С. С.	90
Ерохин С. Е.	80	Окотруб А. В.	49
Есимбекова Е. Н.	15	Оскеро Д. С.	16
Жагупаров Д. Е.	81	Палаткин Н. Ю.	91
Забодаев С. В.	7	Паулиш А. А.	58
Зайцева Ю. В.	82	Паулиш Н. А.	60
Замосковцева А. А.	12	Печугина С. А.	61
Зырянов Д. Е.	55	Пивкина А. В.	17
Иванов М. Ю.	75	Писарев Э. В.	18
Йованович Э.	103	Плечко Е. А.	19
Ишутина П. Д.	40	Приходько С. А.	75
Камильянова А. А.	41	Решетников И. В.	92

Рогова А. В.	93	Тютерева Ю. Е.	101
Рыбаков М. А.	94	Ушканов А. А.	71
Сагитов А. Р.	95	Федин М. В.	75
Сажина Е. А.	96	Филатова Н. А.	22
Санникова Н. Э.	97	Хименко Е. В.	102
Севостьянов Г. Ю.	62	Хоряк М. Н.	23
Селиховкин М. А.	63	Хоу Мэйна	72
Семерикова А. И.	64	Царенко А. А.	103
Серебренникова П. С.	66	Черепанова Н. Е.	73
Сопов К. В.	67	Шамаева Д. В.	105
Сорокин Д. В.	68	Шепелин А. В.	24
Спирёва Д. В.	20	Шило А. С.	26
Спицына А. С.	99	Якимов А. С.	15
Суржикова Д. П.	100	Яранова М. А.	74
Требушинин А. Е.	69		
Третьяков Д. С.	70	G. Ying	27
Трусов К. В.	21	Osokin V. B.	27

Содержание

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Абдыкеримов А. Д.	5
Буянов Д. А., Забодаев С. В.	7
Гисич А. В.	8
Гурко М. А.	9
Долгих И. А.	10
Дудко С. Г.	11
Замосковцева А. А.	12
Коновалов А. Н.	13
Лиз Е. А.	14
Лукияненко К. А., Денисов И. А., Якимов А. С., Есимбекова Е. Н., Белобров П. И.	15
Оскеро Д. С.	16
Пивкина А. В.	17
Писарев Э. В.	18
Плечко Е. А.	19
Спирёва Д. В.	20
Трусов К. В.	21
Филатова Н. А.	22
Хоряк М. Н.	23
Шепелин А. В.	24
Шило А. С.	26

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

Osokin V. V., G. Ying	27
Айдаков Е. Е.	28
Атаманова М. В.	29
Ахмадиева А. А., Гизатулина Н. Р., Кахидзе Н. И.	30
Богословцева А. Л.	31
Бойко Е. В., Костоград И. А.	32
Валихов В. Д., Кахидзе Н. И.	33
Венедиктова И. А.	34
Винарский В. П.	35
Винокуров Д. Д.	36
Волошин Б. В.	37

Добош А. Ю.	38
Дюсенова С. Е.	39
Ишугина П. Д.	40
Камильянова А. А.	41
Кахидзе Н. И.	42
Кашеев А. С.	43
Кокорина А. И.	44
Коновалова В. П.	45
Кравчук В. Ю.	46
Кудрявцев А. Л.	47
Кузнецов Т. А.	48
Кузнецова В. Р., Лобяк Е. В., Булушева Л. Г., Окотруб А. В.	49
Курчев А. В.	50
Лунев Н. А., Меркулова И. Е.	51
Майдан М. Т.	52
Митрофанов И. А., Дмитриев Д. В.	53
Михайлова Е. В., Зырянов Д. Е.	55
Михненко М. Д.	56
Носирова К. А.	57
Паулиш А. А.	58
Паулиш Н. А.	60
Печугина С. А.	61
Севостьянов Г. Ю.	62
Селиховкин М. А., Кахидзе Н. И., Валихов В. Д.	63
Семерикова А. И.	64
Серебренникова П. С.	66
Сопов К. В.	67
Сорокин Д. В., Бойко Е. В.	68
Требушинин А. Е., Веремчук М. Э.	69
Третьяков Д. С.	70
Ушканов А. А.	71
Хоу Мэйна	72
Черепанова Н. Е.	73
Яранова М. А.	74

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Бакулина О. Д., Иванов М. Ю., Приходько С. А., Адонин Н. Ю., Федин М. В.	75
Беспалова А. С.	77
Глазнев Р. К.	78
Глинских А. В.	79

Ерохин С. Е.	80
Жагупаров Д. Е.	81
Зайцева Ю. В.	82
Канарская М. А.	83
Кандаракова И. Т.	84
Козиненко В. П.	85
Кононенко Е. С.	86
Маркелов Д. А.	87
Мельников А. Д.	88
Минакова О. В.	89
Овчеренко С. С.	90
Палаткин Н. Ю.	91
Решетников И. В.	92
Рогова А. В.	93
Рыбаков М. А.	94
Сагитов А. Р.	95
Сажина Е. А.	96
Санникова Н. Э.	97
Спицына А. С.	99
Суржикова Д. П.	100
Тютерева Ю. Е.	101
Хименко Е. В.	102
Царенко А. А., Йованович Э.	103
Шамаева Д. В.	105
Указатель авторов.....	106

Научное издание

МНСК-2020

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ
И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Материалы
58-й Международной научной студенческой конференции

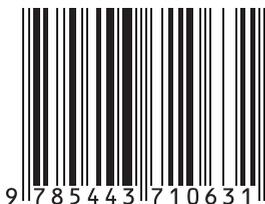
10–13 апреля 2020 г.

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

Подписано в печать 08.04.2020 г.
Формат 60 × 84/16. Уч.-изд. л. 7. Усл. печ. л. 6,5.
Тираж 100 экз. Заказ № 79.
Издательско-полиграфический центр НГУ
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Секция
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ
И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

ISBN 978-5-4437-1063-1



N* Новосибирский
государственный
университет
*НАСТОЯЩАЯ НАУКА

