

Материалы секции
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ



22-27 апреля 2018
НОВОСИБИРСК

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МНСК-2018

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы
56-й Международной научной студенческой конференции

22–27 апреля 2018 г.

Новосибирск
2018

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. Л. Лаврик,
канд. физ.-мат. наук Ю. И. Глазачев, канд. физ.-мат. наук Д. В. Корнеев,
канд. физ.-мат. наук А. Г. Марьясов, канд. физ.-мат. наук Д. И. Строкотов,
канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов, канд. физ.-мат. наук В. В. Яньшоло,
канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин, канд. биол. наук С. А. Федорова

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

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

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:
д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан,
д-р физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН Н. В. Суровцев,

д-р физ.-мат. наук К. Л. Иванов, канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер,
канд. хим. наук А. Г. Матвеева, канд. хим. наук А. А. Габриенко,
канд. физ.-мат. наук А. А. Палецкий, канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева,
канд. физ.-мат. наук П. С. Шерин

Ф 505 Физические методы в естественных науках : Материалы 56-й
Международ. науч. студ. конф. 22–27 апреля 2018 г. / Новосибир. гос.
ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2018. — 104 с.

ISBN 978-5-4437-0746-4

УДК 33
ББК Б.в672я431

ISBN-5-4437-0746-4

© СО РАН, 2018
© Новосибирский государственный
университет, 2018

NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY
SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

ISSC-2018

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

Proceedings
of the 56th International Students Scientific Conference

April, 22–27, 2018

Novosibirsk
2018

УДК 33
ББК Б.В672Я431
Ф 505

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

Section scientific committee:

Section scientific committee «Biomedical physics»:
Dr. Phys. Math., Prof. V. P. Maltsev, Dr. Chem. N. L. Lavrik,
Cand. Phys. Math. Glazachev Yu. I., Cand. Phys. Math. D. V. Korneev,
Cand. Phys. Math. A. G. Maryasov, Cand. Phys. Math. D. I. Strokotov,
Cand. Phys. Math. A. A. Lomzov, Cand. Phys. Math. V. V. Yanshole,
Cand. Phys. Math. M. A. Yurkin, Cand Biol. S. A. Fedorova

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

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

Section scientific committee «Chemical and Biological Physics»:

Dr. Chem., Prof. A. V. Baklanov, Dr. Chem., Prof. N. P. Gritsan, Dr. Phys. Math.,
Assoc. Prof. N. V. Surovtsev, Dr. Phys. Math. K. L. Ivanov, Cand. Phys. Math.
S. L. Weber, Cand. Phys. Math. A. G. Matveeva, Cand. Chem. A. A. Gabrienko,
Cand. Phys. Math. A. A. Paletskiy, Cand. Phys. Math. O. A. Krumkacheva,
Cand. Phys. Math. P. S. Sherin

Ф 505 Physical methods in natural sciences : Proceedings of the 56th International Students Scientific Conference. April, 22–27, 2018 / Novosibirsk State University. — Novosibirsk : IPC NSU, 2018. — 104 p.

ISBN 978-5-4437-0746-4

**УДК 33
ББК Б.В672Я431**

ISBN 978-5-4437-0746-4

© SB RAS, 2018
© Novosibirsk State University, 2018

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 533: 612.2

Моделирование течения в бронхиальном дереве человека

П. С. Гафурова

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

На сегодняшний день представляет интерес задача о поступлении лекарственных препаратов через бронхиальное дерево в альвеолы человека. Применение медикаментов через носовую полость имеет серьезные преимущества над другими способами введения в том, что действует непосредственно в самом месте патологии и не оказывает влияние на печень.

Имеется несколько способов построения бронхиального дерева.

Первый — это использование снимков магнитно-резонансной томографии. Этот способ является довольно сложным и трудоемким, а также разрешение полученных снимков не позволяет нам точно восстановить мелкие бронхи.

Второй способ — это построение численной модели, с использованием формул, определяющих длины l и диаметра d каждого бронха, которые зависят от числа бифуркаций n :

$$d = \begin{cases} 0.018 \exp(-0.388n), & n \leq 3 \\ 0.013 \exp[-(0.2929 - 0.00624n)n], & n > 3 \end{cases}$$
$$l = \begin{cases} 0.12 \exp(-0.92n), & n \leq 3 \\ 0.025 \exp(-0.17n), & n > 3 \end{cases}$$

В данной работе был использован аналитический способ построения симметричного бронхиального дерева. Построение производилось в пакете программ COMSOL Multiphysics. Симметрия дает нам возможность сократить расчетную область, а аналитическое построение бронхиального дерева позволяет построить «хорошую» расчетную сетку.

Бронхиальное дерево строилось с использованием аналитических решений. Отдельная бифуркация состоит из элементов четырех торов и четырех объединяющих их криволинейных поверхностей. Из отдельных бифуркаций собирается бронхиальное дерево.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, акад. РАН В. М. Фомин,
д-р физ.-мат. наук А. Е. Медведев

Вариабельность 3' UTR геномной РНК вируса клещевого энцефалита и изменчивость 3' UTR при культивировании в различных типах клеток

А. В. Гладышева, В. А. Терновой, Е. П. Пономарева,
Т. П. Микрюкова, Е. В. Протопопова, С. Н. Коновалова,
Е. В. Чаусов, А. Н. Швалов, В. Б. Локтев
Новосибирский государственный университет,
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора, р. п. Кольцово

Нами было проведено определение 22 полногеномных последовательностей различных штаммов ВКЭ, относящихся к трем основным генотипам. Установлено, что штаммы европейского генотипа обладают наиболее длинным геномом. Основную роль в варьировании размеров вирусного генома играет значительная гетерогенность вариабельной области 3' UTR (V3'UTR) ВКЭ, размер которой колеблется от 87 до 446 нуклеотидов.

Моделирование 3'UTR РНК ВКЭ выявило существенные изменения вторичной структуры в V3'UTR ВКЭ, а в консервативном регионе 3'UTR (С3'UTR) структура сохранилась. Наиболее разнообразная структура V3'UTR характерна для европейского генотипа ВКЭ. Она представлена двойными Y-образными структурами и 2–4 стеблевыми петлями (SL). Дальневосточный генотип имеет 1–2 Y-образных структур в V3'UTR, а сибирский генотип имеет обычно пару Y-образных структур. Штамм Tomsk-PT122, изолированный из птицы, имеет всего одну SL и одну двойную Y-образную структуру в V3' UTR, а в С3'UTR расположена существенно модифицированная структура 3'LSH, чего не наблюдается у других рассмотренных штаммов.

При экспериментальной адаптации штамма С11-13 ВКЭ сибирского генотипа, выделенного из мозга погибшего человека, к клеткам почек эмбриона свиньи, человека и нейронам мышцы обнаружено увеличение длины V3' UTR вирусной РНК на 37 нуклеотидов. Увеличение размеров 3' UTR приводит к видоизменению Y-3 структуры в районе LRS 4, что позволяет предположить существование возможности увеличения длины V3' UTR ВКЭ.

Наличие выраженных делеций в 3'UTR дают основание высказать гипотезу о существовании механизма «редактирования» 3'UTR ВКЭ, который принципиально важен для обеспечения эффективной репликации ВКЭ в клетках различных хозяев.

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

Использование индикатрисы светорассеяния в заднюю полусферу для улучшения точности характеристики микрочастиц

И. А. Долгих

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

Метод проточной цитометрии нашел широкое применение в области биологических исследований, связанных с клетками крови. Благодаря высокой чувствительности, скорости измерений и статистической достоверности с помощью сигналов светорассеяния и флуоресценции можно получить необходимые характеристики клетки, связанные с ее морфологией, формой, размером и показателем преломления. Однако обычные коммерческие цитометры позволяют получать ограниченное количество информации: два сигнала светорассеяния (рассеяние вперед и вбок) и несколько сигналов флуоресценции. Данной информации хватает лишь для грубой оценки размеров и показателей преломления частиц, но не для исследования морфологии и получения кинетики клеток крови, например, агрегации тромбоцитов.

Метод сканирующей проточной цитометрии ввиду своей конструкции позволяет получать сигнал светорассеяния в диапазоне полярных углов $5-85^\circ$. Данный метод позволил сильно расширить возможности характеристики клетки и изучения кинетики клеток, однако некоторые проблемы, связанные, в частности, с кинетикой агрегации тромбоцитов, все еще остаются не разрешенными. Математическое моделирование показало, что для точного изучения кинетики агрегации тромбоцитов необходимо получение сигнала светорассеяния в диапазоне углов $95-175^\circ$.

Конструкция сканирующего проточного цитометра была доработана, и появилась возможность измерять сигнал светорассеяния как в переднюю полусферу (углы $5-85^\circ$), так и в заднюю полусферу (углы $95-175^\circ$). Также были проведены эксперименты с использованием полистирольных микросфер диаметром $d = 4$ мкм. Результаты экспериментов показали, что при одновременном получении сигналов светорассеяния в переднюю и заднюю полусферу точность определения размеров и показателя преломления микросфер увеличивается.

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

**Использование проточной цитометрии и метода ICS
для анализа продукции цитокинов лимфоцитами мышей,
иммунизированных ДНК-вакциной против вируса Эбола**

С. Г. Дудко

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

Несмотря на многочисленные успехи последних лет в профилактике инфекционных заболеваний, до сих пор некоторые вирусные патогены (в частности вирус Эбола) остаются не восприимчивыми к созданным на сегодняшний день вакцинам. Следовательно, актуальным является использование новых принципов, в частности ДНК-вакцин, для борьбы с данными вирусами.

Одним из перспективных подходов является конструирование искусственных полиэпитопных иммуногенов, которые представляют собой набор эпитопов собранных в единую структуру. Ранее во ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» с помощью оригинального программного обеспечения TEpredict и PolyCTLDesigner были созданы рекомбинантные плазмиды pEV.CTL и pEV.Th, кодирующие искусственные поли-CTL- и поли-Th-эпитопный T-клеточные иммуногены.

Для оценки иммуногенности сконструированных ДНК-вакцин использовались мышьяная инбредная линия BALB/c. 15 мышей (самки) были разбиты на три группы по пять мышей в каждой в зависимости от варианта вакцинации (pE-CTL; pE-CTL+pE-Th) и отрицательного контроля. У экспериментальных животных забирали селезенки с последующим выделением спленоцитов.

Иммунный ответ оценивался по числу спленоцитов, продуцирующих IFN- γ и IL-2 с помощью метода внутриклеточного окрашивания цитокинов (ICS). Стимуляцию клеток проводили смесью пептидов (20 мкг/мл каждого пептида), входящих в состав целевых антигенов. Измерения проводились на проточном цитометре BD FACSCalibur.

Результаты эксперимента свидетельствуют о статистически значимом специфическом иммунном ответе на разработанные ДНК-вакцины.

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

**Самоограниченные комплексы олигонуклеотидов —
элементы перспективных искусственных рибонуклеаз**

В. А. Кизилова, В. М. Голышев
Новосибирский государственный университет

Олигонуклеотиды и их производные все чаще применяются для разнообразных исследований во многих областях медицины и биологии. На текущий момент предложено несколько стратегий для воздействия на живые системы за счет изменения эффективности различных молекулярно-биологических процессов под воздействием олигонуклеотидов. Тем не менее роль вторичных и третичных структур олигомеров в этих процессах во многом не изучена.

Нами был обнаружен новый тип структур нуклеиновых кислот, которые образованы четным числом олигонуклеотидов и формируют замкнутые циклические структуры — самоограниченные комплексы. Было предположено, что они могут быть использованы в качестве элементов биологически активных соединений — искусственных рибонуклеаз, способных эффективно расщеплять фосфодиэфирные связи одноцепочечных РНК. Для проверки данного предположения мы исследовали кинетику гидролиза олигорибонуклеотидов в структуре самоограниченного комплекса в растворе 2 М имидазола. Было показано увеличение скорости расщепления РНК одноцепочечного участка в структуре комплекса в сравнении с одноцепочечным олигонуклеотидом. При этом установлено, что расщепление в РНК в составе самоограниченного комплекса проходит стерически-специфично в участке выпетливания.

Для оптимизации структуры самоограниченного комплекса исследовано влияние параметров элементов структуры на эффективность его образования. Методами задержки в геле, атомно-силовой микроскопии и с использованием расчетов методами молекулярной динамики установлено, что эффективность формирования самоограниченных комплексов зависит от природы и размера линкеров, соединяющих дуплексные фрагменты, а также от числа витков двойной спирали. Кроме того, установлена достаточно высокая конформационная подвижность одноцепочечных линкеров в структуре самоограниченного комплекса.

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

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

Применение импульсного электронного пучка для контроля скорости деградации полимерных скаффолдов

И. М. Колесник, В. Л. Кудрявцева
Томский политехнический университет

Материалы на основе биodeградируемых полимеров широко используются для изготовления скаффолдов, применяемых в восстановительной и реконструктивной медицине. Для эффективного замещения тканей необходимо, чтобы скорость деградации коррелировала со скоростью образования новой ткани. В решении данной проблемы используются как физические, так и химические методы модифицирования поверхностей полимерных скаффолдов. Одним из перспективных способов модифицирования является применение импульсного электронного пучка.

Облучение биodeградируемых скаффолдов из поли-L-молочной кислоты (ПЛЛА), полученных методом электроспиннинга, проводилось на импульсном электронном ускорителе ТЭУ-500 в диапазоне поглощенной дозы от 25 до 150 кГр. Исследование образцов осуществлялось методами гель-проникающей хроматографии, дифференциальной сканирующей калориметрии, сканирующей электронной микроскопии. Также проводились исследования механических свойств на разрыв.

В результате исследования было показано, что воздействие импульсного электронного пучка на полимерные скаффолды существенно меняет молекулярную массу ПЛЛА, морфологию поверхности, структуру волокон и механические свойства. При поглощенной дозе, равной 25 кГр, наблюдается существенное снижение молекулярной массы, вызванное разрушением макромолекулярных цепей по карбоксильной связи. Морфология поверхности поддается существенным изменениям при дозе больше 50 кГр, в результате чего наблюдаются разрывы волокон. При увеличении поглощенной дозы наблюдается снижение температуры плавления ПЛЛА, что указывает на изменение их кристаллической структуры. Кроме того, с увеличением поглощенной дозы наблюдается уменьшение предела прочности, а также относительного удлинения.

Из результатов следует, что применение импульсного электронного пучка существенно меняет свойства ПЛЛА скаффолдов, что может быть использовано для производства биodeградируемых скаффолдов с контролируемой скоростью деградации *in vitro*.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент С. И. Твердохлебов

Расчетное определение характеристик пучка излучений на установке для нейтронозахватной терапии реактора ИРТ-Т

П. А. Молодов, М. Н. Аникин
Томский политехнический университет

Бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ) — бинарная форма радиотерапии, разработанная для избирательного воздействия тяжелых ионизирующих частиц с высокой линейной передачей энергии на клеточные структуры опухоли [1].

Актуальность внедрения методики БНЗТ в клиническую практику обусловлена возможностью селективного поражения раковых клеток при минимальной радиационной и химической травматичности организма пациента. БНЗТ является перспективным подходом в лечении ряда злокачественных новообразований: трудноизлечимых опухолей головного мозга, метастаз меланомы и других новообразований, резистентных к существующим методам лучевой терапии. Основные направления развития метода БНЗТ касаются создания компактных специализированных источников нейтронов, методов определения концентрации бора в тканях в реальном масштабе времени и разработки новых селективных боросодержащих препаратов нового поколения [2]. Для экспериментальных исследований по указанным направлениям на реакторе ИРТ-Т проводится реконструкция экспериментального объема горизонтального канала ГЭК-1 для создания установки по облучению биологических образцов.

Разработка оптимальной с точки зрения требований НЗТ конструкции экспериментального канала ГЭК-1 проводилось на основе многовариантных расчетов методом Монте-Карло в программе MCU-PTR, в которой рассчитывались характеристики полей нейтронов и вторичных фотонов в полномасштабной трехмерной модели реактора, включающей подробную проработку канала ГЭК-1. Оптимизация конфигурации и материального состава внутриканальных устройств осуществлялась по критериям качества выводимого пучка как в воздухе, так и в тканеэквивалентном и водном фантомах.

1. Current status of neutron capture therapy: IAEA-TECDOC-1223 // Technical reports series. International Atomic Energy Agency. Vienna, 2001.

2. *Таскаев С. Ю., Каныгин В. В.* Бор-нейтронозахватная терапия. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2016. 216 с.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент А. Г. Наймушин

Метод измерения объема неокрашенного биологического объекта на флуоресцентном микроскопе

П. П. Никифоров

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

Исследование работы клеточных транспортеров является актуальным вопросом физиологии клетки. Флуоресцентная микроскопия позволяет оценивать работу клеточных транспортеров в том числе по изменению клеточного объема. Современные методы сканирующей лазерной конфокальной микроскопии обладают высоким разрешением, но стоимость оборудования высока, а скорость сканирования может быть недостаточной. При использовании флуоресцентных красителей можно выделить два подхода к окрашиванию: использование специфических флуоресцентных зондов и негативный подход, при котором краситель присутствует во внешней среде, но не проникает в исследуемый объект. Негативное окрашивание не требует специфических красителей, а краситель не вмешивается в метаболизм исследуемого объекта.

Проводилась разработка метода исследования изменения объема неокрашенного объекта во флуоресцирующей среде. В основе метода лежит измерение флуоресценции внешней среды, в которой присутствует прозрачный объем. Увеличение объема объекта уменьшает флуоресценцию в сканируемом конфокальном объеме.

Разрешение метода оценивали по минимальному изменению объема объекта, которое можно достоверно зарегистрировать. Интеграл светимости получали вертикальным сканированием объекта. Измерения проводили на монослое клеточной культуры. При разработке метода проводили измерения интеграла светимости на гомогенном источнике флуоресценции, на объекте малого объема и на гомогенном источнике в присутствии неокрашенного клеточного монослоя.

Метод позволил достоверно зарегистрировать уменьшение объема культуры клеток ZL34 на 20 %, что составляет 1 μm при гипертоническом шоке. Это дает основания полагать, что предложенный метод возможно применять для исследования изменений объема на клеточных культурах.

Научный руководитель — д-р биол. наук, доцент Е. И. Соленов

Определение числа рецепторов CD14 на поверхности лейкоцитарных клеток без использования калибровочных частиц с помощью метода проточной цитометрии

Д. С. Патлай

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

Организм человека содержит в себе множество разнообразных клеток. Для различных популяций клеток характерны строго определенные наборы рецепторов. Известно, что изменение числа рецепторов может служить признаком развития различных заболеваний, в том числе вирусного, бактериального или аутоиммунного характера. Поэтому задача определения числа рецепторов играет важную роль для медицины и иммунологии.

Стандартные методы определения числа рецепторов на поверхности клеток основаны на методе проточной цитометрии с использованием калибровочных микрочастиц для калибровки канала флуоресценции. Однако данный подход имеет ряд недостатков. Один из главных недостатков заключается в отсутствии единой стандартизации, что приводит к значительному различию в результатах при использовании калибровочных частиц различных производителей.

В данной работе был разработан и представлен бескалибровочный метод определения числа рецепторов на поверхности клеток, в основе которого лежит метод проточной цитометрии. В данном методе учитываются временная задержка перед началом измерения и время самого измерения. Для определения числа клеточных рецепторов данный метод позволяет проводить анализ средней интенсивности флуоресценции всех измеренных клеток и далее пересчитывать значения для интересующих нас популяций. Также было исследовано поведение математической модели лиганд-рецепторного взаимодействия при условии сравнимых концентраций антител и рецепторов и показано, что в таком случае возможно получить требуемые значения из одной кинетики, даже при неизвестных константах скорости реакций.

Представленный метод был применен для исследования лиганд-рецепторного взаимодействия IgG антител с рецепторами CD14 на мононуклеарных клетках. Были проведены оценки прямой и обратной констант скоростей реакций и посчитано число рецепторов как для основных популяций клеток (моноцитов и гранулоцитов), так и для минорных субпопуляций моноцитов (CD14low и CD14high).

Научный руководитель — И. В. Хало

**Разработка методики генерации наночастиц изониазида
и их анализа в плазме и легких мышей**

М. Е. Плохотниченко

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

Современные терапевтические методы лечения различных заболеваний все шире используют аэрозольные средства доставки лекарственных средств в легкие пациента. Основными преимуществами ингаляционной доставки являются быстрота достижения лекарственного эффекта, легкость введения. Помимо этого, аэрозольная доставка не имеет ограничений, связанных с использованием водонерастворимых лекарственных средств в отличие от инъекционной терапии.

Оптимальным местом доставки системных лекарств через дыхательную систему является альвеолярный отдел легких. Эффективность доставки аэрозольных частиц в альвеолярный отдел легких является функцией размера частиц. Наибольшую эффективность осаждения имеют частицы диаметром 10–20 нм.

Термоконденсационный метод позволяет получить аэрозоль возгонкой исходной субстанции в размерном диапазоне от 5 нм до 10 мкм с концентрацией до 10^8 см⁻³. Такая высокая концентрация позволяет за разумное время доставить в организм пациента достаточную дозу для достижения желаемого биологического эффекта.

Целью данной работы была разработка методов получения наночастиц изониазида и его анализа в крови и легких мышей методом ВЭЖХ.

В результате работы отработаны условия синтеза этого наноаэрозоля при высокой стабильной концентрации и оптимальном размере. Разработана методика пробоподготовки плазмы и легких мышей, подобраны оптимальные условия для хроматографического анализа изониазида в плазме крови и легких мышей. Были проведены предварительные исследования распределения данного вещества в дыхательных путях лабораторных животных и его содержания в плазме крови и легких мышей после ингаляционного введения.

Научный руководитель — канд. хим. наук С. Н. Дубцов

Повышение эффективности доксорубицина за счет электропорации клеток импульсно-периодическим микроволновым излучением

Е. А. Просекина

Томский государственный университет

Известно, что наиболее сильный эффект на биологические объекты оказывает импульсно-периодическое излучение по сравнению с неимпульсным воздействием этого же вида излучения. В ряде работ показано, что воздействие высокоамплитудными электрическими импульсами способно значительно увеличивать проницаемость мембран клеток за счет образования в них пор (электропорация).

В этом плане становится важным изучение возможности формирования электропор в мембранах опухолевых клеток неинвазивным методом с помощью микроволновых наносекундных импульсов для эффективной доставки химиопрепарата в клетку, а также влияния на нормальные клетки.

В качестве модельного объекта использовалась клеточная линия *HeLa* и *CHO-K1*. Оценку пролиферативной активности и выживаемости клеток проводили с помощью МТТ-теста и метода колоний. В качестве химиопрепарата, использовали доксорубин в концентрациях: 0,5, 1,0 и 2,5 мкМ.

Клетки подвергались воздействию импульсно-периодического микроволнового излучения (ИПМИ) с несущей частотой 10 ГГц, длительностью импульсов 70 нс, частотой повторения импульсов 10, 13, 16 Гц и пиковой плотностью потока мощности (пППМ) 1500 Вт/см². Группа контроля подвергалась всем тем же процедурам за исключением фактора облучения.

Было установлено, что через 24 часа после воздействия ИПМИ с частотами повторения 13 и 16 Гц на опухолевые клетки, которые находятся в среде с доксорубицином, ингибирование клеточной пролиферации увеличивается на 30 и 40 % соответственно. Однако, через семь суток после облучения эффект усиления доксорубицина исчезает. Это может свидетельствовать о возможном запуске репарации клеточных мембран, активном выведении доксорубицина из клетки и ингибировании процессов апоптоза. Пролиферативная активность нормальных клеток после облучения ИПМИ не менялась.

Научный руководитель — канд. биол. наук М. А. Булдаков

Спектральный метод оценки несферичности частицы с использованием сканирующего проточного цитометра

А. В. Романов

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

Измерение разрешенного по углу светорассеяния (индикатрис) одиночных частиц является перспективным способом их характеристики. Однако большинство практических методов основаны на знании формы модели частиц, применяемость которой может быть сомнительной в реальных приложениях. Хотя некоторые методы устойчивы к малым отклонениям от идеальной модели, трудно контролировать малость этого отклонения и, следовательно, получаемую погрешность в определяемых характеристиках частиц. Простейший случай — отклонение морфологии от однородного шара. В то время как применение нелинейной регрессии к экспериментальной индикатрисе может обеспечить оценку несферичности, она является статистически строгой, только если рассматривается альтернативная модель формы (например, сфероид).

Принципиально важно обнаруживать и даже характеризовать несферичность непосредственно из индикатрисы. Мы подходим к решению этой проблемы с помощью преобразования Фурье. Ранее мы разработали спектральный метод определения размера и показателя преломления однородных сферических частиц через амплитудный спектр, который устойчив к искажениям малой формы, что хорошо для характеристики, но плохо для обнаружения несферичности. Поэтому в данной работе мы дополнительно рассмотрели фазовый спектр.

Для оценки сферичности отдельных частиц, измеренных с помощью сканирующего проточного цитометра, наряду с параметрами амплитудного спектра мы ввели два параметра фазового спектра — значение фазы в спектральном пике и комплексный интеграл от разницы основных пиков экспериментальной индикатрисы, вычисленной для шара с параметрами, полученными спектральным методом. В рамках приближения Релея-Ганса-Дебая мы получили формулы, связывающие первый параметр с отношением полуосей сфероида. Обобщая этот подход к теории Ми, мы обнаружили зависимость от показателя преломления, которую компенсировали, используя второй параметр. С другой стороны, фазу можно также использовать для определения показателя преломления шаров с лучшей точностью.

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

**Белки хрусталика глаза: устойчивость к агрегации,
индуцированной УФ-А излучением**

С. А. Сеницын

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

В хрусталике глаза отсутствуют механизмы обновления белков, что приводит к многочисленным модификациям на протяжении жизни индивида. Некоторые из них могут приводить к агрегации и потере водорастворимости, что способствует развитию катаракты. Исследования показали, что УФ-излучение солнца, в частности диапазон УФ-А (315–400 нм), является одним из важнейших факторов модификации белков. Механизмы этих процессов заключаются в реакции фотовозбужденных состояний хромофоров хрусталика с остатками аминокислот, образуя радикалы, что приводит к ковалентной сшивке и последующей агрегации белков. Однако детальные механизмы реакций, приводящих к модификации белков, остаются недостаточно исследованными.

В данной работе была исследована устойчивость трех основных семейств хрусталика, которые различаются по своей способности образовывать мультимерные комплексы в водных растворах (не связанные ковалентными связями): альфа- (30–50 мономеров), бета- (2, 4, 8 мономеров) и гамма-кристаллины (только мономерные формы), к фотоиндуцированной агрегации. Обладая различной структурой и аминокислотным составом, белки разных семейств могут в разной степени образовывать ковалентно связанные олигомеры.

Кристаллины животного происхождения были подвергнуты анаэробному УФ-А фотолизу в присутствии одного из хромофоров хрусталика человека — кинуреновой кислоты. Проведенный анализ фотоиндуцированной агрегации белков показал, что белки всех семейств кристаллинов образуют димеры, тримеры и прочие олигомерные формы. Устойчивость к фотоиндуцированной агрегации возрастает в следующем ряду: гамма-, бета- и альфа-кристаллины. На основании этих данных можно предположить, что образование мультимерных комплексов белков направляет фотоиндуцированные радикальные реакции по пути модификации мономерных форм, нежели способствует образованию ковалентных сшивок между белками. Таким образом, плотная упаковка белков в хрусталике может рассматриваться в качестве защитного механизма, препятствующего широкой агрегации белков внутри ткани.

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

Исследование динамики морфологических изменений ядра клетки при апоптозе методом сканирующей конфокальной микроскопии

К. В. Трусов

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

Апоптоз — процесс гибели клеток, характеризующийся уменьшением объема клетки, конденсацией хроматина в ядре, формированием апоптотических телец и дальнейшей фрагментацией клетки. В отличие от некроза, также являющегося типом гибели клеток, при апоптозе не происходит выброс вызывающих воспаление токсинов в межклеточное пространство, а происходит «разбор» проблемной (например, раковой) клетки по определенной программе. Апоптоз клетки может быть инициирован различными факторами окружающей среды. Понимание физических принципов, лежащих в основе апоптоза, может внести значительный вклад в исследование онкологических, иммунодефицитных и аутоимунных заболеваний.

Кинетика морфологических изменений ядра клетки плохо изучена. Для ее анализа были исследованы живые клетки HepG2, экспрессирующие H4-Dendra2 как удобную флуоресцентную метку хроматина методом сканирующей конфокальной микроскопии. Апоптоз клеток инициировался этопозицидом (препарат, используемый для химиотерапии рака). По результатам обработки серий изображений конфокального микроскопа (Leica TCS SP5X) были определены динамика изменения объема ядра, конденсированного хроматина в ядре, а также площади поверхности ядра клетки. Для этого был разработан алгоритм обработки, позволяющий получить мгновенные серии изображений из времязрешенных измерений. Полученные экспериментальные результаты можно объяснить предложенными осмотической и кинетической моделями.

Таким образом, исследована динамика морфологических изменений ядра при апоптозе и предложена описывающая ее модель.

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

Исследование эффективности ДНК-вакцины против вируса гриппа с использованием цитофлуориметрии методом внутриклеточного окрашивания цитокинов

С. А. Федотова

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

Грипп — одно из самых распространенных вирусных заболеваний, приводящее к смерти до 650 тысяч человек ежегодно (согласно данным ВОЗ). Вирус гриппа является высокоизменчивым, из-за чего возникают трудности при создании универсальной вакцины против него. Одним из вариантов решения данной проблемы является разработка полиэпитопных ДНК-вакцин, содержащих консервативные эпитопы вируса гриппа. Ранее в ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» были созданы полиэпитопные конструкции, входящие в состав ДНК-вакцины. Проектирование вакцинных конструкций было проведено с использованием двух искусственных антигенов AgH1 и AgH3, сконструированных на основе консервативных фрагментов стебля гемагглютинина субтипов вируса гриппа H1N1 и H3N2, а также на основе консервативного вирусного белка M2 (AgM2).

Цель данной работы — оценка эффективности ДНК-вакцин против гриппа (p-AgH1, p-AgH3 и p-AgM2). Для оценки иммуногенности применялось внутриклеточное окрашивание цитокинов, с последующей их детекцией на проточном цитофлуориметре. В модельной ситуации (использование митогена) были подобраны оптимальные условия эксперимента. Мыши линии BALB/c трехкратно иммунизировались с интервалом в 2 недели (100 мкг/мышь). Затем у мышей выделяли спленоциты, которые стимулировали специфическими пептидами (Т-клеточными эпитопами, входящими в состав конструкций), и иммунный ответ оценивали по выбросу лимфоцитами цитокинов. Ответ был измерен на проточном цитофлуориметре BD FACSCalibur с использованием методики внутриклеточного окрашивания цитокинов.

Было продемонстрировано, что ДНК-вакцинные конструкции p-AgH1, p-AgH3 и p-AgM2 вызывают вирус-специфический Т-клеточный ответ у иммунизированных животных.

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

Исследование искусственных материалов для создания транскатетерных сердечно-сосудистых имплантов

А. Е. Чирятьева

Национальный медицинский исследовательский центр
им. ак. Е. Н. Мешалкина, г. Новосибирск,
Новосибирский государственный университет

По данным Всемирной организации здравоохранения заболевания сердца и сосудов занимают лидирующую позицию среди причин смертности во всем мире. Одна из наиболее распространенных патологий — врожденный или приобретенный порок сердца. Дисфункция клапанов приводит к нарушениям работы сердца. Кроме медикаментов лечение может включать в себя хирургическую замену клапана. В настоящее время биологические протезы клапанов сердца делают из ксенографта — свиного либо бычьего перикарда. Он обеспечивает необходимые физические свойства и биосовместимость. Однако биопротезы клапанов не обладают достаточной долговечностью. Кальцификация створок приводит к стенозу клапана (уменьшению просвета) и регургитации (обратному току крови). В связи с этим пациенты младшего возраста нуждаются в повторной операции при снижении эффективности работы имеющегося протеза.

Искусственные клапаны сердца могут обеспечить большую долговечность. Современные полимерные материалы отвечают требованиям к толщине и эластичности. Кроме того, использование гибких створок позволяет избежать хирургического вмешательства на открытом сердце и снизить травматичность операции, проводя малоинвазивные транскатетерные замены клапанов (*trans catheter valve replacement, TVR*).

Полимерная индустрия производит материалы с различными характеристиками. Чтобы сконструировать клапан, аналогичный натуральному, нам необходимо определить существенные параметры — модуль упругости, прочность, изотропность, микроструктуру. В рамках данной работы изучались образцы политетрафторэтилена (*expanded polytetrafluoroethylene, ePTFE*) — полимерного материала, используемого в мировой кардиохирургической практике, в сравнении с биологическим материалом.

Было проведено исследование образцов перикарда и *ePTFE* различных производителей. Получены зависимости напряжения в образцах от относительного удлинения. Вычислены принципиальные характеристики, получены микроскопические изображения структуры материала.

Научный руководитель — А. А. Прохорихин

Исследование взаимодействия наночастиц золота с дезоксирибонуклеозидмонофосфатами методом спектrophотометрии

А. С. Шторк

Новосибирский государственный университет

В настоящее время наночастицы золота (НЧЗ) нашли широкое применение в биомедицинских исследованиях. Преимуществом НЧЗ являются их резонансные оптические свойства, способность связываться с белками и нуклеиновыми кислотами, постоянство диаметра, а также коллоидная стабильность. Показано, что НЧЗ могут доставлять внутрь клетки нековалентно связанные олигонуклеотиды, которые в свою очередь способны вызывать различные клеточные ответы. Вместе с тем механизмы взаимодействия нуклеиновых кислот с наночастицами золота изучены недостаточно.

Целью работы является исследование взаимодействия наночастиц золота с 2'-дезоксиаденозин-(pdA), 2'-дезоксцитидин-(pdC), 2'-дезоксигуанозин-(pdG) и 2'-дезокситимидин-(pdT) 5'-монофосфатами. Методом оптической спектrophотометрии исследовано связывание нуклеотидов в различных концентрациях с НЧЗ. Для исследований использовали наночастицы золота, диаметр которых (20 нм) был определен методом фотокорреляционной спектроскопии. Используя методы Ленгмюра и Скэтчарда, мы определили константы взаимодействия и количество отдельных мононуклеотидов, связавшихся с наночастицами золота при насыщении. Метод Скэтчарда показал существование двух мод связывания нуклеотидов, предположительно вертикальной и горизонтальной, и позволил рассчитать константы взаимодействия и число мононуклеотидов, приходящихся на одну наночастицу золота для обеих мод. Для установления характера взаимодействия нуклеотидов на поверхности НЧЗ проведено исследование конкурного связывания смеси нуклеотидов pdC и pdG и сопоставлены результаты определения параметров взаимодействия при некооперативном и кооперативном характере адсорбции.

Полученные результаты позволяют лучше понимать механизмы взаимодействия нуклеиновых кислот с наночастицами золота и осуществлять направленный дизайн их комплексов, обладающих заданными свойствами.

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

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

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 676.011

Влияние замораживания целлюлозных волокон на бумагообразующие свойства целлюлозы

В. С. Антонова

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

Проведено исследование низкотемпературной обработки целлюлозы для восстановления ее бумагообразующих свойств.

Объектом исследования служила сульфатная белая целлюлоза. Замораживание проводилось в сосуде Дьюара, заполненном охлаждающим агентом. В сосуд Дьюара помещали запаянный в герметичную емкость образец целлюлозы с известным равновесным влагосодержанием. По истечении заданного времени целлюлозу извлекали и после оттаивания исследовали ее физико-химические и физико-механические свойства. В качестве методов исследования были использованы: калориметрический метод определения интегральной теплоты взаимодействия модифицированной целлюлозы с водой при 298 К на калориметре типа Кальве С80 (Setaram), относительная погрешность измерений — 1 %.

Снятие изотерм десорбции проводилось статическим методом в широкой области относительных давлений паров воды (p/p_0). С целью сохранения структуры целлюлозы после замораживания обезвоживание образцов для калориметрических измерений выполняли методом инклюдирования, т. е. замены растворителя (воды) сменой растворителей ацетон — этанол — н-гексан. Для других исследований (степень полимеризации (СП), растворимость, десорбция паров воды) образцы после замораживания-оттаивания дополнительной обработке не подвергали. СП определяли по вязкости растворов целлюлозы в железовиннонатриевом комплексе при температуре 298 К на вискозиметре Уббелоде, относительная погрешность — 5 %. Растворимость целлюлозы, десорбцию паров воды, физико-механические испытания для определения прочности опытных отливок применялись по общепринятым методикам.

С позиций термодинамического метода установлена влияние условий низкотемпературной обработки целлюлозных волокон (времени, температуры, влажности) на гидрофильность, сорбционную и связеобразующую способности. Результаты физико-механических испытаний показали увеличение прочности бумаги на 40 % при высокоскоростном замораживании при 77 К и на 30 % при 195 К при оптимальных условиях времени и влажности низкотемпературной обработки целлюлозы.

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

Возможные причины самоупрочнения стали 20ГЛ

В. В. Анфилофьев, С. С. Герт
Восточно-Казахстанский государственный университет
им. С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

В данной работе рассматривается возможность поглощения ультразвука сталью 20ГЛ и преобразование полученной энергии для перестройки структуры за счет смещения атомов. При испытании образцов ультразвуком был обнаружен аномальный спад скорости ультразвука в образце.

При исследовании рентгенограммы образца стали 20ГЛ обнаружено, что появились рефлексы Mn, которые ведут себя неодинаково на разных дифракционных спектрах одного и того же образца.

Мы считаем, что поглощение ультразвука, не зависящее от размера зерна, связано со структурным изменением компонентного и фазового состава марганцовистой стали, произошедшего под действием волн пластической деформации.

Задача работы — выявить природу поглощения ультразвуковых волн в образцах стали 20ГЛ, не связанную с размером зерен.

Использовали различные методы исследования пластически деформированных образцов с целью обнаружения зависимости поглощения звуковых волн от свойств и структуры стали 20ГЛ, а также чтобы показать, что полученной при пластической деформации энергии хватает для прохождения низкотемпературной термоядерной реакции $Fe_{57} = Mn_{55} + 2n$.

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

Исследование эффектов обработки интенсивной пластической деформацией сплавов системы Al-Mg

Л. Р. Ахметшин, А. Г. Кушнарев, Е. Н. Москвичев
Томский государственный университет

Представлены результаты исследований влияния интенсивной пластической деформации (ИПД) на микроструктуру и физико-механические свойства крупнокристаллического алюминиевого сплава 1560. Обработка ИПД реализована по двум схемам: равноканальное угловое прессование (РКУП) и прессование рифлением (ПР).

Методом РКУП обрабатывались призматические заготовки, изготовленные из горячекатаного прутка сплава 1560 [1]. ПР проводили на плоских заготовках из листового проката того же сплава [2].

После обработки четырьмя проходами РКУП формируется однородная зеренная структура со средними размерами 3 мкм. После четырех циклов ПР в исследуемом сплаве получена бимодальная зеренная структура, состоящая из вытянутых крупных зерен размерами от 2,5 до 10 мкм и скоплений вокруг них зерен микронных и субмикронных размеров до 2,5 мкм.

Выявлен значительный вклад ИПД в изменение физико-механических свойств исследуемого сплава обоими методами прессования. После четырехпроходной обработки сплава РКУП микротвердость возросла в ~1,5 раза, условный предел текучести при одноосном растяжении увеличился в ~1,8 раз, предел прочности — в ~1,4 раза по сравнению с соответствующими значениями параметров в состоянии поставки. После четырех циклов обработки ПР установлено, что величина микротвердости возрастает в ~2,7 раза, условный предел текучести и временное сопротивление разрушению возрастают в ~1,4 и ~1,5 раз соответственно. Эффекты упрочнения исследуемого сплава после обработки в обоих случаях сопровождаются уменьшением предельных деформаций.

1. Москвичев Е. Н., Скрипняк В. А., Лычагин Д. В. и др. Влияние структуры на сопротивление пластической деформации алюминиевого сплава 1560 после обработки методом прессования рифлением // Письма о материалах. 2016. Т. 6. № 2 (22). С. 141–145.

2. Козулин А. А., Красновейкин В. А., Скрипняк В. В. и др. Механические свойства алюминий магниевых сплавов после интенсивной пластической деформации // Современные проблемы науки и образования. 2013. № 6. С. 888.

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

Физико-химическое исследование модифицированных углеродных материалов для очистки воздуха от сероводорода

И. Е. Барковский

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

Очистка воздуха от токсичного сероводорода является актуальной задачей для объектов канализационной сети, таких как канализационные насосные станции. Сероводород является одним из основных продуктов микробиологического разложения загрязнений сточных вод, поэтому он присутствует в высокой концентрации в составе газовых выбросов, удаляемых путем вентиляции.

В данной работе был произведен синтез сорбентов для сорбции сероводорода на основе активированных углей (БАУ-А, АГ-3, АГМ, HongChang), промотированных различными соединениями, в том числе NaOH и CuSO₄. Для тестирования динамической емкости активированных углей по H₂S использовали экспресс-методику, моделирующую условия очистки газов на КНС в проточном реакторе: время контакта — 0,7 с, концентрация H₂S — 1 об. %, температура — комнатная. Для более полной характеристики образцов в работе использовали ряд физико-химических методов (РФА, РФЭС, азотная порометрия, элементный анализ и др.).

Измерения сорбционной емкости полученных сорбентов показали, что перспективными сорбентами являются материалы NaOH/АГМ и CuSO₄/АГМ. Значения их сорбционной емкости при проскоке в 50 ppm составляют 15 масс. % и 5 масс. % соответственно. Методом РФЭС показано, что после насыщения H₂S в порах материалов присутствует полимерная сера, что говорит о протекании в порах каталитической окислительно-восстановительной реакции.

Из анализа результатов исследования активированных углей ясно, что для высокой эффективности сорбции необходима высокая площадь поверхности угля (~900 м²/г) и объем пор ~0,5 см³/г. Также для NaOH/АГМ обнаружена корреляция сорбционной емкости и температуры сушки. Для материала, высушенного на воздухе при 60 °С, емкость составляет 8 масс. %, а после увеличения температуры сушки до 200 °С — 26 масс. %. При этом по результатам анализа материалов после насыщения H₂S методом РФЭС поверхностная концентрация полимерной серы также заметно выше во втором образце. Можно предположить, что термообработка при более высокой температуре приводит к образованию на поверхности углеродного материала каталитически активных центров, участвующих в реакции окисления сероводорода кислородом воздуха.

Научный руководитель работы — канд. хим. наук Ж. В. Веселовская

Влияние индиевого катализатора на низкотемпературный синтез нанопроволок оксида кремния

А. В. Барсуков

Новосибирский государственный университет

В настоящее время человечество столкнулось с проблемой исчерпаемости традиционных источников энергии. Поэтому развитие альтернативных источников энергии становится актуальной задачей. Солнечная энергия считается наиболее привлекательной. Основным материалом для создания солнечных элементов (СЭ) является кремний, который имеет ряд фундаментальных преимуществ: широкую распространенность, экологическую безопасность, а также высокий уровень развития технологий современной электроники на основе кремниевой элементной базы. Проблема повышения эффективности СЭ заставляет искать новые подходы. В частности, для их создания стали использовать нанопроволоки разных материалов.

Данная работа посвящена изучению эволюции индиевого катализатора и зависимости морфологии синтезированных нанопроволок от размера исходных частиц катализатора. Тонкие пленки индиевого катализатора наносились методом термовакuumного напыления на подложки из кристаллического кремния. Процесс синтеза можно разделить на три этапа: нагрев до рабочей температуры, обработка катализатора водородной плазмой, непосредственно синтез нанопроволок. Изображения частиц катализатора получали с помощью сканирующего электронного микроскопа после каждого этапа синтеза. По этим изображениям определялись основные характеристики частиц катализатора на каждом этапе синтеза: средний размер катализатора, плотность и форма частиц.

После этого были синтезированы нанопроволоки оксида кремния на подложках кристаллического кремния с индиевым катализатором (толщина пленки 15, 30, 40 нм). Для изучения морфологии этих нанопроволок были получены SEM-изображения, состав измерялся с помощью FTIR и EDS. Обработка SEM-изображений показала, что эволюция индиевого катализатора при температуре 200 °С заметно отличается от эволюции при 335°С [1].

1. *Baranov E., Barsukov A., Khmel E. et al.* Indium-Assisted Plasma-Enhanced Low-Temperature Growth of Silicon Oxide Nanowires // *Physica status solidi*. 2018. DOI: 10.1002/pssa.201700749.

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

Влияние параметров детектируемой среды на эффективность выявления нуклеиновых кислот биосенсором на основе полевого транзистора со структурой «кремний на изоляторе»

А. А. Бердюгин

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

Развитие области биосенсоров привело к созданию большого количества различных типов устройств для обнаружения биомолекул. Перспективным типом биосенсоров являются электрохимические биосенсоры и, в частности, микропроволочные сенсоры на основе транзисторов, полученных с использованием технологии «кремний на изоляторе» (КНИ-транзисторы). Такие сенсоры не требуют введения дополнительных меток, они высокочувствительны, для измерения ими используется малый объем образца. Однако, чтобы детектировать биомолекулы, необходимо определить параметры среды для наилучшего отклика системы.

В данной работе были исследованы величины тока через микропроволочку при изменении управляющего напряжения в зависимости от ионной силы и диэлектрической проницаемости раствора, заряда на поверхности транзистора. Рассмотрен широкий диапазон величин ионной силы раствора (10^{-2} –1 М NaCl) и диэлектрической проницаемости раствора (2–111). Заряд поверхности изменяли путем ковалентного присоединения различных групп к поверхности сенсорного элемента. Эксперименты проводили на двух типах транзисторов длиной 10 мкм и шириной 3 мкм или 200 нм.

Полученные данные позволяют проводить подбор условий для получения оптимального сигнала детекции нуклеиновых кислот в зависимости от типа детектирующего олигонуклеотидного зонда на поверхности КНИ транзистора (природный отрицательно заряженный, модифицированные нейтральный или положительно заряженный).

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

Природа автоколебаний в реакции каталитического окисления метана на палладию

Я. Р. Беспалов, З. С. Винокуров

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

Нестационарные и нелинейные явления в гетерогенном катализе активно изучаются на протяжении последних нескольких десятилетий. Среди них можно выделить явления температурного гистерезиса, химические волны, регулярные и затухающие автоколебания и детерминированный хаос. Во всех этих случаях наблюдаются необычные зависимости от времени или температуры основного параметра каталитической системы — скорости реакции. Несмотря на многочисленные исследования причины возникновения этих критических явлений в ряде случаев остаются до сих пор не ясными.

В данной работе изучались автоколебания скорости окисления метана в присутствии модельного катализатора — палладиевой фольги — при атмосферном давлении с помощью методов рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии в режиме *operando*. Совместное применение методов рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии дает возможность в рамках одного эксперимента определить взаимосвязь между фазовым составом катализатора и его каталитическими свойствами в активный и неактивный период реакции. Вследствие малого периода автоколебаний (100–400 секунд), наблюдаемых при окислении метана, использование рентгеновских дифрактометров, оснащенных рентгеновскими трубками, невозможно, так как для записи рентгенограмм с хорошим разрешением требуется время существенно большее периода осцилляций. В связи с этим эксперименты проводились на станции «Прецизионная дифрактометрия» накопительного кольца ВЭПП-3 «СЦСТИ» (ИЯФ СО РАН) с использованием синхротронного излучения, что обеспечило необходимое временное разрешение.

В ходе экспериментов наблюдались периодические изменения интенсивностей рефлексов на рентгеновской дифрактограмме, соответствующих фазам Pd, PdO и PdC_x, одновременно с изменениями температуры катализатора и скорости окисления метана. Установлено, что в состоянии с низкой активностью поверхность катализатора окисляется, а переход в состояние с высокой активностью происходит одновременно с образованием металлической фазы. В дополнение к последнему также наблюдалось образование фазы PdC_x с большим параметром решетки на поверхности катализатора.

Научный руководитель работы — канд. физ.-мат. наук В. В. Каичев

Исследование неоднородностей многослойной древесины в терагерцовом диапазоне частот

Д. С. Бодажков, А. А. Калугин, Ю. В. Тимофеев
Томский государственный университет

В настоящее время развивается техника терагерцового (ТГц) диапазона, разрабатываются новые методы бесконтактной диагностики неоднородных материалов. Одним из перспективных применений ТГц излучения является контроль качества древесины при ее производстве.

В работе представлены результаты исследования многослойной древесины с искусственными тестовыми неоднородностями в ТГц диапазоне частот. В качестве объекта исследования использовался образец древесины толщиной 1 мм, состоящий из трех слоев, соединенных клеем на основе поливинилацетата. В центральном слое были прорезаны отверстия различной геометрической формы с поперечными размерами от 10×10 мм до 20×20 мм. Исследования проводились на базе спектрометра СТД-21. Образец древесины помещался между источником монохроматического ТГц излучения (лампа обратной волны) и детектором (акустооптический преобразователь) в систему двумерного позиционирования, которая позволяла передвигать образец относительно нормально падающей электромагнитной волны в диапазоне 40×40 мм с шагом 330 мкм [1]. Амплитудная модуляция осуществлялась механическим прерывателем. Производилось снятие двумерного распределения прошедшей мощности излучения при частоте генератора 896 ГГц. Распределение уровня сигнала детектора по площади исследуемого образца древесины составило от 0,6 до 3,1 абсолютной единицы.

По полученным данным построен график двумерного распределения мощности прошедшего электромагнитного излучения через неоднородный образец древесины. На полученном ТГц изображении отмечена область локализации искусственной неоднородности типа «ступень». Результаты исследования демонстрируют возможность использования ТГц техники для контроля качества древесины на наличие скрытых неоднородностей.

1. *Badin A. V., Dorozhkin K. V., Suslyayev V. I. et al. Quasi-optical 2D system for non-contact non-destructive testing of defects in natural and artificial crystals // Proceedings of SPIE — The International Society for Optical Engineering. 2017. V. 10466. P. 1046625-1-1046625-5.*

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент А. В. Бадьин

Электрофизические свойства гибких электродов на основе композитов полимер-графен

Е. В. Бойко, И. А. Костоград, Д. В. Смовж

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

Графен — двумерный материал, состоящий из атомов углерода с sp^2 -гибридизацией, впервые полученный Геймом и Новоселовым в 2001 году. Наличие в нем таких свойств, как высокая подвижность носителей заряда ($200000 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$), огромная механическая прочность (1 ТПа), а также высокая теплопроводность ($5000 \text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1}\text{К}^{-1}$) открывает широкие перспективы для использования графена в различных областях науки и техники.

Одним из наиболее распространенных методов получения графена является метод химического осаждения из газовой фазы (CVD). В CVD-методе графеновые плоскости образуются на металлической подложке из углеродосодержащего газа-прекурсора. В основе различных идей применения графена лежит использование его оптических и электрических свойств. Однако для их анализа необходимо, чтобы графен находился на прозрачной диэлектрической поверхности. Поэтому актуальной задачей является развитие методов переноса графена на подобные подложки (например, полимеры).

Синтез графена происходил в термическом реакторе при температуре $1070 \text{ }^\circ\text{C}$ и атмосферном давлении в смеси газов $\text{Ar}/\text{H}_2/\text{CH}_4$. Подложка, на которой происходил рост графена, представляла собой медную фольгу фирмы Alfa Aesar толщиной 25 мкм и чистотой 99,999 %. Графен был перенесен на полимеры ПЭТ / ЭВА и ПММА методами термического прессования со стабилизацией подложки и центрифугирования соответственно. Удаление медной фольги осуществлялось механическим расщеплением и химическим травлением в азотной кислоте (HNO_3). В полученных образцах исследовалось электрическое сопротивление.

В результате проделанной работы было проведено сравнение электрофизических свойств графеновых композитов на основе полимеров ПММА и ПЭТ / ЭВА. Проведен анализ дефектов графена, возникающих в процессе его переноса на полимер. Определены основные факторы, влияющие на проводимость образцов. Также была проведена оптимизация процесса переноса для системы графен / ПЭТ / ЭВА.

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

Структурная организация и электрические свойства тонких слоев фталоцианина хрома (II)

П. С. Бунеева

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

Тонкие слои фталоцианинов металлов широко используются в радиоэлектронике. В последнее время особый интерес вызывает применение их в качестве газовых сенсоров. Для получения наилучших откликов вольт-амперных характеристик на различные газы ведется целенаправленный поиск новых соединений и создание новых устройств. Фталоцианины металлов дают возможность использовать их в качестве газовых сенсоров ввиду высокой термической и химической стабильности, а также способности изменять электрическую проводимость в присутствии химически активных газов. Причем чувствительность фталоцианиновых сенсоров зависит от металла-комплексобразователя и структурной организации слоев.

Целью данной работы является проведение рентгенографической характеристики тонких слоев фталоцианина хрома (далее CrPc) и изучение их электропроводности.

В данной работе были проведены рентгенографические исследования образцов тонких слоев фталоцианина Cr(II) и изучена их электропроводность. На первом этапе, на дифрактометре SHIMADZU MAXima, был проведен рентгенофазовый анализ продукта синтеза CrPc, представляющего собой мелкокристаллический продукт. Из этого продукта далее производилось осаждение тонких слоев CrPc из газовой фазы на стеклянные подложки и встречно-штыревые структуры. Установлено, что полученные слои CrPc представляют собой идеально ориентированные поликристаллические образцы. Изучена структурная организация слоев: межплоскостные расстояния, взаимное расположение молекул, углы между плоскостями молекул и угол наклона их относительно подложки. Отжиг полученных образцов проводили при различных значениях температуры и влажности окружающей среды. Были исследованы вольт-амперные характеристики полученных образцов. Показано, что при отжиге образца CrPc на воздухе сопротивление уменьшается от 84,75 до 29,45 кОм, т. е. более чем в три раза. При отжиге во влажной среде сопротивление возрастает.

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

Структурно-фазовое состояние и свойства гетеромодульных керамических материалов на основе ZrC с добавлением C

А. Г. Бурлаченко, Ю. А. Мировой, А. В. Рыгин
Томский политехнический университет,
Томский государственный университет,
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск

Карбидам металлов переходных IV–VI групп свойственны высокая температура плавления более $3000\text{ }^\circ\text{C}$; высокие значения твердости, модуля упругости, тепло- и электропроводности. Химически устойчивый ZrC является одним из наиболее перспективных материалов в авиа- и ракетостроении, атомной и обрабатывающей промышленности и других отраслях. Основным недостатком керамики на основе ZrC , как и керамики в целом, остается повышенная хрупкость. Низкие значения вязкости разрушения $3\text{--}4\text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ не позволяют расширить область применения керамоматричных ZrC композиционных материалов.

Создание гетеромодульных керамоматричных систем ZrC/C позволяет реализовать механизм *Кука-Гордона*, который заключается в диссипации энергии распространяющейся трещины на границе раздела «высокомодульная матрица — низкомодульное включение», что позволит значительно повысить вязкость разрушения керамики.

Методом горячего прессования в условиях защитной атмосферы аргона и с использованием графитовых пресс-форм получены композиционные гетеромодульные материалы ZrC/C , где в роли высокомодульной матрицы ($E = 420\text{--}480\text{ ГПа}$) представлен ZrC , низкомодульным включением — технический углерод C ($E = 2\text{--}4\text{ ГПа}$).

Твердость и модуль упругости с увеличением содержания C в составе композиционной системы ZrC/C логарифмически снижаются. При концентрации C в количестве 1 и 3 % об. твердость композитов составляет около 15 ГПа, в безуглеродном образце — $21 \pm 2\text{ ГПа}$. Наибольшее значение вязкости разрушения $7,0 \pm 0,5\text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ принимает образец в составе которого содержится 3 % об. свободного C .

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ Соглашение № 14.584.21.0026 (RFMEFI58417X0026).

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. С. П. Буйкова

Применения теории Релея для определения размеров наночастиц

И. Ф. Галиева

Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток

Бурное развитие нанотехнологий в последние десятилетия все чаще приводит к использованию жидкостей с наночастицами в различных технологических процессах. В последнее время стали появляться и требования на содержание наночастиц в отходах производства. В связи с этим требуется развивать и исследовать применимость известных методов для оценки характеристик наночастиц. В прозрачных средах лучше всего использовать оптические методы.

В работах [1–3] размеры наночастиц диоксида кремния в водной среде исследовались двумя оптическими методами. Определенный методом динамического рассеяния света размер частиц в 10 раз превосходил действительный размер наночастиц. Это вызывает сомнения в его применимости в данной задаче. В другом методе исследовалось рассеяние света водной суспензией наночастиц, после чего размер определялся с применением теории Релея. В этих работах рассеяние света изучалось только на одной длине волны, поэтому нельзя с уверенностью полагать, что теория Релея вполне применима для интерпретации результатов.

В настоящей работе были измерены спектры пропускания водных суспензий различной концентрации наночастиц диоксида кремния различного размера. Обнаружено отклонение от строгого соответствия теории Релея эмпирических спектров. Однако отклонение не слишком существенное, что позволяет аппроксимировать экспериментальные данные функцией в соответствии с теорией Релея с некоторой поправкой. Определенные в соответствии с этим размеры близки к действительным размерам наночастиц, которые оценивались по удельной поверхности использованных для создания суспензий нанопорошков. Это обуславливает применимость такого метода в задачах детектирования и исследования размеров наночастиц.

1. Bardakhanov S. P., Zavjalov A. P., Zobov K. V. et al. Investigation of the Optical Properties of Aqueous Solutions of Silica Nanopowders // *Glass Physics and Chemistry*. 2009. V. 35. № 2. P. 176–180.

2. Zobov K. B., Сызранцев В. В., Бардаханов С. П. Особенности измерения размеров частиц в гидрозолях нанопорошка диоксида кремния оптическими методами // *Вестник НГУ. Серия: Физика*. 2016. Т. 11. № 4. С. 68–77.

3. Завьялов А. П., Сызранцев В. В., Zobov K. B. и др. Модель присоединенного слоя для описания вязкости наножидкости // *Сибирский физический журнал*. 2017. Т. 12. № 2. С. 85–99.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. П. Завьялов

Исследование влияния ОУНТ на прочность эпоксидной смолы в зависимости от типа отвердителя

Д. С. Глуздов

Новосибирский государственный университет,
Группа компаний OCSiAl, г. Новосибирск

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают очень высокими показателями прочности и электропроводности. В настоящий момент их находят применение во многих областях науки и техники. Одной из таких областей является модифицирование композитных материалов, в частности упрочнение композитных материалов на основе эпоксидной смолы (ЭС). В настоящее время ЭС используют во многих отраслях промышленности как в качестве самостоятельного материала, так и в качестве связующей матрицы в таких композиционных материалах, как стеклопластик и углепластик. Данные материалы в свою очередь являются неотъемлемой частью авиастроения и машиностроения в связи с высокими показателями прочности и низким весом.

Существует много работ, демонстрирующих значительное увеличение модуля упругости и прочности композитных материалов при добавлении в них углеродных нанотрубок, однако нет полноценного исследования механизмов влияния ОУНТ на прочность. Таким образом, исследование упрочнения ЭС углеродными нанотрубками является перспективным направлением.

В данной работе исследовалось влияние добавки 0,02–0,05 масс.% ОУНТ на прочность ЭС и кинетику ее отверждения в зависимости от типа используемого отвердителя. Применялась эпоксидная смола ЭД-20, ароматический, ангидридный и алифатические типы отвердителя. Исследование прочности проводилось методом трехточечного изгиба, исследование кинетики отверждения проводилось при помощи метода дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Результаты показывают, что влияние ОУНТ на прочность ЭС в значительной мере зависит от типа используемого отвердителя. При этом можно отметить корреляцию результатов ДСК и результатов исследования прочности на изгиб. Наибольшее увеличение модуля упругости — 19 % было достигнуто при использовании диаминового отвердителя с концентрацией ОУНТ 0,05 %. Увеличение прочности на изгиб 10 % наблюдалось для диаминового и ангидридного отвердителей.

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

Новые композитные материалы для электромагнитных приложений на основе полиэтилена и многослойных углеродных нанотрубок, модифицированных магнитными наночастицами Co и Fe-Co сплава

Г. В. Голубцов

Новосибирский государственный университет,
Институт катализа СО РАН, г. Новосибирск

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

Предложенная в работе методика получения Co (Fe-Co)/МУНТ-ПЭ композитов за счет предварительного распределения Ti-содержащего катализатора полимеризации на поверхности Co (Fe-Co)/МУНТ позволяет получить композиты с равномерным распределением в матрице ПЭ как МУНТ, так и наночастиц Co и Fe-Co сплава. Были получены композитные материалы Co (Fe-Co)/МУНТ-ПЭ с содержанием добавки (3,5–14,5 масс.% Co (Fe-Co)/МУНТ) около 10–15 масс.%. Общее содержание металлов в композитных материалах варьировалось с 0,33 до 1,74 масс.%. Исследование структуры и морфологии исходных и Co-содержащих МУНТ проводили методом ПЭМ, *in situ* РФА и ^{59}Co ЯМР, а композитов Co (Fe-Co)/МУНТ-ПЭ методами ПЭМ, ДСК. Было показано, что композитные материалы Co (Fe-Co)/МУНТ-ПЭ с высоким содержанием равномерно распределенных МУНТ и магнитных наночастиц представляют интерес для создания покрытий эффективно отражающих или поглощающих электромагнитное излучение.

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

Диэлектрические свойства оксида графита

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

Интеркалированные соединения оксида графита (ОГ) имеют ряд потенциальных приложений в электронике, биотехнологиях, создании суперконденсаторов и мембран для избирательного молекулярного разделения. Вода является основным интеркалятом ОГ, она оказывает влияние на его диэлектрическую проницаемость. При этом было обнаружено, что вода формирует двухмерные структуры между графеновыми слоями. В связи с этим актуальной задачей является изучение особенностей диэлектрических свойств ОГ при температурах фазовых переходов воды.

В данной работе была исследована температурная и частотная зависимость диэлектрической проницаемости ОГ. Измерения проводились в электрохимической ячейке с помощью метода параллельных пластин при температуре от 263 К до 423 К в частотном диапазоне 1 кГц–7 МГц. Было обнаружено изменение диэлектрической проницаемости при температуре фазовых переходов воды.

Описание механизмов поляризации в ОГ проведено через моделирование импеданса эквивалентными электрическими схемами. Продемонстрировано, что ОГ при комнатной температуре имеет механизм поляризации с резонансной частотой порядка 10 кГц и диффузионные процессы на более низких частотах. Также приведены температурная зависимость компонентов эквивалентных схем и их физическое обоснование.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук А. В. Окотруб

Полупроводниковые нанопластины: синтез и исследование оптических свойств двумерных нанокристаллов CdSe и CdSe/CdS

Р. В. Евстигнеев, Т. К. Кормилина
Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

Для устройств современной фотоники и нужд биомедицины в настоящий момент активно используются полупроводниковые нанокристаллы. Двумерная конфигурация нанокристаллов, называемая нанопластинами, находится стадии интенсивного изучения. Поскольку применение нанокристаллов связано в основном с их люминесцентными параметрами, в настоящее время актуальны исследования двумерных нанокристаллов оптическими методами, позволяющими получить информацию об электронной структуре нанообъектов.

Использование различных техник спектроскопии позволило обнаружить за нанопластинами огромный потенциал. По энергетической структуре их можно считать аналогом квантовых ям, свободным от подложки. Оптические свойства нанопластин можно с большой точностью контролировать, изменяя толщину нанокристалла. Такую возможность дают современные методы химического синтеза нанокристаллов в коллоидном растворе, которые имеют такие достоинства, как относительная дешевизна, высокий выход продукта и его удобная форма, подходящая для изготовления активных сред и внедрения нанокристаллов в различные матрицы. Коллоидные нанопластины могут стать перспективной альтернативой широко применяемым квантовым точкам благодаря более узким полосам люминесценции, малому Стоксову сдвигу и большой силе осциллятора, которые они демонстрируют.

В настоящей работе рассматриваются свойства коллоидных нанопластин халькогенидов кадмия и их гетероструктур. Дается характеристика электронной энергетической структуры двумерных нанокристаллов различной толщины и латеральных размеров, в том числе «ультратонких нанопластин» толщиной четыре атомных слоя и больших наноллистов с латеральными размерами более микрометра. Исследуются также двумерные гетероструктуры CdSe/CdS вида «ядро / корона».

Для исследования нанокристаллов и их оптических откликов применены методы абсорбционной и люминесцентной спектроскопии, а также электронной и флуоресцентной микроскопии с возможностью временных измерений за счет коррелированного счета фотонов.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук С. А. Черевков,
канд. физ.-мат. наук Е. В. Ушакова

Исследование дефектной структуры наночастиц (Cd,Zn)S и (Cd,Mn)S методом моделирования рентгеновских дифракционных картин

Б. Ю. Евтушок

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

В работе была проанализирована структура нанокристаллического CdS и твердых растворов (Cd,Mn)S, полученных при различных температурах (80 °С, 100 °С, 120 °С и 140 °С). Для массивного CdS существует две модификации: вюрцит и сфалерит. Однако для нанокристаллических образцов структура CdS дефектна, что видно из рентгенограмм, которые только частично соответствуют рентгенограммам сфалерита и вюрцита. Чтобы проверить данное предположение, были проведены расчеты рентгеновских дифракционных картин на основе моделей дефектных кристаллов. Расчет рентгенограмм производился по формуле Дебая с использованием программы DISCUS. Для уточнения параметров модели использовался генетический алгоритм, реализованный в программе DIFFEV.

Для моделирования структуры с дефектами, варьируемыми параметрами были параметры элементарной ячейки, форма и размеры кристаллитов, вероятность дефектов упаковки. Начальное приближение было следующим: частица бралась сферической формы; значения параметров элементарной ячейки брались из карточки PDF#41-1049 вюрцитоподобного CdS; размер ОКР был взят из калибровочного графика с зафиксированными параметрами и варьируемым радиусом частицы. Для введения дефектов в расчетной структуре, бралась матрица вероятностей дефектов упаковки с параметром равным 0,6, полученным из расчетных рентгенограмм с фиксируемыми параметрами и варьируемой вероятностью.

Затем, благодаря генетическому алгоритму, модельная структура CdS уточнялась программой DIFFEV. После оптимизации структуры стало ясно, что нанокристаллическая частица CdS обладает эллипсоидной формой. Результат анализа всех экспериментальных рентгенограмм дал понимание, что структура при повышении температуры стремится к вюрцитоподобной модификации CdS.

Аналогично была проведена оптимизация структурных моделей для (Cd, Mn)S.

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

Измерение коэффициента черноты углеродного покрытия на полимере

А. С. Ежак, С. В. Семенов, А. И. Семерикова
Новосибирский государственный университет

Покрытия на основе углерода обладают высокой термической, химической и электрической стабильностью и, как следствие, применяются при изготовлении научных приборов, которые должны работать в условиях криогенных температур, где характеристики многих традиционных поглощающих материалов могут ухудшаться.

Характеристики оптического покрытия определяются спектральными параметрами, адгезией к поверхности подложки, геометрическими размерами, рельефом поверхности, коэффициентами преломления, оптической прочностью и другими характеристиками. Они зависят от выбора типа подложки, на которую наносится покрытие, например от показателя преломления, шероховатости поверхности подложки и др. свойств.

Зависимость коэффициентов черноты углеродного покрытия на разных оптических частотах изучена слабо, что не позволяет получать пленки высокого качества во всем видимом диапазоне. Соответственно с этим возникает необходимость дополнительных исследований по оптимизации условий напыления.

Углеродное покрытие получали с помощью мегнетрон-распылительной системы на полимерной подложке. Распыление графитовой мишени проводилось при давлении рабочего газа Ar от 6 до $8 \cdot 10^{-2}$ Па. Ток разряда составлял 0,9–1,7 А при напряжении 640–740 В. Полученные пленки имели толщину 2–4 мкм.

Проведены измерения и исследования коэффициентов черноты углеродного покрытия с помощью оптической спектроскопии на спектрофотометре SHIMADZU UV-3600 в диапазоне длин волн 190 нм до 3,3 мкм. Обсуждаются спектры комбинационного рассеяния света, полученные с помощью спектрометра Horiba Jobin Yvon T64000, длина волны возбуждающего света — 514,5 нм.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. С. Золкин

Исследование электрических свойств пленок графена, полученных методами CVD-роста

А. С. Зайцев

Новосибирский государственный университет

Благодаря своим уникальным электрофизическим свойствам графен является привлекательным материалом для нано- и микроэлектроники. В работе исследуются подвижность и удельное сопротивление носителей заряда в пленках графена и мультиграфена. Целью данной работы было исследование пленок электрических свойств CVD-графена и выявление корреляций, связанных с их геометрическими параметрами и способами обработки. Для достижения цели были сформулированы и выполнены следующие задачи:

- 1) определение толщины пленок CVD-графена при помощи атомно-силовой микроскопии;
- 2) создание контактов к пленкам и измерение вольт-амперных и передаточных характеристик.
- 3) анализ данных, выявление корреляций, влияющих на электрические свойства.

Исследованные пленки графена были размещены на подложках окисленного кремния с толщиной окисла 300 нм. В качестве способа обработки использовался отжиг в течение 30 мин. в инертной атмосфере Ar при температуре 600 °С. Подвижность носителей заряда в графене определялась из передаточной характеристики. Была выявлена зависимость подвижности от геометрических размеров пленок до и после отжига. Было обнаружено, что до отжига образцы с аспектным соотношением ~2–5 показали большее значение подвижности носителей заряда, чем образцы с аспектным соотношением ~0,1–1. Однако после отжига наибольшие значения наблюдались для образцов с малым аспектным соотношением. Типичные значения подвижности до отжига CVD-графена составляли $(1,87 \pm 1,13) \times 10 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, а после отжига — $(1,60 \pm 1,42) \times 10^3 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$.

Результаты в дальнейшем могут быть использованы при разработке элементов базы нанoeлектроники на основе графена. Также результаты пригодны для проверки моделей переноса носителей заряда в CVD-графене и других теоретических моделей на основе графена. Кроме того, можно использовать пленки для выявления влияния окружающей среды на подвижность за короткие и продолжительные промежутки времени.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Н. А. Небогатикова

Влияние микроструктуры и кристаллографической текстуры титана на его коррозионную стойкость

И. В. Иванов, Е. А. Руденя

Новосибирский государственный технический университет

Несмотря на то, что в медицине используется довольно широкий круг металлов и сплавов, только некоторые из них пригодны для клинического применения в качестве имплантатов. Металлы, за исключением благородных, склонны к коррозии, которая может привести к невыполнению функции имплантата, а также к накоплению в организме токсичных элементов. В настоящее время наиболее часто используется титан и его сплавы, поскольку они относительно доступны, износостойки, обладают высокой биосовместимостью, устойчивы к коррозии и практически не проявляют токсического воздействия. Обширное использование технически чистого титана ограничивается некоторыми его механическими свойствами, такими как низкая износостойкость, высокая жесткость, а также высокий модуль упругости. Вследствие этого важную роль играет модифицирование структуры титана с целью улучшения его свойств.

Целью работы являлось исследование зависимости коррозионной стойкости технически чистого α -титана от сформированной микроструктуры и кристаллографической текстуры.

Было выявлено, что коррозионная стойкость является чувствительным параметром и зависит как от микроструктуры материала, так и от его кристаллографической текстуры. Коррозионная стойкость титана после холодной прокатки со степенью деформации 60 % превосходит коррозионную стойкость титана после горячей и холодной прокатки со степенью деформации 30 %. Вероятно, это связано с образованием более выраженной кристаллографической текстуры в результате повышения степени деформации.

Научный руководитель — И. В. Иванов

Оптические характеристики нанопленок вольфрама

Ф. П. Казанцев

Новосибирский государственный университет

Свойства ионных источников (ИИ) типа End-Hall во многом зависят от эмиссионных характеристик вольфрамового катода. В связи с этим электрофизические свойства катода являются важным объектом исследования. В реальных катодах (длина 5–15 см, сечение 0,1–0,6 мм), сделанных из вольфрама марки ВА, ток эмиссии достигает 5 А и выше, однако при этом значительны затраты электроэнергии на разогрев (мощность накала превышает 100 Вт). Значительно более высокие токи эмиссии достигаются катодами из торированного вольфрама. Цель данной работы — создать технологию изготовления катодного узла для конкретного ИИ; исследовать зависимость эмиссионных характеристик катода от вкладываемой мощности; получить зависимость анодного тока ИИ от температуры катода; рассчитать ток эмиссии; выбрать оптимальные параметры катода (такие как длина, сечение, марка катода); измерить ток ионов в ионном источнике в зависимости от его параметров (ток накала, напряжение анода); исследовать оптические характеристики нанопленок вольфрама на стекле.

Описана методика изготовления вольфрамового катода марки ВА. Эмиссионные характеристики рассчитывались по формуле Ричардсона — Дешмана. Измерения выполнены на установке вакуумного дугового напыления модели PVM-D с ионным источником типа End-Hall. Оптические характеристики снимались на приборе UV-3600 в диапазоне длин волн 190 нм — 3,0 мкм, толщина измерялась на интерференционном нанопрофилометре.

Теоретически рассчитана зависимость тока эмиссии от температуры при разных диаметрах сечения вольфрамового катода. Получена зависимость тока анода ИИ от тока накала катода и напряжения анода. Давление аргона в камере — 3×10^{-5} Торр; диаметр и длина катода — 0,6 и 130 мм. Установлена существенная зависимость анодного тока от напряжения анода: анодный ток резко возрастает при токе накала $I_n = 10$ А. В результате получены основные рабочие характеристики эмиссионного катода для рассматриваемого источника ионов (типа End-Hall). Получены и обсуждаются спектры пропускания и отражения от пленок вольфрама различной толщины.

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

**Исследование влияния углеродных нанотрубок
на электропроводность полимерного композитного материала**

Е. А. Калугина

Исследовательский комплекс центра
технологического обеспечения, г. Новосибирск

В настоящее время полимерные композиционные материалы (ПКМ) во многом определяют высокий уровень современной авиакосмической техники, что связано с их высокой надежностью, хорошими технологическими и эксплуатационными свойствами. Углеродные нанотрубки (УНТ) являются одними из самых эффективных добавок в ПКМ, способными существенно увеличивать прочность, электро- и теплопроводность материала.

В данной работе представлена модификация ПКМ, состоящего из слоев армирующего стекловолокна и эпоксидного связующего, в которое добавлено до 1,5 % одностенных УНТ. ПКМ был получен методом вакуумного формования. Отверждение эпоксидной смолы проходило 24 часа при комнатной температуре, затем 8 часов при температуре 60–70 °С.

На основании полученных результатов можно заключить, что добавление в эпоксидное связующее незначительного количества УНТ в размере 0,5 % создает электропроводность в материале. Испытанием образца материала на растяжение доказана корреляция изменения электропроводности с последовательно приложенными нагрузками. На следующем этапе работы планируется использовать электропроводность для дальнейшей корреляции с усталостью материала, что дает потенциальную возможность получать информацию о деформациях и усталостных свойствах материала без наклеивания на него тензометрических систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям в рамках программы «Старт» № С1-32491.

Научный руководитель — А. Э. Рязанцев

Исследование структурных и электрических свойств мультиграфена малой степени фторирования

А. С. Кашеев

Новосибирский государственный университет

В настоящее время большой интерес к материалам на основе графена связан с такими свойствами, как высокая подвижность носителей заряда, высокий коэффициент теплопроводности, большая прочность на разрыв. В связи с тем, что закон дисперсии носителей заряда в графене является бесщелевым, применение этого материала в транзисторных структурах осложнено. Таким образом, возникают задачи по поиску способов модификации графена, в которых наряду с сохранением высокой подвижности носителей заряда, открывалась бы щель в спектре. В данном направлении ведутся исследования по функционализации графена, и на сегодняшний день известны такие диэлектрические производные графена, как окисленный, гидрированный, фторированный графен. Последний материал является объектом наших исследований, поскольку является наиболее термически и химически стабильным соединением.

В ИФП СО РАН в последние годы разработан метод по химической функционализации графена в водном растворе плавиковой кислоты [1]. Однако в предложенном методе процесс фторирования не является полностью контролируемым, необходим поиск механизмов, позволяющих влиять на степень функционализации. Целью данной работы является создание пленок графена и мультиграфена с запрещенной зоной и с высокими значениями подвижности.

Были исследованы электрические и структурные свойства частично фторированных пленок графена и мультиграфена. Исследованные образцы были получены методами CVD и электростатического отщепления. Характерные латеральные размеры пленок мультиграфена составляли 10–50 мкм, а толщина ~0,5–3 нм. Путем фторирования пленок в 1 % HF-растворе были получены пленки частично фторированного графена с малой степенью фторирования и запрещенной зоной ~0,01 эВ. Сопротивление пленок в низкоомном состоянии составляло ~1 кОм, а в высокоомном — ~10⁶ Ом. Подвижность пленок составляла ~1500 см²/В*с и в процессе фторирования сохранялась.

Небогатикова Н. А. и др. Функционализация пленок графена и мультиграфена в водном растворе плавиковой кислоты // Российские нанотехнологии. 2014. Т. 9. №. 1–2. С. 59–65.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Н. А. Небогатикова

**Исследование субмикронных волокнистых скаффолдов
из поликапролактона с функционализированной поверхностью
для сосудистой хирургии**

Э. В. Киблер

Томский политехнический университет

Изделия из биodeградируемых полимеров, в частности поликапролактона, применяются в регенеративной медицине. Большинство биodeградируемых полимеров являются гидрофобными, что снижает клеточную адгезию и их биосовместимость. Функционализация поверхности полимерных скаффолдов с целью придания гидрофильных свойств проводится, например, путем плазменной обработки. Однако данный метод приводит только к временному увеличению смачиваемости, что обусловлено образованием связей свободных радикалов с молекулами окружающей среды. Для улучшения биосовместимости скаффолдов, а также увеличения смачиваемости, к их поверхности пришивают биоактивные молекулы, например, гиалуроновой кислоты (ГА).

Примененная в работе функционализация поверхности скаффолдов из поликапролактона методом магнетронного распыления титановой мишени в атмосфере азота с последующей иммобилизацией ГА позволила создать тонкие двухсторонние скаффолды: одна сторона гидрофильная, другая гидрофобная. Известно, что тонкие пленки соединений титана и азота обладают высокой биосовместимостью с кровью, стимулируют клеточную адгезию, пролиферацию и дифференцировку, придают бактерицидные свойства. Поверхность скаффолдов исследовалась методами сканирующей электронной микроскопией, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией. Также изучались их смачиваемость, механические характеристики и биосовместимость. Было показано, что модифицирование в плазме магнетронного разряда не влияло на морфологию и механические свойства скаффолда, что приближает этот материал к морфологии нативных кровеносных сосудов человека. Анализ пролиферации клеток показал, что скаффолд является биосовместимым.

Данный подход может быть применен для создания трубчатых имплантатов для кардиохирургии из биоразлагаемых полимеров с гидрофобной внутренней поверхностью и гидрофильной внешней поверхностью.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. И. Твердохлебов

Спектральное исследование нанопленок вольфрама и титана. Определение коэффициентов пропускания и отражения

Ф. П. Казанцев, Н. С. Ким, А. И. Семерикова
Новосибирский государственный университет

Свойства нанопленок металлов привлекают внимание в связи с развитием нанотехнологий в области микро- и наноэлектроники и оптоэлектроники. На сегодняшний день пленки титана и вольфрама находят широкое применение в производстве оптических приборов в проектировании сверхчувствительных сенсоров [1]. Ввиду этого в последнее время ведутся активные исследования по их получению и исследованию их характеристик [2]. Основным методом диагностики, который позволяет проводить измерения оптических свойств металлопленок, является спектрофотометрия. Изучение спектров дает также информацию о структуре вещества. Целью работы является спектроскопическое исследование тонких пленок вольфрама и титана, а именно получение спектров поглощения и отражения, получение зависимости спектров от толщины напыленной пленки.

Напыления пленок вольфрама и титана проводились с помощью магнетронно-распылительной системы и ионного источника типа End-Hall. Спектральные характеристики снимались на приборе UV-3600 в диапазоне длин волн 190 нм — 3,0 мкм, толщина измерялась на интерференционном нанопрофилометре МНП-1 с учетом полученных спектров.

Получены и обсуждаются спектры пропускания и отражения от пленок вольфрама и титана различной толщины. Предварительные результаты показывают, что возможно максимум пропускания титана приходится на диапазон длин волн 360–500 нм с характерным спадом в области 720 нм, уменьшающимся с увеличением толщины пленки [3].

1. *Ляхов И. Г. и др.* Исследование микроструктуры тонких пленок титана для криогенных детекторов при различных режимах магнетронного напыления // Журнал радиоэлектроники. 2012. № 9.

2. *Кочубей В. А.* Структура, микроморфология и оптические свойства пленок вольфрама, полученных методом магнетронного распыления // Конденсированные среды и межфазные границы. 2014. Т. 16. № 4. С. 449–455.

3. *Березин С. А.* Спектроскопическое исследование свободных пленок титана в диапазоне 190-3300нм // Курсовая работа. 2017 г.

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

Электромагнитные параметры материалов на основе МУНТ инкапсулированных наноразмерными частицами Со

А. С. Качалов, А. Ю. Панфилов, Д. И. Сергиенко
Томский государственный университет

Среди современных наполнителей для композиционных материалов особое место занимают многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ), их использование в качестве активной фазы позволяет получать материалы с повышенной механической прочностью, высокими значениями тепло- и электропроводности. Кроме того, активно изучаются электромагнитные характеристики таких материалов в различных диапазонах частот. Так, при относительно малых концентрациях МУНТ, наблюдается поглощение электромагнитных волн, а при дальнейшем незначительном увеличении концентрации введенных углеродных нанотрубок наблюдается полное отражение.

Степень отражения электромагнитных волн зависит от величины согласования волнового сопротивления материала со свободным пространством. Таким образом, варьируя концентрацию введенных МУНТ и добавляя магнитную фазу можно обеспечить требуемый уровень согласования со свободным пространством.

Благодаря особенностям своего строения МУНТ (наличие полости) могут выступать в качестве капсулы. Используя в качестве наполнителя металлы подгруппы железа, можно ожидать существенного изменения электрофизических параметров и, в частности, волнового сопротивления.

Синтез исследуемых композиционных материалов на основе МУНТ инкапсулированных наноразмерными частицами Со проведен в Институте катализа СО РАН. Для исследования электромагнитных параметров применялся векторных анализатор цепей PNA-X N5247A фирмы Agilent Technologies с коаксиальным трактом N типа.

Экспериментально показано наличие магнитных свойств в СВЧ диапазоне у синтезированных материалов. На частотных зависимостях комплексной магнитной проницаемости наблюдается область естественного ферромагнитного резонанса. Проведенный расчет коэффициентов отражения и прохождения показал, что в свободном пространстве влияние магнитной фазы выражается в лучшем согласовании волнового сопротивления образца со свободным пространством, что отражается в плавной зависимости от частоты коэффициента прохождения.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. Ю. Коровин

**Исследование характеристик углеродных нанотрубок,
имеющих различные типы проводимости**

А. Н. Красулина

Новосибирский государственный университет

Являясь объектом многих исследований, одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают уникальными свойствами. Они имеют высокий предел прочности при растяжении, высокие тепло- и электропроводность, необычные оптические характеристики и применяются во многих областях.

Спектроскопия оптического поглощения света является удобным методом определения таких параметров ОУНТ, как распределение по диаметрам, концентрация нанотрубок в образце, коэффициент оптического пропускания образца и основные полосы его поглощения, которые определяют рабочий диапазон элементов на основе ОУНТ. Спектр оптического поглощения отдельно взятой одностенной углеродной нанотрубки представляет собой набор узких максимумов, которые соответствуют переходам между лежащими по разные стороны от уровня Ферми первыми, вторыми и т. д. сингулярностями Ван Хова в плотности одноэлектронных состояний в ОУНТ.

Целью исследования является анализ характеристик и оценка содержания нанотрубок Tuball, имеющих разные типы проводимости, и их влияние на различные свойства материалов.

В данной работе была разработана методика, позволяющая анализировать оптические спектры ОУНТ, имеющие различное строение и разное соотношение металлических и полупроводниковых нанотрубок. Также из них были найдены характеристики исследуемых образцов.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. О. Сайк

Измерение распределения массы вдоль потока микрочастиц

С. И. Кременко

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

При сильном ударном воздействии на металлическую пластину с ее свободной поверхности выбрасывается поток частиц разных размеров (ударно-волновое «пыление»). Выход ударной волны (УВ) на свободную поверхность (СП) металлов приводит к развитию микровозмущений на СП и последующему образованию мелкодисперсной фракции, распределенной в пространстве по размерам и скоростям. Развитие процесса роста неустойчивости на СП металла и, соответственно, характеристики пылевого облака зависят от фазового состояния материала, условий нагружения и т. д.

Для исследования процесса пыления традиционно используют метод импульсной рентгенографии, метод измерения давления пьезоэлектрическими датчиками, оптические методики. Диапазон размеров частиц при пылении металлов варьируется от единиц мкм до сотен мкм. Предполагается, что в потоке есть и более мелкие частицы, но пока не могут разрешить их существующие методики.

В ИЯФ СО РАН на ускорительном комплексе ВЭПП-3 — ВЭПП-4 построены две станции для исследования быстрых (в том числе взрывных) процессов. На станциях есть возможность измерять как проходящее излучение (поглощение), так и малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) синхротронного излучения (СИ). В качестве детектора используется прецизионный быстродействующий детектор DIMEX.

С помощью регистрации проходящего СИ нами были проведены исследования потоков микрочастиц со свободной поверхности олова и получены распределения массы вдоль микроструй, образующихся из канавок микронного размера.

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

Рентгенографическое исследование $ZnMoO_4$

А. В. Курчев

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

Монокристаллы молибдата цинка ($ZnMoO_4$) используются в криогенных болометрах для изучения двойного бета-распада Mo^{100} . Однако период полураспада Mo^{100} очень большой ($\sim 10^{23}$ лет), а значит и сам распад случается довольно редко. Поэтому очень важно иметь большой монокристалл для этих целей. При выращивании монокристалла без примесей возникают некоторые проблемы, для устранения которых в расплав добавляют вольфрам. Однако атомы W входят в структуру монокристалла, изменяя его свойства. Целью данной работы является разработка процедуры уточнения параметров триклинной элементарной ячейки (ПЭЯ) $ZnMoO_4$ используя в качестве образцов разные кристаллы и разные зоны одного кристалла.

Образец (обломки кристалла размером до 2 мм) перетирали в порошок в ступке в присутствии гептана и наносили тонким слоем на полированную сторону стандартной кюветы. Далее проводили рентгенографическое исследование на дифрактометре Shimadzu 7000 (CuK_{α} -излучение, Ni-фильтр, сцинтилляционный детектор, схема Брэгга-Брентано, комнатная температура) в области углов 2θ 24–54°. Внешний эталон Si ($a = 5,4309$, $\lambda CuK_{\alpha 1} = 1,540598$ Å). ПЭЯ $ZnMoO_4$ уточняли в программе PCW. Для построения теоретической дифрактограммы использовали данные ICSD № 411378. При проведении полнопрофильного уточнения варьировали параметры U, V, W функции Лоренца, ПЭЯ ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$), шкальный фактор и фон.

Показано, что на дифрактограммах $ZnMoO_4$ практически все рефлексы являются мультиплетами и ПЭЯ изученных образцов отличаются в пределах погрешности рутинного эксперимента. Для улучшения точности эксперимента (уменьшения полуширины рефлексов) целесообразно провести исследование на дифрактометре с использованием синхротронного излучения.

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

Синтез и исследование оптических свойств углеродных пленок на полимере

Д. А. Кыштымов, А. В. Пивкина, А. И. Семерикова, С. В. Семенов
Новосибирский государственный университет

Аморфное углеродное покрытие с развитой поверхностью обладает выраженными антибактериальными свойствами, природа которых непонятна. Возможность нанесения такой структуры на полимер перспективна в области медицины. Рассматриваемая связка полимер-углерод выгодна в связи с легкостью материала и его биологической пассивности. Чем чернее материал, тем больше рельефность углеродной поверхности и, как следствие, его антибактериальные свойства. Для создания тонких углеродных пленок с помощью магнетронно-распылительной системы (МРС) с равномерной поверхностью и хорошей адгезией необходим правильный выбор параметров источника, определяемый вольтамперными характеристиками (ВАХ).

В МРС напыление сопровождается высоким тепловым излучением, что накладывает дополнительные ограничения на синтез покрытия. При нанесении покрытия на полимер возникает ряд проблем. Рассматриваемый в работе материал подложки обладает низким коэффициентом теплопроводности и плавится при 160 °С. В связи с этим возникает проблема предохранения поверхности полимера от теплового потока со стороны МРС.

Целью данной работы является получение ВАХ источника для поиска оптимальных параметров системы, получения покрытия с хорошей адгезией, а также исследование коэффициентов отражения и пропускания света от поверхности полимера.

В экспериментах использовался блок питания АРЕL-М-РДС. Напыление углеродного покрытия было произведено с помощью МРС на полимер с матовой поверхностью. Для измерения оптических свойств (коэффициентов отражения и пропускания) был использован спектрофотометр UV-3600, измерения проводились в спектральном диапазоне длин волн 190 нм — 3,3 мкм.

В результате работы выявлены оптимальные параметры источника напряжения МРС для напыления, получены углеродные пленки на полимере. Исследованы коэффициенты пропускания и отражения углеродного покрытия на спектрофотометре UV-3600 в диапазоне длин волн 190 нм — 3,3 мкм. Приводятся данные о степени черноты покрытия.

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

Исследование оптических свойств а-С:Н-покрытий на кремнии

Д. А. Маркелов, Н. Е. Черепанова, А. И. Семерикова
Новосибирский государственный университет

Важной характеристикой ионного источника является плотность тока в зависимости от расстояния или от параметров источника. Один из способов повышения плотности — это создание специальной фокусирующей системы с целью получения максимального тока в области кроссовера ионного пучка. В наилучшем случае можно получить многократное сжатие ионного потока с целью обработки и активации поверхности при напылении пленок или распылении материала. В результате сокращается время технологического процесса.

Известны разработки в этом направлении лаборатории ионно-лучевых технологии ФТИАН: ионный источник с фокусировкой ионного пучка типа «Холодок». Однако информация об особенностях данного источника отсутствует.

Мы применили ионный источник с фокусирующей системой для синтеза аморфных углеродных гидрогенизированных покрытий (а-С:Н) на кремнии.

Цель данной работы — создать и исследовать фокусирующую систему катодного узла ионного источника с азимутальным дрейфом электронов с фокусирующим расстоянием 180–200 мм, синтезировать а-С:Н-покрытия на кремнии и исследовать их оптические свойства в диапазоне от 190 нм до 3 мкм в зависимости от толщины покрытия и условий синтеза.

Для измерения рабочих характеристик ионного источника и получения зависимости тока разряда от ускоряющего напряжения использовали блок питания БП-94, ток разряда изменялся в диапазоне 0–0,06 А для измерения расхода газа в диапазоне 5,5–6 сссм. Расход измерен с помощью системы Horiba.

Установлены рабочие диапазоны ионного источника типа «Радикал» при фокусировке ионного пучка: при токе катушки, равном 1,5–3 А и различных расходах газа, магнитная ловушка работает эффективно. Определено, что разработанная фокусирующая система обеспечивает сжатие пучка в три раза.

В работе проведено спектроскопическое исследование а-С:Н на кремнии с помощью спектрофотометра Shimadzu UV 3600 в диапазоне от 190 нм до 3 мкм. Получены и рассмотрены спектры пропускания и отражения, обнаружены изменения спектров с повышением толщины пленки.

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

Исследование механических характеристик образцов из авиационных алюминиевых сплавов системы Al-Cu-Li, сваренных с помощью непрерывного излучения CO₂-лазера с последующей закалкой

И. С. Месензова, Н. А. Павлов

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

Использование алюминиевых сплавов системы Al-Cu-Li имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционными алюминиевыми сплавами: пониженную плотность за счет добавления Li, повышенную прочность, износостойкость и сопротивление циклическим нагрузкам (усталости) за счет добавления Cu и других элементов. Такие сплавы находят широкое применение в авиакосмической промышленности для производства летательных аппаратов, ракет и т. д. Существующая проблема избыточной массы авиакосмических конструкций из-за повсеместного использования заклепочных соединений имеет одно из самых перспективных решений, а именно замену заклепочных соединений на сварные.

В данной работе исследуется возможность создания неразъемных соединений с помощью лазерной сварки непрерывным CO₂-лазером сплавов марки 1441 и 1461. Изучается влияние термической обработки на прочность, на разрыв и микротвердость образцов, а также микроструктурные изменения. Для получения зависимостей предела прочности и относительного удлинения после разрыва от температуры закалки было выбрано несколько режимов закалки в воде: 450 °С, 490 °С, 530 °С, 545 °С при времени выдержки 30 мин, скорости нагрева 5 °С/мин. Опираясь на полученные данные, был выбран лучший режим нагрева перед закалкой до 530 °С.

Целью работы является выявление режимов термообработки сплавов 1441 и 1461 для получения неразъемных соединений с прочностью на разрыв на уровне или выше, чем для основного сплава.

Эксперименты по сварке лазерным лучом проводились на установке собственного производства лаборатории № 3 ИТПМ СО РАН АЛТК «Сибирь-1» с выходной мощностью непрерывного излучения CO₂-лазера до 8 кВт.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 17-79-20139.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. Г. Маликов

**Получение качественных сварных соединений,
выполненных методом лазерной сварки,
алюминиевого сплава системы Al-Mg-Li за счет термообработки**

И. С. Месензова, Н. А. Павлов

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

Al-Mg-Li сплавы широко применяются для производства самолетов, ракет в авиакосмической промышленности. Благодаря их высокой прочности, пластичности, пониженной плотности, повышенной удельной прочности и жесткости, лучшей устойчивости к коррозии и к усталостным трещинам по сравнению с обычными алюминиевыми сплавами.

В настоящей работе впервые проведено комплексное исследование и оптимизация режимов термической обработки неразъемных соединений алюминиевого сплава 1420 системы Al-Mg-Li, полученных при помощи лазерной сварки. Лазерная сварка производилась на АЛТК «Сибирь-1», который включает непрерывный CO₂-лазер мощностью 8 кВт.

Проведено исследование влияния различных термической процедуры на изменение микроструктуры, прочности и распределения химических элементов. Для сравнения влияния термообработки на прочностные свойства сплава и шва образцы основного сплава без сварного шва так же подверглись термообработке.

Исследовано несколько температур закалки в воде или закалки на воздухе при различных режимах. Нагрев перед закалкой составлял 320, 400, 450, 490 и 530 °С, нагрев шел со скоростью 5 °С/мин и образцы оставались при постоянной температуре в течение 30 мин.

Оптимальной была выбрана температура 490 °С. Апробирована закалка на воздухе, в воде и остывание в печи, при котором происходила гомогенизация. Образцы подвергались искусственному старению при пяти режимах: (1) — выдержка в течении 8 ч при температуре 150 °С, (2) — 24 ч при 120 °С, (3) — 10 ч при 120 °С, (4) — 16 ч при 170 °С. И (5) трехступенчатое искусственное старение: первая ступень — при 80–90 °С в течение 3–12 ч, вторая ступень — при 110–185 °С в течение 10–48 ч, третья ступень — при 90–110 °С в течение 8–14 ч.

Важным результатом данных исследований сплава 1420 является экспериментально наблюдаемый факт значительного упрочнения образцов при применении процесса старения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда проект № 17-79-20139.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. Г. Маликов

Изучение изменений структуры твердых растворов $\text{LaCo}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O}_3$ после участия в окислении метана

М. Д. Михненко

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

Твердые растворы со структурой перовскита с общей формулой ABO_3 , где А — катионы щелочноземельных металлов, В — катионы металлов с переменной валентностью, интенсивно исследуются в связи с возможностью использования в различных областях промышленности. Например, перовскиты широко используются в качестве катализаторов в различных реакциях, также из них изготавливаются высокотемпературные сверхпроводники.

Целью настоящей работы было изучить структурные изменения серии образцов после участия в реакции окисления CH_4 и после прокаливания при различных парциальных давлениях кислорода. В ходе данной работы исследовалась серия образцов $\text{LaCo}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O}_3$, синтезированных методом Печини, с параметром замещения x от 0 до 1 с шагом 0,2. В ходе работы было изучено изменение структуры и микроструктуры образцов методами РФА и ПЭМВР. По полученным данным до и после участия образцов в реакции окисления метана с помощью ПО Crystallographica Search-Match и ИК были установлены пространственные группы симметрии и посчитаны параметры элементарной ячейки образцов, микроискажений, ОКР и приведенные объемы элементарных ячеек.

Методом РФА было установлено, что образцы представляют собой однофазные твердые растворы со структурой перовскита во всем диапазоне параметра замещения. Стоит отметить, что внутри серии наблюдался морфотропный фазовый переход вблизи параметра замещения $x = 0,4 - 0,6$ из гексагональной в орторомбическую модификацию.

В результате проведенных исследований было установлено, что в образце LaCoO_3 , участвовавшем в каталической реакции, произошел фазовый переход из орторомбической (Pbnm) в гексагональную (R3c) модификацию. Для остальных образцов после реакции было обнаружено уменьшение параметров элементарной ячейки и параметра микроискажений.

В будущем планируется провести серию экспериментов *in situ* методом РФА при температурах от 20 до 900 °С в средах с различным парциальным давлением кислорода, а также изучить образцы методом ТПВ.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, Е. Ю. Герасимов

Исследование особенностей ближнего порядка в структурах ионных клатратных гидратов с каркасом PC-V

Н. А. Паулиш

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

Методы рентгеноструктурного анализа являются самыми информативными при исследовании структур кристаллических веществ. Для образцов без нарушения дальнего порядка разработаны стандартные протоколы получения и обработки экспериментальных данных, основанные на анализе интенсивностей брэгговских отражений. Для веществ с частичным нарушением дальнего порядка использование такого протокола дает представление лишь об усредненной структуре и не содержит информации об ее локальной организации. В таких случаях для экспериментального исследования ближнего порядка (корреляций в локальном строении) необходимо использовать данные о диффузном (небрэгговском) рассеянии. Стандартного подхода для этого пока не разработано.

В качестве объектов исследования выбраны ионные клатратные гидраты с каркасом PC-V (хозяин — водородно-связанный водно-анионный каркас, гость — четвертичные аммонийные катионы). В структурах этих соединений возможно сочетание разнообразных способов нарушения дальнего порядка: ориентационное или позиционное разупорядочение ионов гостя, разупорядочение атомов водорода молекул воды по водородным связям, сбой в организации самого каркаса.

Работа посвящена экспериментальному изучению особенностей ближнего порядка ионных клатратных гидратов с каркасом PC-V. Нами решались следующие задачи: корректная обработка экспериментальных данных (оценка интенсивностей дифракции с учетом фона); создание программы, позволяющей эффективно рассчитывать дифракционную картину от моделей структур с различными вариантами разупорядочения; глобальная оптимизация структурных моделей с локальным позиционным упорядочением по экспериментальным данным (полный перебор, метод Монте-Карло); исследование влияния ориентационного упорядочения на дифракцию.

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

Исследование спектров комбинационного рассеяния света углеродных пленок на стекле К-8

С. В. Семенов, А. И. Семерикова, А. С. Шило
Новосибирский государственный университет

Пленки аморфного углерода обладают оптическими, электрическими и механическими свойствами, изменение которых позволяет использовать их, например, в оптических устройствах для создания покрытий с разным коэффициентом преломления. Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) позволяет исследовать состав и структуру пленки, которые определяют свойства покрытия. Углеродная пленка находится в аморфном состоянии, состоит из атомов углерода с sp^2 - и sp^3 -гибридизациями. Анализ спектров КРС позволяет определить динамику концентрационных соотношений состояний углеродных пленок, полученных при разных режимах работы магнетронной распылительной системы (МРС).

Исследование зависимости параметров спектров КРС от условий напыления позволяет найти режимы синтеза, при которых покрытия обладают заданными характеристиками. Например, получать аморфные углеродные пленки с преобладанием sp^2 гибридной структуры с целью понижения коэффициента трения. Свойства покрытия зависят от режима напыления, характеристик подложки и теплофизических условий. Время напыления и, соответственно, толщина пленки также оказывают влияние на механические и оптические свойства покрытия.

Напыление проводилось с помощью МРС с графитовой мишенью. Использовался источник тока (блок питания МРС) и источник напряжения в импульсном режиме и режиме прямого тока (DC) соответственно. Мощность варьировалась от 0,25 кВт до 1 кВт при разных источниках. Стекло К-8, используемое в создании оптических устройств, выбрано в качестве подложки. Очистку подложки перед синтезом производили с помощью распыления ионами аргона с энергией 1кэВ. Покрытия исследованы на спектрометре КРС Horiba Jobin Yvon T64000 в диапазоне сдвигов по частоте от 900 — 1900 cm^{-1} , длина волны возбуждающего света — 514,5 нм. Спектры пропускания и отражения получены с помощью спектрофотометра Shimadzu UV 3600 в диапазоне длин волн от 190 нм до 3,3 мкм.

В работе исследованы оптические и механические свойства углеродного покрытия в зависимости от условий синтеза: мощности, частоты импульсов.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. С. Золкин

Свойства аморфных углеродных гидрогенизированных пленок на германии

А. И. Семерикова

Новосибирский государственный университет

Аморфные углеродные гидрогенизированные (а-С:Н) покрытия с высокой адгезией, твердостью и низким уровнем поглощения в ИК-области спектра от 3 до 12 мкм могут быть использованы для защиты и просветления внешних поверхностей кремниевой и германиевой оптики. С целью улучшения адгезии мы предлагаем метод мягкой имплантации ионов пропана с энергией до 5 кэВ для формирования промежуточного адгезионного подслоя с хорошей оптической прозрачностью.

Цель работы — исследовать влияние мягкой имплантации ионов пропана на адгезионную прочность, твердость и структуру а-С:Н пленок на Ge; исследовать термическую стабильность покрытий в условиях атмосферы методами FTIR и рамановской спектроскопии.

Покрытия синтезировали из ионных пучков с максимальной энергией от 1 до 5 кэВ с помощью ионного источника с азимутальным дрейфом электронов из пропана.

С целью улучшения адгезии и сохранения твердости покрытия мы применили двухэтапный режим синтеза: на первом этапе мы осуществили мягкую имплантацию ионов рабочего газа с энергией до 5 кэВ, на следующем этапе энергия не превышала 1 кэВ. Моделирование профилей распределения имплантированных ионов углерода в германий подтверждает, что с ростом энергии до 5 кэВ средняя глубина проникновения ионов С возрастает до 16 нм. Часть имплантированных ионов может образовывать химическое соединение карбида германия и улучшать сцепление пленки с подложкой. В результате пленки с адгезионным слоем не отрывалась при многократном скрайбировании алмазным индентором с максимальной возможной нагрузкой 50 мН. С увеличением максимальной энергии ионного пучка от 1 до 5 кэВ адгезия покрытия улучшается не хуже, чем в пять раз. Описанный способ синтеза дал хорошие значения твердости: от 15 до 20 ГПа.

Пропускание германия с односторонним защитным просветляющим покрытием достигает 65–67 % и 62–64 % в диапазонах длин волн 4,5–6 мкм и 9–11 мкм. Методами FTIR и рамановской спектроскопии установлено, что начиная с 250 °С происходит структурная перестройка покрытия, однако его оптические не изменяются до 360 °С включительно.

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

**Изучение гетероструктур германия, выращенных
на структурированных подложках кремния
методом молекулярной динамики**

Син Минмин

Новосибирский государственный университет

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Эти квазиуменьшенные системы обладают замечательными физическими свойствами и могут применяться в таких электронных приборах и устройствах, как светодиоды, лазеры на КТ, спинтронная память и логические элементы для квантовых вычислений.

Одним из методов получения пространственно упорядоченных массивов КТ является молекулярно-лучевая эпитаксия на структурированных подложках, т. е. на подложках, поверхность которых содержит систему упорядоченных ямок, сформированных с помощью литографии. Механизм роста на поверхности со сложным рельефом изучен недостаточно.

В данной работе методом молекулярной динамики рассчитана удельная энергия для различных морфологий наноостровков Ge на структурированных подложках Si. Построена карта потенциального рельефа для канавки с треугольным профилем. Рассчитаны упругие деформации за счет дефектов, образованных ионным облучением. Результаты выполненных расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными по росту Ge на структурированных подложках Si.

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

Исследование возможностей выращивания кристалла Li_2WO_4 и его свойств

А. Г. Соколов

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

Кристаллы на основе W и Mo обладают набором уникальных функциональных характеристик. CdWO_4 и ZnWO_4 имеют высокие сцинтилляционные характеристики как при комнатных, так и на криогенных температурах. В ряде работ имеются свидетельства возможностей выращивания кристаллов вольфраматов и молибдатов с чрезвычайно низким собственным радиационным фоном и высокими болометрическими характеристиками. Такие кристаллы могут быть использованы для решения научно-исследовательских задач — изучения «темной материи» — и представляют интерес в качестве материалов для регистрации безнейтринного двойного бета-распада, поскольку для некоторых ядер, в том числе ^{100}Mo и ^{116}Cd , теоретически предсказано его существование. В структуре Li_2WO_4 имеется легкий атом лития и тяжелый — вольфрама, что положительно влияет на чувствительность детекторов при изучении рассеяния исследуемых частиц на решетке кристаллов. Кроме этого, прекурсоры для выращивания кристаллов Li_2WO_4 могут быть глубоко очищены от радиоактивных примесей, что показано при выращивании кристаллов Li_2MoO_4 и ZnWO_4 .

Цель данной работы — исследование возможности выращивания кристаллов вольфрамата лития с предельно низким собственным радиоактивным фоном и составом близким к стехиометрическому, изучение его свойств и определение возможности использования в качестве криогенного сцинтилляционного болометра.

Для этого поставлены следующие задачи: выращивание кристалла в условиях низких градиентов температуры методом Чохральского (LTG Gz), оптимизация процесса роста на основе изучения формообразования кристаллов, изучение связи условий роста с дефектообразованием и характеристика полученных кристаллов.

В работе обсуждаются результаты выращивания кристаллов Li_2WO_4 методом LTG Gz, данные рентгенофазового и химического анализа, оптические и люминесцентные свойства выращенных кристаллов.

Научный руководитель — канд. хим. наук В. Н. Шлегель

Построение реконструкций распределения рентгенодифракционной интенсивности в обратном пространстве

К. В. Сопов

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

Существующие методы обработки экспериментальных данных, полученных в современном рентгенодифракционном эксперименте, предназначены для описания дифракции с интенсивными (брэгговскими) пиками, хорошо локализованными в обратном пространстве. Они не подходят для описания дифракции от поликристаллических текстурированных образцов и кристаллов с нарушением дальнего порядка, зачастую являющихся перспективными функциональными материалами. При обработке таких дифракционных картин, имеющих области «размазанной» дифракционной интенсивности, имеет смысл анализировать непрерывное распределение последней в выбранных областях обратного пространства, получаемое путем построения реконструкций.

В настоящее время программы, позволяющие проводить построение объемных или плоских реконструкций, доступны в составе коммерческих пакетов, поставляемых с монокристалльными рентгеновскими дифрактометрами (APEX2, Bruker; CrysAlis, Rigaku). Однако они имеют следующие недостатки: непрозрачность набора применяемых коррекций для пересчета интенсивностей и недостаточную гибкость в задании области построения реконструкции.

В данной работе нами реализована оригинальная программа, позволяющая строить плоские и сферические реконструкции распределения интенсивности в обратном пространстве. Реализована возможность задания точности (степени детализации) реконструкции и переориентации реконструкции в соответствии со специальными направлениями дифракционной картины. Программа была протестирована на монокристаллических, текстурированных и «совершенных» поликристаллических образцах.

В дальнейшем планируется реализовать количественный расчет структурных амплитуд для использования при определении текстуры и структурных особенностей исследуемых образцов.

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

Исследование преобразования морфологии поверхностей подложек GaAs с помощью моделирования

А. А. Спирина

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

В процессе высокотемпературных отжигов полупроводников $A^{III}B^V$ развивается рельеф поверхности и, начиная с температуры конгруэнтного испарения T_c , происходит образование капель металлов III группы. T_c — это температура, выше которой компонент V группы испаряется интенсивнее элемента III группы. Капли металлов интересны с точки зрения их использования в таких технологиях, как капельная эпитаксия и рост нитевидных нанокристаллов. С помощью моделирования процессов отжига GaAs можно исследовать особенности развития рельефа поверхности на атомарном уровне и процессы, приводящие к образованию капель галлия.

При моделировании высокотемпературных отжигов GaAs методом Монте-Карло рассматривались подложки с ориентацией (111)A и (111)B. Получены температурные зависимости скоростей испарения компонент GaAs в широком диапазоне температур. Выделены области конгруэнтного (последнего) испарения и неконгруэнтного испарения (с образованием капель галлия). Показано, что температура конгруэнтного испарения зависит от ориентации подложек: на поверхностях GaAs(111)B T_c меньше, чем на GaAs(111)A. Найдены зависимости T_c от ширины террас вицинальных поверхностей и концентрации поверхностных дефектов. При уменьшении ширины террас и увеличении концентрации вакансий на поверхности величина T_c понижается. Образование капель галлия на поверхности GaAs(111)A происходит вблизи ступеней вицинальных поверхностей, а на GaAs(111)B капли образуются хаотично по всей поверхности подложки.

Показано, что в процессе отжига галлиевые капли ориентированно движутся вдоль поверхности подложек. Выявлено, что причиной движения капель галлия является разная скорость травления фасеток (111)A и (111)B жидким галлием. Получены температурные зависимости скорости движения капель по поверхностям GaAs (111)A и (111)B.

Работа поддержана грантом РФФИ (18-02-00764).

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент Н. Л. Шварц

Cold crucible melting of Ti-Nb alloys

A. Thoemmes

Novosibirsk State Technical University

Titanium alloys are nowadays the most widely used metallic biomaterials for implant applications because of their perfect corrosion resistance, high strength to weight ratio and high biocompatibility [1]. However, the Young's modulus of the currently used Ti-alloys is several times larger than the Young's modulus of human bone. It was reported that the usage of β isomorphous stabilisators like Ta and Nb results in a lower Young's modulus.

In this study, a binary Ti-Nb alloy with a Nb content of 30 mass % (hereafter "mass %" will be referred to as %) were prepared from commercially pure (c.p.) Ti and Nb. The materials were weighted according to the nominal composition and synthesized in a BUHLER arc furnace in an argon atmosphere. The weight loss of the samples during melting was evaluated by weighing the initial materials and the samples after melting. The microstructures were examined using a scanning electron microscope (SEM) Carl Zeiss EVO 50 in back scattered electron (BSE) mode. The elemental composition was checked by Oxford Instruments X-Act energy dispersive X-ray spectrometer (EDX) coupled with SEM. The hardness measurements, an average of 30 readings, were carried out using a WOLPERT Group 402 MVD Vickers hardness tester under a load of 50 g and a dwell time of 10 s.

The weight loss of the sample was found to be 0,09 % which indicates that the composition of the melted alloy was close to the nominal composition. The micrographs obtained by optical microscopy showed that the alloy exhibit a dendritic morphology. The sample exhibit a microhardness of 332 HV_{0,05}. It is assumed that the high cooling rate favors the formation of metastable ω phase.

1. Ti based biomaterials, the ultimate choice for orthopaedic implants — A review / M. Geetha, A.K. Singh, R. Asokamani, A.K. Gogia // Progress in Materials Science. 2009. V. 54. Iss. 3. P. 397–425. Doi: 10.1016/j.pmatsci.2008.06.004.

Scientific Advisor — PhD. I. A. Bataev

**Моделирование гетероэпитаксии Ge на Si
при низкоэнергетическом ионном воздействии**

Фань Гуйлинь

Новосибирский государственный университет

Массивы квантовых точек считаются перспективными для создания наноэлектронных приборов и устройств, таких как лазеры на квантовых точках (КТ), солнечные элементы, матрицы фоточувствительных сенсоров. Интерес представляют методы, позволяющие контролировать размеры КТ и среднее расстояние между ними. В Институте физики полупроводников разработан метод, в котором используется облучение ионами низких энергий (5–200 эВ) в процессе гетероэпитаксиального роста германия на кремнии. Особенность метода состоит в том, что ионы таких энергий эффективно влияют на поверхностные процессы, не нарушая при этом кристаллическую структуру в подложке. В определенных условиях ионное воздействие приводит к увеличению однородности квантовых точек по размерам, уменьшению среднего размера квантовых точек и увеличению их плотности в массиве.

В данной работе методом молекулярной динамики исследуется механизм ионного воздействия. Определено среднее число распыленных атомов и внедренных межузлий на один ион. Построено распределение межузлий по глубине. Построена карта потенциального рельефа в области столкновения иона с поверхностью.

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

**Формирование сплава Ti-(40-45) мас. % Nb
методом селективного лазерного сплавления**

М. А. Химич

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск,
Томский государственный университет

Низкая плотность, высокие прочность и коррозионная стойкость, а также биоинертность титана обуславливают его использование в медицинских приложениях. Известно, что в отличие от чистого титана сплавы, содержащие 40–50 мас. % ниобия, обладают модулем Юнга, сопоставимым с модулем упругости костной ткани. Использование аддитивных технологий (АТ) может значительно снизить стоимость и упростить процесс производства медицинских имплантатов. Методы АТ подразумевают не серийное производство, а формирование единичных изделий индивидуальных форм и размеров. Однако высокие скорости нагрева, плавления, кристаллизации и охлаждения, свойственные АТ, приводят к структурно-фазовым превращениям в оплавленном материале, а следовательно, и в получаемом изделии. Цель данной работы — формирование сплава Ti-(40-45) мас. % Nb методом селективного лазерного сплавления и исследование его структурно-фазового состояния.

Объемные образцы исследуемого сплава были получены на экспериментальной установке ВАРИСКАФ-100 МВС. Их структура и фазовый состав исследовались методами оптической металлографии, растровой электронной и просвечивающей микроскопии, рентгеноструктурного анализа и энергодисперсионной спектроскопии.

Сформированные селективным лазерным сплавлением образцы представляли собой параллелепипеды со сторонами $10 \times 10 \times 4$ мм. Фазовый состав представлен основной β -ОЦК фазой и α'' -фазой, имеющей орторомбическую решетку. Структура представлена равноосными зернами β -фазы, декорированными по границам вытянутыми частицами α'' -мартенсита. Зерна основной фазы имеют слегка повышенное содержание ниобия, а вытянутые и пластинчатые зерна α'' -фазы обеднены ниобием.

Такие особенности указывают на соответствующие условия формирования сплава, а также на высокий уровень внутренних напряжений. Микротвердость полученных образцов сплава составила 6000-7500 МПа, а модуль Юнга варьируется в пределах 58-82 ГПа. Отжиг приводит к релаксации напряжений и формированию равновесной α/α' -фазы, присутствие которой увеличивает модуль Юнга до 100 ГПа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 15-19-00191.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Ю. П. Шаркеев

Исследование структурных особенностей фаз $[(\text{Ni},\text{Co})(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2$

Н. О. Чуклина

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

В современном материаловедении актуальными являются задачи дизайна, получения и структурной характеристики координационных соединений, представляющих из себя твердые растворы замещения по позициям центральных атомов. Такие вещества могут быть использованы для задач разделения или катализа, а также они являются прекурсорами для получения металлических сплавов или оксидных материалов. Разработка методов исследования строения таких сложных веществ может быть проведена с использованием модельных объектов. Одним из классов таких объектов являются нитраты гексааквакомплексов металлов (II) $[M(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2$. Несмотря на простоту строения структурных единиц этих соединений, они обладают фазовым разнообразием и богатым полиморфизмом.

Целью работы является кристаллохимическая систематизация знаний об этих соединениях. Задачи, поставленные в данной работе: восполнение недостающих структурных данных; определение возможности образования твердых растворов и исследование особенностей их локальной организации.

В работе были определены структуры $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2 \cdot 2S$ с $S = \text{H}_2\text{O}$ ($P-1$; $294,73 \text{ \AA}^3$) и $S = \text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ ($P-1$; $449,2 \text{ \AA}^3$). Их анализ позволил выделить структурный фрагмент — слой, общий для всех известных структур, содержащих $[M(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ и NO_3^- .

Выделение общего структурного фрагмента позволило предположить возможность образования твердых растворов, структурная характеристика которых позволит глубже понять влияние конкретных катионов на локальную организацию структуры. Нами начаты исследования фазовой диаграммы $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2 - [\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2 - \text{H}_2\text{O}$. Для фаз, выявленных в ходе исследования, планируется проведение РСА с целью обнаружения появления сверхструктурной организации в кристаллических структурах или наличия локального упорядочения «альтернативных» структурных фрагментов.

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

**Создание композиционных материалов (NI-AL, AL-TI)
для использования в летательных аппаратах**

С. Ю. Шелепова

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

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

Многослойный композит Al-Ni получен с помощью метода холодной сварки [1]. В результате появляется фаза Ni₃Al. По итогам работы можно сделать выводы, холодная сварка является подходящим методом получения интерметаллида на основе Ni₃Al.

Многослойный композит Al-Ti изготовлен сваркой взрывом [2]. По результатам анализа обнаружены фазы Al₂Ti и Al₃Ti, имеющие ГЦК решетку. Т. е. этот материал сможет работать в широком диапазоне температур. TiAl₂ — обладает хорошими свойствами при низких температурах, TiAl₃ — хорошие свойства при высоких температурах.

1. *Корнилов И. И.* Никелид титана и другие сплавы с эффектом «памяти» / И. И. Корнилов, О. К. Белоусов, Е. В. Качур. М.: Наука, 1977. 180 с.

2. *Павлюкова Д. В.* Структура и механические свойства слоистых материалов на основе титана и алюминия, полученных по технологии сварки взрывом и дополнительной термической обработки: автореф. дис. ... канд. техн. наук. Новосибирск: НГТУ, 2011. 19 с.

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

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 577.352.2

Механизм нарушения функционирования бактериальных мембран под воздействием пептидов-антибиотиков

Е. Ф. Афанасьева

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

Антимикробные пептиды (АМП) являются перспективными лекарственными препаратами, их действие основано на разрушении внешней мембраны бактериальной клетки. На основе природных АМП разрабатываются синтетические аналоги, которые различаются по избирательности и эффективности воздействия на микроорганизмы.

В работе изучалось влияние природного АМП трихогина (Tri GA IV) и его неактивного аналога (Leu⁴-Tri) на нанокластеры гостевых молекул стеариновых кислот в модельной фосфолипидной мембране. Стеариновые кислоты являются одним из типов жирных кислот, играющих ключевую роль в липидном гомеостазе клетки. Исследование проводилось методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) спиновых меток. Импульсные методы ЭПР позволяют изучать магнитные диполь-дипольные взаимодействия неспаренных электронов спиновых меток в нанометровом диапазоне расстояний между ними.

Ранее нами было обнаружено, что пептиды в биологической мембране перехватывают нанокластеры стеариновых кислот [1]. В настоящей работе установлено, что Tri GA IV и Leu⁴-Tri перехватывают стеариновые кислоты с разной эффективностью.

Известно, что Tri GA IV имеет форму спирали и при достижении пороговой концентрации переходит в трансмембранное состояние. Предполагается, что Leu⁴-Tri имеет форму «подковки» и располагается на мембране планарно независимо от концентрации. В докладе обсуждается возможная связь данных особенностей строения пептидов и эффективности захвата ими стеариновых кислот.

1. *Afanasyeva E. F., Syryamina V. N., Dzuba S. A.* Communication: Alamethicin can capture lipid-like molecules in the membrane // *The Journal of chemical physics.* 2017. Т. 146. №. 1. Р. 011103.

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

Трехкубитовый вентиль TOFFOLI на основе трехчастичного резонанса Фёрстера в атомах рубидия

И. Н. Ашкарин

Новосибирский государственный университет,

Институт физики полупроводников

им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск

В настоящее время значительно возрос интерес к реализации квантовых вычислений. Ультрахолодные нейтральные атомы могут быть использованы в качестве кубитов — логических элементов квантового компьютера. Одним из возможных вариантов выполнения многокубитовых квантовых вентилях с использованием таких атомов является применение электрически настраиваемых резонансов Фёрстера в высоковозбужденных (ридберговских) атомах. Такие схемы не требуют больших энергий диполь-дипольного взаимодействия, что позволяет ожидать повышения точности квантовых вентилях в реальных экспериментальных условиях.

Использование двухчастичных резонансов Фёрстера для реализации вентилях CZ и CNOT было рассмотрено в работе [1]. В работе [2] были экспериментально продемонстрированы трехчастичные резонансы Фёрстера в малом ансамбле ($N = 3-5$) атомов. Таким образом, была показана принципиальная возможность наблюдения трехчастичных резонансов в ансамблях нескольких ридберговских атомов, а также создания на основе данного эффекта систем управления трехчастичными взаимодействиями и, как следствие, универсальных квантовых вентилях.

Целью данной работы является разработка принципиальной схемы квантового вентиля TOFFOLI, основанного на трехчастичном резонансе Фёрстера в атомах Rb или Cs, а также оптимизация данной схемы для повышения точности квантовых вычислений.

В результате работы разработана схема квантового ключа TOFFOLI с использованием трехчастичных резонансов Фёрстера $80P_{3/2}81P_{3/2}81P_{3/2} \rightarrow 80S_{1/2}81P_{3/2}82S_{1/2} \rightarrow 80S_{1/2}82S_{1/2}81P_{3/2}$ в атомах Rb. В результате оптимизации схемы удалось добиться точности квантовых операций свыше 98 %.

1. *Beterov I. I. et. al.* Two-qubit gates using adiabatic passage of the Stark-tuned Förster resonances in Rydberg atoms // Physical review. 2016. V. 94.

2. *Tretyakov D. B. et. al.* Observation of the Borromean Three-Body Förster Resonances for Three Interacting Rb Rydberg Atoms // Phys. Rev. Lett. 2017. V.119.

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

**Теоретическое исследование новых каналов
термического разложения алифатических нитросоединений**

А. Бийбосунов

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

Алифатические нитросоединения представляют значительный интерес как прототипы практически важных высокоэнергетических соединений. Установление взаимосвязи химической структуры и термической стабильности и чувствительности к внешним воздействиям является важнейшей задачей исследования энергетических соединений. Для решения этой задачи необходимо знать кинетику и механизм первичных реакций термолита этих соединений. По причине трудности проведения экспериментов с энергетическими соединениями высокоточные квантохимические расчеты представляют собой прекрасную альтернативу эксперименту. Для расчета констант скорости элементарных реакций необходимо знание термодинамических потенциалов реагентов и переходных состояний.

В данной работе на примере двух изомеров нитропропена (НП) и нитроэтилена (НЭ) проведено теоретическое исследование не изученного ранее канала термического разложения в газовой фазе, протекающего через внутримолекулярное присоединение нитрогруппы. На возможность такого процесса указывает экспериментально определенное распределение продуктов термолита. В ходе этой реакции возможно образование и последующее разложение циклического интермедиата с образованием дирадикальных частиц. Свойства стационарных точек на ППЭ для разложения дирадикальных интермедиатов рассчитаны много-конfigurационными методами CASSCF/NEVPT2 и DLPNO-CCSD(T), с помощью последнего можно эффективно и точно аппроксимировать высокоточный CCSD(T) расчет.

Установлено, что для типичных реакций разложения нитросоединений среднее расхождение электронных энергий, рассчитанных методами DLPNO-CCSD(T) и CCSD(T), составляет около 1 ккал/моль. Были локализованы переходные состояния (ПС), ведущие к образованию дирадикального интермедиата, а также ПС для его дальнейшего распада, и рассчитаны соответствующие активационные барьеры данных реакций в случае НЭ и изомеров НП.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев,
д-р хим. наук проф. Н. П. Грицан

Время-разрешенная флуоресценция карбоксиангидразы Б при равновесной денатурации мочевиной

М. А. Герасимова, Н. Е. Карузина, О. О. Лащук
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Исследование посвящено экспериментальному определению промежуточных стадий разворачивания белковых макромолекул на примере карбоксиангидразы Б. Считается, что метод равновесной денатурации не позволяет зарегистрировать многостадийное разворачивание белка в отличие кинетических экспериментов. Но время-разрешенная флуоресценция может предоставить дополнительные информативные параметры для анализа изменения структуры глобулы даже при равновесной денатурации.

В работе проанализированы стадии денатурации карбоксиангидразы Б по временам жизни триптофановой флуоресценции. Объектами исследования являлись: карбоксиангидраза Б дикого типа и мутанты L139A и A53C/A76C. Равновесную денатурацию проводили с помощью мочевины (концентрация 0–8,5 М, инкубирование в течение не менее 20 часов при комнатной температуре). Для регистрации флуоресценции белков при стационарном и импульсном возбуждении использовали спектрофлуориметр Fluorolog 3–22 (Horiba Jobin Yvon, США). Измерения проводили в диапазоне 305–419 нм. Спады флуоресценции описывали как сумму экспоненциальных компонент, определяя таким образом времена жизни флуоресценции белка.

Для каждого белка были получены три времени жизни триптофановой флуоресценции. При различных концентрациях мочевины времена изменялись в пределах: $\tau_1 = 4,9\text{--}5,5$ нс, $\tau_2 = 1\text{--}2$ нс, $\tau_3 < 0,3$ нс. Установлено, что кривые перехода, построенные по τ_1 и τ_2 , отличаются от переходов, регистрируемых по параметрам стационарной флуоресценции (I_{335} , I_{320}/I_{360}). Найденные по временам жизни середины переходов находятся в хорошем соответствии с кинетическими данными, согласно которым разворачивание карбоксиангидразы Б проходит через образование двух промежуточных состояний. Времена жизни мутанта с дополнительной дисульфидной связью (A53C/A76C) в присутствии 1,4-дителиотреитола оказались близки в пределах погрешности к временам жизни флуоресценции карбоксиангидразы дикого типа.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент Е. В. Немцева

Термическое разложение и горение полиоксиметилена

Р. К. Глазнев

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

Синтетические полимеры получают все большее распространение в современном мире. Их используют при производстве резины, клея (эпоксидная смола), пленок (полиэтилен, полипропилен), красок (полиакрилат), пластиков (поливинилхлорид) и т. д. Одним из ведущих полимерных конструкционных материалов является полиоксиметилена (ПОМ) $[-CH_2O-]_n$, который из-за своих характеристик применяется, например, в качестве заменителя металла в различных механизмах, а также в высоковольтной электротехнике для изготовления корпусов. В связи с этим возрастают требования к пожарной безопасности его использования.

Цель работы — изучение процесса термического разложения полиоксиметилена и основных характеристик процесса его горения (линейная скорость распространения пламени по горизонтально расположенной пластине полимера, массовая скорость горения, тепловая и химическая структура диффузионного пламени).

Методом термогравиметрического анализа были получены кинетические параметры термического разложения ПОМ. Массовая скорость горения пластин ПОМ ($\rho = 1,4 \text{ г/см}^3$, $5,5 \times 90 \times 195 \text{ мм}^3$) в воздухе при атмосферном давлении измерялась с помощью электронных весов, на которых располагался горящий образец, линейная скорость определялась путем обработки видеозаписи. Тепловая структура пламени была получена тремя Pt-PtRh (10%) термопарами ($\varnothing = 50\text{--}80 \text{ мкм}$), две из которых располагались в конденсированной фазе образца, а одна, с антикаталитическим покрытием SiO_2 , в газовой. С помощью программируемого 3D-сканирующего механизма было получено двумерное распределение температуры в газовой фазе, определены температурные градиенты вблизи поверхности образца и оценены тепловые потоки из газовой фазы на поверхность образца при горении.

Измерение профилей концентраций химических веществ производилось зондовым методом с помощью масс-спектрометрического комплекса Hidden HPR 60. Микрозонд перемещался относительно фронта пламени с помощью 3-D сканирующего механизма. Были зарегистрированы профили основных компонентов пламени ПОМ: CH_2O , CO_2 , CO , H_2O , O_2 , N_2 .

Полученные данные были использованы при создании модели горения полиоксиметилена.

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

Спектроскопия ЯМР сыворотки крови и ткани мозга мышей линии NODSCID с сахарным диабетом 1-го типа

А. В. Глинских

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

Метод ЯМР-спектроскопии широко применяется при изучении живых систем в норме и патологии. Прогресс в изучении «метаболических заболеваний» напрямую сопряжен с результатами «омиксных» технологий. Сахарный диабет 1-го типа (СД1) относится к группе метаболических заболеваний, в основе которого лежит нарушение углеводного обмена. Ввиду того, что лабораторные мыши являются наиболее востребованным объектом в биомедицинских исследованиях, изучения метаболического профиля биологических тканей лабораторных мышей в модели СД1 ранее выполнено не было. В связи с этим представляется актуальным использование одного из основных методов метаболомики — спектроскопии ЯМР.

В работе исследованы образцы сыворотки крови и ткани головного мозга мышей линии NODSCID. Мыши были разделены по полу и далее на две группы: контроль / диабет. По результатам спектроскопии ЯМР было идентифицировано 35 метаболитов, 20 из которых различаются по концентрации в группах контроль / диабет, у самцов и у самок. Более того некоторые метаболиты имеют отличия не только по средним значениям, но и не перекрываются диапазонами индивидуальных значений. У самцов к таким метаболитам относятся: глюкоза, аспартат, мио-инозитол, ацетил-карнитин, у самок — глюкоза, аспартат, мио-инозитол и глицерол.

Ввиду значительных различий в концентрациях метаболитов крови групп контроль / диабет задача получения данных о метаболизме тканей головного мозга потребовала проведения дополнительного исследования, выполненного на двух группах: ткань головного мозга в нативном состоянии и после перфузии (удаление крови из ткани). В результате было установлено, что метаболические профили головного мозга с присутствием крови и в ее отсутствии не отличаются между собой, что позволило провести исследование нативных образцов ткани головного мозга групп контроль / диабет.

Исследование предоставляет новые знания о метаболизме тканей мышей в условиях протекания СД1 и демонстрирует эффективность применения спектроскопии ЯМР для дальнейшего развития метаболомики.

Научный руководитель — канд. биол. наук А. Е. Акулов, Е. А. Зеленцова

**Квантовохимические расчеты параметров спин-гамильтониана
бидерных комплексов марганца (II) и никеля (II)
с нитронил-нитроксильными и иминонитроксильными дирадикалами**

Д. Е. Горбунов, Е. М. Кадиленко

Новосибирский государственный университет,

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Дизайн и исследование молекулярных магнетиков является важной задачей в связи с перспективой их использования в микроэлектронике и спинтронике. В последнее время в области молекулярного магнетизма все чаще используются методы квантовой химии. С одной стороны, исходя из расчетных данных, можно корректно выбрать модель и объяснить экспериментальные магнитные свойства. В свою очередь на основе анализа зависимости расчетных параметров спин-гамильтониана от химической структуры гипотетических соединений можно предложить наиболее перспективные блоки молекулярных магнетиков.

Основная задача данной работы — установление электронной структуры и расчет параметров спин-гамильтониана, описывающего магнитные свойства недавно синтезированных бидерных комплексов марганца и никеля, выбор адекватной модели и анализ экспериментальных температурных зависимостей магнитной восприимчивости. Объектами экспериментального исследования наших коллег из НИОХ СО РАН были сокристаллы $[\text{Mn}_2(\text{CF}_3\text{CO}_2)_2(\text{hfac})_2(\text{DR1})_2]$ и $[\text{Mn}_2(\text{CF}_3\text{CO}_2)_2(\text{hfac})_2(\text{DR2})_2]$ и кристаллы $[\text{Ni}_2(\text{CF}_3\text{CO}_2)_2(\text{hfac})_2(\text{DR2})_2]$, где DR1 и DR2 — имино- и нитронил-нитроксильные дирадикалы.

Расчеты обменных взаимодействий парамагнитных центров дидерных кластеров проводили как неограниченным по спину методом нарушенной симметрии в варианте теории функционала плотности, так и многоконфигурационными методами (CASSCF/NEVPT2). Для расчетов g- и D- тензоров парамагнитных центров также использовали методы теории функционала плотности и многоконфигурационные методы (CASCI).

Основные расчеты для комплексов марганца были выполнены ранее, в данной работе проведены расчеты параметров для никелевого комплекса. При использовании всей совокупности расчетных данных были выбраны модели, описывающие магнитные свойства сокристаллов комплексов Mn(II) и кристаллов Ni(II) и проведено моделирование температурных зависимостей магнитной восприимчивости поликристаллических образцов, получено хорошее согласие расчетов с экспериментом.

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

**Влияние алюминия на характеристики
эмульсионных ВВ при детонации**

Д. А. Данилко

Новосибирский государственный университет

Эмульсионное взрывчатое вещество (ЭмВВ) — одно из самых распространенных промышленных ВВ. В составе ЭмВВ часто используется порошок алюминия в количестве до 15 % по массе. Добавление алюминия увеличивает мощность взрывчатой композиции, а также влияет на ее чувствительность и стабильность. Несмотря на широкое использование алюминизированных ЭмВВ, влияние алюминия на детонационные характеристики ЭмВВ полностью не изучено. В работе [1] получены профили давления и температуры для различного содержания алюминия, из которых сделан вывод, что алюминий реагирует за плоскостью Чепмена-Жуге.

В данной работе проведено сравнение наших экспериментальных данных с известными из научной литературы. Сопоставление профилей давления, температуры и электропроводности позволяет предложить ход реакций с алюминием, отличный от предложенного в работе [1].

1. *Lefrancois A., Grouffal J-V., Bouinot P., Mencacci S.* Temperature and pressure measurements comparison of the aluminized emulsion explosives detonation front and products expansion // Proc. 12th Symposium (Intern.) on Detonation. 2002. P. 432–439.

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

**Исследование комбинационного рассеяния света
на везикулах фосфолипидов DMPC и DLPC**

Ю. В. Зайцева

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

Липидный бислои является структурной основой любой клеточной мембраны, поэтому его изучение — одна из важнейших задач современной биофизики. В частности, большой интерес исследователей вызывает основной фазовый переход липидного бислоя из упорядоченного гелевого состояния в разупорядоченное флюидное, связанный с резким изменением конформационных состояний липидных хвостов. Однако конформационные состояния липидных хвостов постепенно меняются и при температурах ниже температуры основного фазового перехода. Одним из методов, позволяющих исследовать зависимость конформационных состояний липидных хвостов от температуры, является комбинационное рассеяние света (КРС).

Данная работа посвящена исследованию спектров КРС на везикулах двух насыщенных фосфатидилхолинов — DMPC и DLPC. Было исследовано температурное поведение линии валентных C-C колебаний на частоте 1130 см^{-1} , так как она чувствительна к конформационным состояниям липидных хвостов. В работе показано, что для описания конформационных состояний DMPC и DLPC в состоянии геля можно применять модель с двумя возбужденными состояниями липидного хвоста, предложенную в [1].

Также показано, что линии в спектре КРС от везикул DMPC меняются с температурой подобно ранее изученным липидам, а в спектрах от DLPC наблюдаются нехарактерные для других липидов особенности. Спектры КРС от везикул DLPC резко меняются не только при температуре основного фазового перехода (271 К), но и при температуре 260 К. Вероятнее всего, это связано с переходом липидного бислоя в другую фазу, нереализуемую для более длинных фосфатидилхолинов.

1. *Dmitriev A. A., Surovtsev N. V.* // J. Phys. Chem. B. 2015. V. 119. P. 15613–15622.

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

Применение спектроскопии рассеяния Мандельштама — Бриллюэна для определения вязкости биологических систем

Ю. А. Карпегина

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

Любая биологическая система состоит из различных взаимодействующих между собой частей, в которых протекает множество химических и биологических процессов. Локальная вязкость в значительной степени определяет скорости биохимических реакций. Но в настоящее время для определения вязкости раствора не существует быстрой неинвазивной методики, требующей малого количества исследуемого материала, которая бы могла охарактеризовать вязкость в локальной области. Рассеяние Мандельштама — Бриллюэна (РМБ) позволяет проводить быстрые измерения вязкоупругих параметров материала без оказания механического влияния на исследуемый образец. В настоящей работе исследовалась возможность применения спектроскопии рассеяния Мандельштама — Бриллюэна для определения вязкости биологических систем.

В ходе работы были получены спектры РМБ водных растворов аминокислот, белков, глицерина, сахарозы различных концентраций, а также многокомпонентных растворов цитоплазматической жидкости и белка куриного яйца. Из анализа полученных спектров были определены позиции и ширины линий РМБ для каждого образца. Также были измерены вязкости исследуемых растворов с применением капиллярного вискозиметра. Была изучена корреляция между позицией, шириной линии РМБ и вязкостью раствора. В результате показано, что параметры линий рассеяния Мандельштама-Бриллюэна отражают изменение вязкости водных растворов. Но при оценке вязкости по параметрам линии РМБ необходимо учитывать состав исследуемого раствора.

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

Исследование образования и фотостабильности хелатных комплексов деферазирокса с ионами металлов

Л. А. Кичигина

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

Деферазирокс (DFRX) — низкомолекулярное хелатирующее соединение, применяющееся в медицине для лечения избытка железа в организме, вызванного частыми переливаниями крови, генетически наследственными заболеваниями (талассемия) и др. Хелаторами являются молекулы, которые способны образовывать с ионами металлов комплексы через нековалентные связи. Деферазирокс одобрен для применения в США с 2005 года, став первым пероральным хелатором, однако по статистике стоит на втором месте по летальным исходам, причины которых, к сожалению, так и остаются невыясненными. Хелатные комплексы зачастую обладают фотоактивностью, что может являться одной из возможных причин токсичности медикамента.

Таким образом, в работе были поставлены задачи: исследовать механизм и кинетику комплексообразования деферазирокса с ионами железа и цинка; изучить фотостабильность хелатных комплексов. Данные задачи решаются с помощью методов оптической спектроскопии, ЯМР-спектроскопии и химической поляризации ядер (ХПЯ).

Результаты, полученные методом ЯМР и оптической спектроскопии, показали, что на первом этапе ион металла присоединяется к кислотной группе DFRX, а затем к хелатному центру.

Для выяснения фотохимической активности как DFRX, так и его комплексов с ионами металлов были использованы методы ЯМР и ХПЯ. Исследовалось фотоиндуцированное образование свободных радикалов при облучении DFRX и его комплексов с ионами Fe^{3+} и Zn^{2+} эксимерным лазером на длине волны 308 нм, а также с помощью ртутной лампы в УФ- и видимом диапазоне. Дополнительно исследована возможность фотохимических реакций DFRX в присутствии донора электронов NADH и акцептора электронов AQDS. Однако ни в одном из случаев ни радикальных интермедиатов, ни продуктов реакции обнаружено не было, что указывает на фотохимическую стабильность деферазирокса и его хелатных комплексов как в отсутствие, так и в присутствии доноров или акцепторов электрона.

Научные руководители — д-р хим. наук Н. Э. Поляков, В. А. Тимошников

Спиновая динамика в экспериментах по индуцируемой ортодейтерием поляризации ядер

В. П. Козиненко

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

Метод ODIP (OrthoDeuterium Induced Polarization) является одним из методов создания гиперполяризации в системах ядерных спинов. Усиление сигнала в методе ODIP происходит за счет конверсии в спиновую намагниченность неравновесной заселенности ядерных спиновых состояний в молекуле ортодейтерия. Данный метод может использоваться при изучении изотопных эффектов в реакциях каталитического гидрирования. Ядра дейтерия имеют спин, равный 1, — в результате этого спиновая динамика имеет более сложный характер, чем в случае протонов, имеющих спин $\frac{1}{2}$, в экспериментах по ИППЯ (индуцируемой параводородом поляризации ядер). Поэтому важным шагом для применения метода ODIP является проведение экспериментов аналогичных основным экспериментам с ИППЯ.

В данной работе проведено теоретическое и экспериментальное исследования спиновой динамики ODIP в условиях эксперимента PASADENA [1], ALTADENA [2] и OPSY [3]. Рассчитаны нутационные кривые (зависимости интенсивностей линий ЯМР от угла поворота намагниченоости) для поляризации дейтерия, определен тип спектра в этих экспериментах. Полученные экспериментальные спектры демонстрируют усиление сигналов ^2H -ЯМР за счет ODIP. Проведена оптимизация экспериментальных условий (концентрации, температуры образца) для воспроизводимого получения поляризации типа ODIP. Несмотря на экспериментальные трудности (связанные с низкой степенью обогащения ортодейтерия, быстрой спиновой релаксацией ядер дейтерия и малыми величинами констант спин-спиновых взаимодействий), получены усиления сигналов ЯМР порядка 20 при проведении эксперимента в сильном поле. Получены усиления сигналов при создании неравновесной поляризации спинов в слабом поле.

Несмотря на трудности в применении, метод ODIP позволяет расширить круг приложений спиновой гиперполяризации и работать с ядрами дейтерия.

-
1. Bowers C. R., Weitekamp D. P. // J. Am. Chem. Soc. 1987. P. 5541–5542
 2. Pravica M. G., Weitekamp D. P. // Chem. Phys. Lett. 1988. P. 255–258.
 3. Aguilar J. A., Elliott P. I. P. // Chem. Commun. 2007. P. 1183–1185.

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

Исследование воздействия электромагнитного излучения терагерцового диапазона на клеточные мембраны

Е. С. Кононенко

Новосибирский государственный университет

Терагерцовые (ТГц) технологии связаны с появлением множества потенциальных применений в области медицины, безопасности и научных исследованиях. Одной из целей изучения данной сферы является определение безопасной меры излучения для организма и предсказание предварительной реакции на облучение. Для изучения данного вопроса необходимо получить результаты воздействия излучения на общедоступный биологический объект, который послужит тестом для представления предположительных результатов влияния лазера.

В работе исследовалось воздействие ТГц лазерного излучения на эпидерму *Allium* сера (лук репчатый), которое показало, что терагерцовое излучение способно вызывать специфические изменения в морфологии клеток. Облучение клеток лука проводилось с использованием не сфокусированного новосибирского лазера на свободных электронах. Длина волны лазера — 131,1 мкм, поверхностная плотность мощности — 20 Вт/см². Время экспозиции составило 10 секунд. Для сравнения было проведено исследование образца подвергнутого экспозиции CO₂ лазером. Лазер использовался в импульсном режиме, длина волны излучения 10,6 мкм (30 ТГц) принадлежит инфракрасной области, мощность 1 Дж, 1 см².

Результаты исследования получены при помощи оптического CarlZeissAxioObserver и атомно-силового NT-MDT NTEGRA Prima микроскопов. Проведено морфологическое описание контрольных и облучённых образцов. В результате экспозиции тонкой пленки репчатого лука CO₂ лазером были обнаружены поры мембраны клетки. Облучение терагерцовым излучением привело к увеличению размеров клетки, выявлены экзосомы и поры на поверхности клеточной мембраны.

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

Применение ЭПР-спектроскопии спинового зонда для изучения адсорбционных центров металлоорганических каркасов ZIF-8 и MFM-300

Д. Л. Кузьмина

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

Металлоорганические каркасы (МОК) — активно развивающееся направление в химии, новый вид пористых сред, который привлекателен благодаря огромному модификационному потенциалу. Одни из наиболее интересных свойств МОК — огромная величина площади поверхности, наличие активных центров адсорбции. Считается, что МОК могут стать прорывным решением в вопросе адсорбции опасных газов, образующихся в процессе энергопроизводства, а также парниковых газов.

МОК — это новый вид координационных полимеров, упорядоченная структура которых представляет собой соединенные органическими линкерами металлические узлы (в виде ионов или кластеров металлов).

Адсорбцию и поведение газов внутри МОК можно исследовать методом спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) с применением спиновых зондов. Исследуя ЭПР спектры адсорбированных в каркас нитроксильных радикалов (ТЕМРО, ТЕМРО-d₁₈), можно делать выводы об адсорбционных свойствах МОК.

Среди различных МОК наибольшее внимание исследователи уделяют термически и химически стабильным системам, как например ZIF-8 (Zeolitic imidazolate framework) и MFM-300. На каркас ZIF-8 адсорбировались CO₂, N₂, O₂ газы вместе с небольшой концентрацией радикала ТЕМРО (1 мол./1000 ед. яч.). Благодаря исследованиям СВ ЭПР X-диапазона при температурах образца от 80 до 300 К, были получены параметры подвижности молекулярного зонда, что совместно с результатами расчетов молекулярной динамики выявило конкуренцию молекул ТЕМРО и молекул CO₂ за одинаковые центры адсорбции [1].

Каркас MFM-300 обладает поразительной химической устойчивостью к адсорбции NO_x газов. Важно понять, как выбор металла (Al, Ga или In) влияет на адсорбционные свойства и активность ОН-групп каркаса. Изучение Сигнала Спинового Эха ЭПР в Q-диапазоне, ENDOR и СВ ЭПР в X-диапазоне показывают, что адсорбированный зонд находится в двух фазах: мобильной и неподвижной, при этом поведение подвижной фракции зависит от металла использованного для образования структуры.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. М. Шевелева

**Исследование спиновой поляризации фуллеренов РСВМ
и C_{60} методом ЭПР с временным разрешением**

И. В. Курганский

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

Ионные жидкости обладают множеством свойств, выделяющих их среди других растворителей. Например, низкое давление насыщенных паров сделало ионные жидкости перспективным растворителем для «зеленой» химии. Однако большинство свойств веществ этого класса определяется их наноструктурой. Именно поэтому важно исследовать особенности формирования гетерогенностей в ионных жидкостях на наномасштабах. Для этих целей, к примеру, можно использовать метод ЭПР спиновых зондов, обладающий хорошей чувствительностью на масштабе размера молекулы.

Целью работы является изучение динамики химической поляризации электронов фуллеренов C_{60} и РСВМ в ионных жидкостях. Результаты данной работы позволят использовать фуллерены как спиновые зонды на гетерогенности в ионных жидкостях. Исследования проводились при помощи ЭПР-спектрометра с временным разрешением, работающего в X-диапазоне.

В ходе работы были получены ВР ЭПР-спектры фуллеренов РСВМ и C_{60} в ИЖ $[C_{10}mim][BF_4]$, $[bmmim][PF_6]$, $[bmim][BF_4]$, а также в толуоле и орто-терфениле. Было установлено, что спектры C_{60} и РСВМ обладают различной чувствительностью к использованному растворителю. Также был проведен сравнительный анализ спиновой динамики РСВМ в $[C_{10}mim][BF_4]$ и орто-терфениле в диапазоне температур $80 \div 295$ К.

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

Исследование влияния структуры углеродного пористого материала на способность к внедрению лития

Л. Л. Лаптева

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

Изучение взаимодействия лития с наноразмерными углеродными частицами является актуальной задачей, так как их использование в литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах может улучшить их электрохимические характеристики. Пористые углеродные материалы вызвали повышенный интерес в этом смысле, так как такие материалы легко производить, они имеют высокую проводимость, химическую стабильность, пористость и большую площадь поверхности. Исследуемым материалом являлся пористый углерод, синтезированный из разных веществ: толуола, этанола и ацетонитрила методом химического осаждения из газовой фазы.

В данной работе было проведено *in situ* исследование электронного строения мезопористого углерода после вакуумного термического напыления лития методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения (NEXAFS) для определения особенностей электронных взаимодействий между углеродом и литием. Изменения в РФЭС С 1s-спектрах литированных образцов свидетельствуют, что литий распределен в объеме образца неравномерно и существуют по крайней мере два различных состояния углерода. NEXAFS исследование литированных образцов выявило понижение относительной интенсивности π^* -резонанса в спектре С К-края по сравнению со спектрами до литирования. С помощью просвечивающей электронной микроскопии выявлено, что образец из толуола более графитизирован и состоит из капсул, а образец из этанола имеет «губчатую» структуру. Из спектроскопии комбинационного рассеяния света было установлено, что пористый углерод обладает большим количеством дефектов. Для проведения экспериментов по литиевой интеркаляции собирались ячейки в перчаточном боксе в атмосфере аргона, где один из электродов — металлический литий, а второй — исследуемый углеродный материал. Емкости ячеек измерялись при различных плотностях тока. Для определения проводимости электродов так же измерялся электрохимический импеданс при изменении частоты входного сигнала от 100 кГц до 10 мГц.

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

Метаболомный анализ плазмы крови пациентов с диабетическими язвами

А. Д. Мельников

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

Диабетическая язва является одним из основных осложнений при развитии сахарного диабета и может, в конечном итоге, привести к ампутации конечностей. Сравнение метаболомного состава плазмы крови диабетических пациентов с язвами и без них может пролить свет на молекулярные механизмы возникновения язв, а также выявить потенциальные биомаркеры для их раннего прогнозирования.

Для изучения низкомолекулярного состава плазмы в последнее время активно развивается метаболомный подход, при котором производится детектирование и анализ большого количества (сотни и тысячи) неизвестных метаболитов. Однако богатый метаболомный состав плазмы крови человека влечет за собой трудности, связанные с корректным выявлением зависимостей между образцами контрольной диабетической группы и группы с развитыми язвами.

Целью данной работы являлся поиск метаболитов в плазме, концентрация которых изменяется при развитии диабетических язв. Для этого был разработан ВЭЖХ-МС метод, позволяющий хорошо разделить метаболиты по времени удерживания на колонке и зарегистрировать большое число метаболитов на масс-спектрометре. Для анализа полученных ВЭЖХ-МС данных был разработан пакет прикладных программ на языках программирования R и Python. Статистический анализ включал в себя алгоритмы машинного обучения на основе Support Vector Machine (SVM).

В результате данной работы выявлен ряд метаболитов, концентрация которых изменяется при развитии диабетических язв. В дальнейшем планируется определить нарушения в биохимических циклах, вызвавшие изменения в метаболомном составе плазмы. Также результаты планируется использовать при поиске биомаркеров для ранней диагностики развития диабетических язв.

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

**Динамика основной цепи пептида Лактаптина
по данным ^{15}N релаксационных измерений и HETNOE**

С. С. Овчеренко

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

Лактаптин — рекомбинантный аналог протеолитического фрагмента белка к-казеина молока человека, обладает противоопухолевой активностью и является также мембраноактивным пептидом, способным к прямому проникновению в клетки эукариот. Казеиновые белки относятся к классу белков, которые не обладают упорядоченной структурой (IDP). Ранее было продемонстрировано, что Лактаптин также является IDP. Одним из способов характеристики IDP [1] является нахождение участков, в которых присутствует остаточная структура, т. е. наблюдаются те или иные отклонения от поведения идеальной, лишенной какой-либо структуры цепи (random coil).

Анализ данных релаксации амидных атомов азота ^{15}N , измеряемых с помощью методов ЯМР, дает возможность определить динамику основной цепи белка. При этом особой чувствительностью к быстрым локальным движениям обладают значения HETNOE, что позволяет легко идентифицировать участки белка с различной локальной подвижностью.

В данной работе измерены параметры релаксации T_1 , T_2 и значения HETNOE для атомов азота ^{15}N основной цепи Лактаптина. В результате были выявлены фрагменты полипептидной цепи, отличающиеся локальной подвижностью. Сопоставление данных релаксационных измерений и метода SSP [2], используемого для предсказания остаточной структуры экспериментальные значения химических сдвигов, позволило выделить более упорядоченный участок на N-конце пептида со склонностью к образованию альфа-спиралей.

Финансовая поддержка РФФ (грант 14-14-00922).

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

2. Marsh J. A. et al. Sensitivity of secondary structure propensities to sequence differences between α - and γ -synuclein: Implications for fibrillation // Protein science. 2006. Т. 15. №. 12. P. 2795–2804.

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

Изучение влияния изомерных метиловых и этиловых эфиров на горение модельного дизельного топлива

К. Н. Осипова

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

Основными компонентами биодизеля являются метиловые и этиловые эфиры жирных кислот. Только этиловые эфиры можно считать полностью возобновляемыми, так как этанол также производится из растительного сырья. Данная работа посвящена изучению влияния изомерных метилового и этилового эфира — метилгексаноата (МНе) и этилпентаноата (ЕРе) — на горение дизеля. В качестве модельного дизельного топлива была взята смесь н-гептана и толуола в объемном соотношении 7/3. Изучалась структура трех богатых ($\varphi = 1,6$) пламен: н-гептан/толуол/ O_2 /Ar, МНе/н-гептан/толуол/ O_2 /Ar и ЕРе/н-гептан/толуол/ O_2 /Ar.

Стабилизация пламени осуществлялась на плоской горелке при атмосферном давлении. Для изучения структуры пламени использовался метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Профили температуры измерялись с помощью микротермопар.

В ходе эксперимента были измерены профили мольных долей реагентов, основных продуктов горения (топлива, H_2 , O_2 , CO и CO_2) и промежуточных соединений $-C_2$, C_3 , C_4 — углеводороды, кислородосодержащие углеводороды, а также циклические соединения.

Для моделирования структуры пламен использовалась программа PREMIX из пакета CHEMKIN-II. Для моделирования структуры пламен смесей н-гептан/толуол и МНе/н-гептан/толуол использовались два механизма, взятых из литературы. Для смеси н-гептан/толуол/ЕРе механизм был составлен в рамках данной работы.

Данные моделирования были сопоставлены с результатами эксперимента. Наиболее значительные расхождения экспериментальных и численных данных наблюдаются для таких интермедиатов, как CH_3 , C_4H_2 и C_4H_4 .

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

**Исследование молекулярной подвижности липидов
в модельных липидных мембранах
в присутствии природных олиго- и полисахаридов методом ЯМР**

Е. Д. Парамонова

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

В последние десятилетия развитие фармацевтической области идет не столько по пути разработки новых лекарственных соединений, сколько в направлении улучшения характеристик уже существующих препаратов. Это подразумевает повышение растворимости, биодоступности и уменьшение эффективной дозы лекарства. Один из способов достижения поставленных целей — это применение агентов для доставки лекарств.

В наших экспериментах мы исследовали такие системы доставки, как арабиногалактан, глицирризин и хитозан. Известно, что эти вещества могут быть использованы в качестве агентов по доставке лекарств, они также обладают собственной биологической активностью.

Для выяснения механизма работы этих соединений как систем доставки лекарств в настоящей работе методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) исследовалось их воздействие на строение и свойства модельной липидной мембраны. В качестве исследуемой системы были приготовлены однослойные липосомы, состоящие из фосфолипидов DPPC. С использованием различных импульсных методик ЯМР были измерены коэффициенты латеральной диффузии липидов в мембране, времена спин-спиновой релаксации протонов липидов (время релаксации пропорционально времени корреляции вращения молекулы), исследованы фазовые переходы в липидном бислое. Все измерения проводились в отсутствие и в присутствии средств доставки лекарств.

В результате экспериментов было обнаружено влияние всех исследуемых веществ на латеральную и вращательную диффузию липидов в мембране, а также на температуру фазового перехода. Полученные результаты указывают на возможное влияние арабиногалактана, глицирризина и хитозана на физические и функциональные свойства липидных мембран и позволяют пролить свет на механизмы повышения биологической активности лекарств в составе комплексов включения со средствами доставки.

Научные руководители — д-р хим. наук Н. Э. Поляков,
канд. физ.-мат. наук О. Ю. Селютина

**Реализация «быстрого» адиабатического переключения
спин гамильтониана в ЯМР синглетных спиновых состояний**

Б. А. Родин

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

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

Для пары связанных спинов теоретически можно перевести не более $2/3$ спиновой намагниченности в долгоживущий синглетный порядок, однако данное значение не было достигнуто ни одним из известных методов получения долгоживущих состояний. Это связано с различными потерями эффективности конверсии в случае методов, использующих адиабатическое изменение спин-гамильтониана, — с наличием антипересечения уровней, которые требуется проходить достаточно медленно. Однако при медленном изменении гамильтониана на конверсию начинают влиять релаксационные процессы, также приводящие к потере эффективности конверсии. Одним из способов для решения данной проблемы является реализация «быстрого» адиабатического переключения с использованием оптимизированных профилей переключения РЧ-полей.

В данной работе были реализованы два подхода для оптимизации профилей переключения РЧ-полей: применение профилей с постоянной адиабатичностью и применение метода GRAPE с дополнительным условием (монотонный рост амплитуды РЧ-поля). Данные подходы использованы для последовательностей SLIC и APSOC. Обе модификации показали более эффективную степень конверсии по сравнению с линейным профилем, который использовался ранее, обеспечивая степень конверсии до 60 %, что близко к теоретическому максимуму. Была проведена проверка профилей на устойчивость к изменению внешних параметров эксперимента, таких как амплитуда РЧ-поля, его частота и время его переключения.

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

**Измерение динамики малоуглового рентгеновского рассеяния
и восстановление размеров наночастиц конденсированного углерода
при детонации смесей тротила и гексогена**

И. А. Рубцов

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

Регистрация угловых распределений малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) при детонации взрывчатых веществ (ВВ) позволяет измерять флуктуацию плотности за зоной химической реакции. В случае ВВ с отрицательным кислородным балансом она связана с синтезом конденсированных фаз углерода.

В данной работе проведено измерение распределений МУРР при детонации литых цилиндрических зарядов тротил / гексоген (50/50). Эксперименты выполнялись с использованием синхротронного излучения на станции ускорительного комплекса ВЭПП-4М (ИЯФ СО РАН). Разработаны новые методики обработки данных, которые позволили получить динамику конденсации углеродных наночастиц за зоной химической реакции.

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

Температурная зависимость зарядового состояния цитохромов в эмбрионах мыши, замораживаемых в присутствии пропиленгликоля

Е. А. Сажина

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

Технология криоконсервации биологических объектов, в частности преимплантационных эмбрионов, широко используется в медицине, биологических исследованиях, в хозяйстве, промышленности и является одним из перспективных методов сохранения вымирающих видов. Во избежание повреждений, связанных с кристаллизацией воды, криоконсервацию клеток проводят по специальным протоколам с определенным температурным режимом охлаждения и нагрева, а также с добавлением криопротекторов, соединений, которые уменьшают долю льда, формирующегося в образцах. Для некоторых видов биологических объектов уже разработаны методы криоконсервации, но не все механизмы криоповреждений хорошо изучены — например, механизмы, вызывающие подавление клеточного дыхания в образцах после отогрева.

Состояние дыхательной электрон-транспортной цепи в клетках можно отслеживать, изучая цитохромы — белки, участвующие в процессе клеточного дыхания в качестве переносчиков электронов. В состав этих белков входит железо-порфириновый комплекс, который может находиться в окисленном или восстановленном зарядовом состоянии. Изучение с помощью спектроскопии резонансного комбинационного рассеяния света (КРС) зарядового состояния цитохромов позволяет исследовать изменения в работе дыхательной электрон-транспортной цепи.

Настоящая работа посвящена исследованию методом КРС зарядового состояния цитохромов в преимплантационных эмбрионах мыши, замораживаемых в присутствии пропиленгликоля. Результаты были сопоставлены с данными, полученными от эмбрионов мыши, замораживаемых в растворе глицерина. Температурная зависимость скорости уменьшения интенсивности этих линий при замораживании в растворе пропиленгликоля отлична от зависимости, полученной в случае глицерина. При температурах ниже $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$ наблюдалось фотоиндуцированное увеличение интенсивности РКРС линии цитохромов на 750 см^{-1} . Показано, что это вызвано увеличением доли цитохромов *b* типа в восстановленном зарядовом состоянии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-04-01221.

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

^{31}P МРТ-визуализация реакции гетерогенного жидкофазного гидрирования

А. И. Святова

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

В настоящее время методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и магнитно-резонансной томографии (МРТ) распространены в химии для установления структуры соединений и исследования процессов реакций, а также в медицине для диагностики заболеваний. Однако взаимодействие ядерных спинов с внешним магнитным полем слабое, поэтому возникает необходимость усиления сигнала ЯМР, для этого можно использовать метод индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ), где создается неравновесная заселенность уровней, что значительно увеличивает сигналы ЯМР/МРТ. Данную поляризацию можно перенести с атомов водорода на гетероядра, что расширяет возможности метода.

В работе исследовалась реакция гетерогенного гидрирования в жидкой фазе с использованием параводорода с последующим переносом поляризации на ядра ^{31}P . В качестве объектов исследования были выбраны два соединения, содержащие атомы фосфора: диэтил винилфосфонат и диметил винилфосфонат. При проведении реакции гидрирования параводородом в водной среде были получены эффекты ИППЯ для ядер ^1H и ^{31}P . Использование магнитного экрана позволило выполнить перенос поляризации с ядер ^1H на ^{31}P . Было измерено время T_1 гиперполяризованного продукта по ядрам ^{31}P . Оно составило 13 секунд для диэтил винилфосфоната.

Полученное усиление сигнала для ^{31}P составило только два раза, поэтому было целесообразно использование термического сигнала ^{31}P . МРТ-изображения реакции гидрирования диметил винилфосфонат по ядрам ^{31}P регистрировались с селективной отстройкой по пику реагента. В качестве импульсной последовательности была выбрана последовательность TrueFISP, так как она обеспечивает наилучшее соотношение сигнал-шум и наименьшее время регистрации одного изображения (0,6 секунд). Таким образом, впервые реакция гетерогенного жидкофазного гидрирования была визуализирована методом ^{31}P МРТ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-03-00407 а.

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

**Исследование альбумина и его комплексов
методами магнитного резонанса**

А. С. Спицына

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

Методы импульсной дипольной ЭПР-спектроскопии, такие как двойной электрон-электронный резонанс (ДЭЭР) и метод двойной квантовой когеренции (ДКК), позволяют измерять расстояния от 1,5 до 8 нм между двумя спиновыми метками, селективно введенными в исследуемый биополимер. Существуют различные спиновые метки, среди которых наиболее распространены нитроксильные радикалы. Недостатком нитроксильных спиновых меток является быстрая электронная фазовая релаксация при температурах выше 80 К.

Недавно было предложено в качестве спиновой метки использовать триарилметильный радикал, спектр которого состоит из одной узкой линии. Этот радикал обладает микросекундным временем фазовой релаксации при температуре 300 К, что позволяет проводить импульсные ЭПР измерения при физиологических условиях. Первые эксперименты показали, что при использовании Финляндского триарилметильного радикала (ФТ) наблюдается значительная агрегация метки на поверхности белков. Для преодоления этой проблемы в НИОХ СО РАН была синтезирована новая тритильная метка на основе радикала ОХО63, содержащая полярные гидроксильные группы, предотвращающие образование агрегатов.

В данной работе мы исследовали методами ЭПР свойства новой тритильной метки ОХО63 на примере человеческого сывороточного альбумина (ЧСА). ЧСА играет важную роль в транспорте различных веществ в крови и участвует в процессах формирования белковых бляшек и фибрилл, приводящих к болезни Альцгеймера и Паркинсона. Было показано, что ОХО63 не агрегирует с белком в отличие от ФТ. Для единожды меченого альбумина мы наблюдали сигнал в ДКК, что может говорить о существовании димеров альбумина.

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

Дипольная ЭПР-спектроскопия спиновых меток на основе триплетного фуллерена

И. О. Тимофеев

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

Дипольная ЭПР-спектроскопия является мощным структурным методом исследования биополимеров и их комплексов. Метод позволяет измерять расстояния от 1,5 до 8 нм между спиновыми метками, селективно введенными в изучаемую макромолекулу. В качестве спиновых меток типично используются нитроксильные радикалы. Недавно был реализован эксперимент по измерению расстояния между фотовозбужденной триплетной молекулой порфирина и стабильным нитроксильным радикалом, продемонстрировавший высокую чувствительность [1].

В данной работе в качестве спиновой метки используется триплетная молекула фуллерена (C_{60}), имеющая ширину спектра ЭПР ~ 100 Гс, что на порядок меньше, чем у порфирина. Для проведения дипольных ЭПР-экспериментов были получены ковалентные комплексы фуллерена с нитроксильным (C_{60} -NO \cdot) и тритильным радикалами (C_{60} -Tr \cdot). Системы были изучены методами PELDOR и DQC при температуре 80 К в X-диапазоне. Кроме этого, удалось зарегистрировать спектр ЭПР C_{60} при комнатной температуре, при которой тритильный радикал имеет достаточно высокое время фазовой релаксации. Это позволило изучить соединение C_{60} -Tr \cdot также при температурах близких к физиологическим. В результате удалось добиться высокой чувствительности и значительной глубины модуляции и получить распределения по расстояниям в модельных системах. Таким образом, впервые полученная и исследованная пара C_{60} -Tr \cdot обладает значительными преимуществами по сравнению с описанными ранее в литературе.

Работа поддержана грантом Президента РФ 14.Y30.17.3214-МК

1. *Valentin M. D. et al.* Porphyrin Triplet State as a Potential Spin Label for Nanometer Distance Measurements by PELDOR Spectroscopy // *J. Am. Chem. Soc.* 2014. V. 136. P. 6582–6585.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева

Влияние антипиренов на распространение пламени по полимерам и их горение

С. А. Трубачев

Новосибирский государственный университет

Горение конденсированных топлив обычно происходит в диффузионном режиме. С этим процессом связаны такие явления, как конвекция, излучение, газодинамика. Исследование распространения пламени по поверхности полимеров с добавками антипиренов и без них, а также горения полимеров в режиме «pool fire» представляет интерес с точки зрения предсказания сценариев развития пожаров, их предотвращения и разработки методов борьбы с ними.

В данной работе исследовался полиметилметакрилат (ПММА), при горении не образующий углеродистого каркаса и имеющий широкое применение в различных областях производства и техники. ПММА обладает относительно простым механизмом пиролиза, что делает его удобным объектом для построения модели горения полимеров. В качестве антипиренов, вводимых в ПММА для снижения его горючести, использовались 9,10-дигидро-9-окси-10-фосфафенантрен-10-оксид (ДОПО) и трифенилфосфат (ТФФ). Были измерены скорости распространения пламени по пластинам ПММА и кинетика термического разложения ПММА, структура пламени (поля температуры и концентраций веществ в пламени ПММА) и влияние на эти параметры добавок ДОПО и ТФФ [1]. Установлено наличие корреляции между эффективностью действия антипирена на скорость горения и кинетику термического разложения ПММА в случае ДОПО и отсутствие такой корреляции в случае ТФФ. Сделан вывод, что местом действия ТФФ как антипирена является только газовая фаза, где ТФФ ингибирует реакции в пламени ПММА, тогда как ДОПО влияет на скорость химических реакций, как в газовой, так и конденсированной фазе.

Исследовано горение пластин ПММА с добавками антипиренов ДОПО и ТФФ и без них в режиме «pool fire». Измерены скорости горения и поля температур, определены тепловые потоки из пламени на поверхность топлива. Полученные данные представляют интерес для понимания механизма горения полимеров и механизма действия антипиренов и могут быть использованы при разработке моделей их горения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-49-02017).

1. Korobeinichev O. P., Raghavan V., Trubachev S. A. et al. Investigation of the structure and spread rate of flames over PMMA slabs // Applied Thermal Engineering. 2018. V. 130. P. 477–491.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. О. П. Коробейничев

**Связь термической стабильности биспроизводных тетразола
с молекулярной структурой
по данным высокоточных квантовохимических расчетов**

М. В. Шахова

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

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

Основной задачей в этой работе является изучение первичных реакций разложения серии 1,1'- и 5,5'-биспроизводных тетразола. На термическую стабильность таких соединений могут влиять различные факторы: длина непрерывной азотной цепи в молекуле, различные заместители, а также способы соединения гетероциклических фрагментов. В данной работе было исследовано влияние различных мостиков ($-N=N-$, $-NH-NH-$, $-N(O)-N-$) на кинетику и механизм первичных реакций термического разложения бистетразолов. На данный момент подобные исследования проводились лишь простыми методами DFT, ошибки которых для конкретных систем могут быть высоки, а многие важные каналы разложения не рассматривались совсем. В данной работе используется современный высокоточный явно коррелированный метод CCSD(T)-F12.

В рамках поставленной задачи были проведены расчеты структуры и свойств серии богатых азотом производных тетразола и установлены механизмы и активационные барьеры реакций распада. Наиболее термодинамически выгодным для всех соединений является транс-изомер, а основным каналом разложения оказалась реакция раскрытия одного из тетразольных колец с последующим отрывом молекулы N_2 , причем величина активационного барьера сильно зависит от типа мостика.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев,
д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан

Исследование мембранно-модифицирующей активности глицирризиновой кислоты

Е. А. Шелепова

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

Известно, что глицирризиновая кислота (ГК) способна усиливать проницаемость липидной мембраны для некоторых лекарств. Однако механизм такого действия ГК не известен. Предполагается, что молекула ГК вызывает образование дополнительных пустот внутри мембраны, которые способствуют прохождению лекарственных молекул. Существует мнение, что эти пустоты должны быть достаточно большими. Появление таких пустот можно увидеть на распределении интерстициальных сфер (пустых сфер, вписанных между молекулами) — должны появляться дополнительные сферы большого радиуса. Мы получили молекулярно-динамические модели липидных бислоев DOPC и DPPC (чистых и содержащих холестерин) и соответствующие модели с добавлением молекулы ГК. Были рассчитаны распределения интерстициальных сфер для наших систем. Оказалось, что добавление ГК не приводит к появлению новых интерстициальных сфер большого радиуса ни для чистого липидного бислоя, ни для бислоя с холестерином. Это означает, что молекула ГК в бислое не создает больших пустот.

Однако усиление проницаемости мембраны также может быть связано с увеличением доли пустого объема. Мы рассчитали распределения (профили) доли пустого объема в наших бислоях относительно центральной плоскости бислоя и внешней поверхности бислоя. Для этого были использованы недавно разработанные методы расчета пустого межмолекулярного объема с помощью симплексов Делоне. Оказалось, что для чистых бислоев добавление ГК не изменяет профили, т. е. не вызывает увеличения доли пустого объема ни в области хвостов, ни среди голов липидов, в то время как для бислоев с холестерином наблюдается даже некоторое уменьшение доли пустого объема в середине бислоя. Таким образом, мы показали, что механизм влияния ГК на проницаемость мембран не связан с формированием дополнительных пустот.

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

Фотохимия и фотофизика первичных процессов комплексов Ru(IV), перспективных для применения в фотодинамической терапии

А. А. Шушаков

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

Комплексы Ru^{IV} тестируются в качестве пролекарств для противоопухолевой фотодинамической терапии (ФДТ), не требующей присутствия кислорода. Актуальность исследования пролекарств на основе комплексов Ru обусловлена их цитотоксичностью. Для комплексов *цис*-[RuCl₂(DMSO)₄] (1) и *транс*-[RuCl₂(DMSO)₄] (2) было установлено, что данные соединения могут ингибировать транскрипцию генов прямым фотоиндуцированным переносом электронов между комплексами и ДНК. При растворении (1) и (2) в воде происходят быстрые реакции замещения лигандов с образованием комплексов *цис, fac*-[RuCl₂(DMSO)₃(H₂O)] (3) и *транс, цис, цис*-[RuCl₂(DMSO)₂(H₂O)₂] (4) соответственно. Под действием света комплекс 3 переходит в 4; характерное время реакции заведомо меньше 5 нс. Механизм этой реакции неизвестен.

В работе методом сверхбыстрой кинетической спектроскопии (возбуждение излучением второй гармоники титан-сапфирового лазера на 400 нм, временное разрешение ~ 100 фс) исследовались первичные фотохимические процессы для комплексов 3 и 4. Кинетические кривые в обоих случаях удовлетворительно описываются в рамках трехэкспоненциальной модели, соответствующей последовательной трансформации интермедиатов. Комплекс 3 переходит в 4 с характерным временем 10 пс. Комплекс 4 также испытывает фотохимическое превращение с характерным временем 10 пс. Предполагается, что в этом случае первичным фотопроцессом является внутрисферный перенос электрона с хлорид-иона на центральный катион с образованием интермедиата Ru(I).

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

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

Указатель авторов

Аникин М. Н.	11	Калугина Е. А.	43
Антонова В. С.	22	Карпегина Ю. А.	77
Анфилофьев В. В.	23	Карузина Н. Е.	71
Афанасьева Е. Ф.	68	Качалов А. С.	47
Ахметшин Л. Р.	24	Кашеев А. С.	44
Ашкарин И. Н.	69	Киблер Э. В.	45
Барковский И. Е.	25	Кизилова В. А.	9
Барсуков А. В.	26	Ким Н. С.	46
Бердюгин А. А.	27	Кичигина Л. А.	78
Беспалов Я. Р.	28	Козиненко В. П.	79
Бийбосунов А.	70	Колесник И. М.	10
Бодажков Д. С.	29	Коновалова С. Н.	6
Бойко Е. В.	30	Кононенко Е. С.	80
Бунеева П. С.	31	Кормилина Т. К.	37
Бурлаченко А. Г.	32	Костогруд И. А.	30
Винокуров З. С.	28	Красулина А. Н.	48
Галиева И. Ф.	33	Кременко С. И.	49
Гафурова П. С.	5	Кудрявцева В. Л.	10
Герасимова М. А.	71	Кузьмина Д. Л.	81
Герт С. С.	23	Курганский И. В.	82
Гладышева А. В.	6	Курчев А. В.	50
Глазнев Р. К.	72	Кушнарев А. Г.	24
Глинских А. В.	73	Кыштымов Д. А.	51
Глуздов Д. С.	34	Лаптева Л. Л.	83
Голубцов Г. В.	35	Лащук О. О.	71
Гольшев В. М.	9	Локтев В. Б.	6
Горбунов Д. Е.	74	Маркелов Д. А.	52
Гребёнкина М. А.	36	Мельников А. Д.	84
Данилко Д. А.	75	Месенцова И. С.	53, 54
Долгих И. А.	7	Микрюкова Т. П.	6
Дудко С. Г.	8	Мировой Ю. А.	32
Евстигнеев Р. В.	37	Михненко М. Д.	55
Евтушок Б. Ю.	38	Молодов П. А.	11
Ежак А. С.	39	Москвичев Е. Н.	24
Зайцев А. С.	40	Никифоров П. П.	12
Зайцева Ю. В.	76	Овчеренко С. С.	85
Иванов И. В.	41	Осипова К. Н.	86
Кадиленко Е. М.	74	Павлов Н. А.	53, 54
Казанцев Ф. П.	42, 46	Панфилов А. Ю.	47
Калугин А. А.	29	Парамонова Е. Д.	87

Патлай Д. С.	13	Спирина А. А.	62
Паулиш Н. А.	56	Спицына А. С.	92
Пивкина А. В.	51	Терновой В. А.	6
Плохотниченко М. Е.	14	Тимофеев И. О.	93
Пономарева Е. П.	6	Тимофеев Ю. В.	29
Просекина Е. А.	15	Трубачев С. А.	94
Протопопова Е. В.	6	Трусов К. В.	18
Родин Б. А.	88	Фань Гуйлинь	64
Романов А. В.	16	Федотова С. А.	19
Рубцов И. А.	89	Химич М. А.	65
Руденя Е. А.	41	Чаусов Е. В.	6
Рыгин А. В.	32	Черепанова Н. Е.	52
Сажина Е. А.	90	Чирятьева А. Е.	20
Святова А. И.	91	Чуклина Н. О.	66
Семенов С. В.	39, 51, 57	Шахова М. В.	95
Семерикова А. И.	39, 46, 51, 52, 57, 58	Швалов А. Н.	6
Сергиенко Д. И.	47	Шелепова Е. А.	96
Син Минмин	59	Шелепова С. Ю.	67
Синицын С. А.	17	Шило А. С.	57
Смовж Д. В.	30	Шторк А. С.	21
Соколов А. Г.	60	Шушаков А. А.	97
Сопов К. В.	61	Thoemmes А.	63

Оглавление

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Гафурова П. С.	5
Гладышева А. В., Терновой В. А., Пономарева Е. П., Микрюкова Т. П., Протопопова Е. В., Коновалова С. Н., Чаусов Е. В., Швалов А. Н., Локтев В. Б.	6
Долгих И. А.	7
Дудко С. Г.	8
Кизилова В. А., Гольшев В. М.	9
Колесник И. М., Кудрявцева В. Л.	10
Молодов П. А., Аникин М. Н.	11
Никифоров П. П.	12
Патлай Д. С.	13
Плохотниченко М. Е.	14
Просекина Е. А.	15
Романов А. В.	16
Синицын С. А.	17
Трусов К. В.	18
Федотова С. А.	19
Чирятьева А. Е.	20
Шторк А. С.	21

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

Антонова В. С.	22
Анфилофьев В. В., Герт С. С.	23
Ахметшин Л. Р., Кушнарв А. Г., Москвичев Е. Н.	24
Барковский И. Е.	25
Барсуков А. В.	26
Бердюгин А. А.	27
Беспалов Я. Р., Винокуров З. С.	28
Бодажков Д. С., Калугин А. А., Тимофеев Ю. В.	29
Бойко Е. В., Костоград И. А., Смвж Д. В.	30
Бунеева П. С.	31
Бурлаченко А. Г., Мировой Ю. А., Рыгин А. В.	32
Галиева И. Ф.	33

Глуздов Д. С.	34
Голубцов Г. В.	35
Гребёнкина М. А.	36
Евстигнеев Р. В., Кормилина Т. К.	37
Евтушок Б. Ю.	38
Ежак А. С., Семенов С. В., Семерикова А. И.	39
Зайцев А. С.	40
Иванов И. В., Руденя Е. А.	41
Казанцев Ф. П.	42
Калугина Е. А.	43
Кашцев А. С.	44
Киблер Э. В.	45
Казанцев Ф. П., Ким Н. С., Семерикова А. И.	46
Качалов А. С., Панфилов А. Ю., Сергиенко Д. И.	47
Красулина А. Н.	48
Кременко С. И.	49
Курчев А. В.	50
Кыштымков Д. А., Пивкина А. В., Семерикова А. И., Семенов С. В.	51
Маркелов Д. А., Черепанова Н. Е., Семерикова А. И.	52
Месенцова И. С., Павлов Н. А.	53
Месенцова И. С., Павлов Н. А.	54
Михненко М. Д.	55
Паулиш Н. А.	56
Семенов С. В., Семерикова А. И., Шило А. С.	57
Семерикова А. И.	58
Син Минмин.	59
Соколов А. Г.	60
Сопов К. В.	61
Спирина А. А.	62
Thoemmes A.	63
Фань Гуйлинь.	64
Химич М. А.	65
Чуклина Н. О.	66
Шелепова С. Ю.	67

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Афанасьева Е. Ф.	68
Ашкарин И. Н.	69
А. Бийбосунов.	70
Герасимова М. А., Карузина Н. Е., Лашук О. О.	71
Глазнев Р. К.	72

Глинских А. В.	73
Горбунов Д. Е., Кадиленко Е. М.	74
Данилко Д. А.	75
Зайцева Ю. В.	76
Карпегина Ю. А.	77
Кичигина Л. А.	78
Козиненко В. П.	79
Кононенко Е. С.	80
Кузьмина Д. Л.	81
Курганский И. В.	82
Лаптева Л. Л.	83
Мельников А. Д.	84
Овчеренко С. С.	85
Осипова К. Н.	86
Парамонова Е. Д.	87
Родин Б. А.	88
Рубцов И. А.	89
Сажина Е. А.	90
Святова А. И.	91
Спицына А. С.	92
Тимофеев И. О.	93
Трубачев С. А.	94
Шахова М. В.	95
Шелепова Е. А.	96
Шушаков А. А.	97

Научное издание

МНСК-2018

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Материалы

56-й Международной научной студенческой конференции

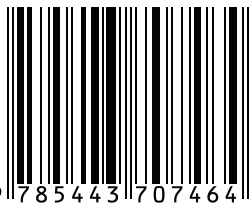
22–27 апреля 2018 г.

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

Подписано в печать 20.04.2018 г.
Формат 60 × 84/16 Уч.-изд. л. 6,5. Усл. печ. л. 6.
Тираж 100 экз. Заказ № 91.
Издательско-полиграфический центр НГУ.
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Секция
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

ISBN 978-5-4437-0746-4



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

