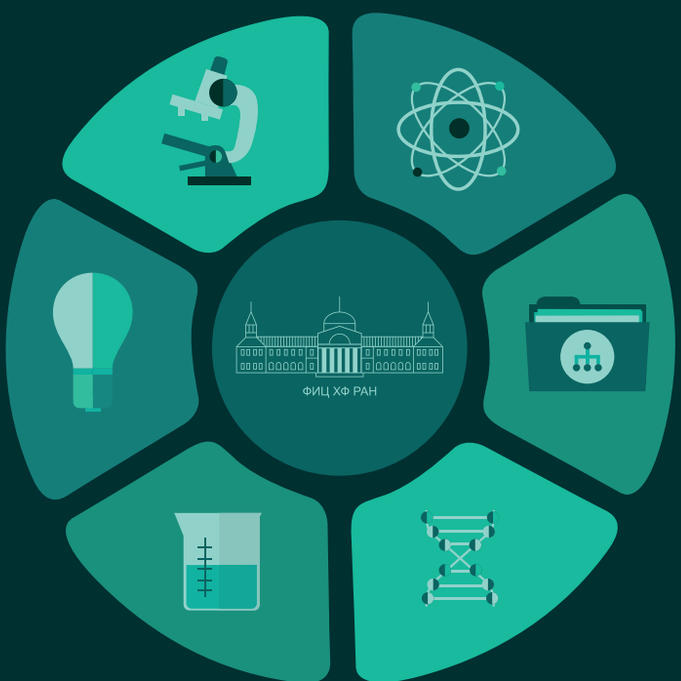


IX Всероссийская научная молодежная школа-конференция

Организаторы

ФИЦ ХФ РАН

Совет молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Партнёры

Благотворительный фонд РАЗВИТИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

триалог

1931 ПРОФСОЮЗ ИХФ РАН

ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ

20-22 апреля 2022 года, ФИЦ ХФ РАН

ТЕЗИСЫ

chemphysbioint.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
Совет молодых ученых

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

IX ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ МОЛОДЕЖНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ «ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ»

Москва
20–22 апреля 2022 года

УДК 50(063)
ББК 2я431

Сборник тезисов докладов IX Всероссийской научной молодежной школы-конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции». 20–22 апреля 2022 года. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), Москва, Россия. — Москва: Издательство ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), 2022. — 224 с.

ISBN 978-5-6045579-5-2

IX Всероссийская научная молодежная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции» организована Советом молодых ученых ФИЦ ХФ РАН (СМУ ФИЦ ХФ РАН).

Основная цель конференции — развитие взаимодействия между научными коллективами ФИЦ ХФ РАН и другими научно-исследовательскими организациями, ВУЗами России.

Основной задачей конференции является поиск междисциплинарных проблем и возможностей их решения путем проведения совместных исследований.

В 2022 году основу научной программы составили устные доклады молодых ученых, аспирантов и студентов по следующим направлениям:

1.Новые материалы: технологии создания и методы исследования;

2.Физико-химические процессы, кинетика и термодинамика;

3.Компьютерное моделирование и теория наносистем;

4.Биохимия, биофизика, биотехнология и биомедицина.

Третий год подряд неотъемлемой частью конференции стали пленарные доклады ведущих российских молодых ученых, в том числе молодых докторов наук.

Конференция проводилась в очном формате Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Федеральным исследовательским центром химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.

ISBN 978-5-6045579-5-2
9 785604 557952

© СМУ ФИЦ ХФ РАН, 2022.

ОРГКОМИТЕТ

Председатель
Гудков М.В.
н.с., председатель Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Ученый секретарь
Захарченко Т.К.
н.с., к.х.н., ученый секретарь Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Члены оргкомитета
Алексанян К.В.
с.н.с., к.х.н., заместитель председателя Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Иким М.И.
с.н.с., к.ф.-м.н., заместитель председателя Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Зинатуллина К.М.
н.с., член Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Мельников И.Н.
м.н.с., член Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Филюшкина В.И.
м.н.с., член Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

Шаповалова О.В.
и.о. руководителя отдела специальных материалов и технологий, к.х.н.,
член Совета молодых ученых ФИЦ ХФ РАН

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель
Надточенко В.А.
д.х.н., профессор, директор ФИЦ ХФ РАН

Сопредседатель
Берлин А.А.
д.х.н., академик РАН, научный руководитель ФИЦ ХФ РАН

Члены программного комитета
Чертович А.В.
д.ф.-м.н., зам. директора по научной работе ФИЦ ХФ РАН

Гришин М.В.
д.ф.-м.н., зам. директора по научной работе ФИЦ ХФ РАН

Емохонов В.Н.
д.ф.-м.н., профессор, зам. директора по научной работе ФИЦ ХФ РАН

Пивкина А.Н.
д.т.н., заведующая лабораторией энергетических материалов ФИЦ ХФ РАН

Новокшонова Л.А.
д.х.н., г.н.с.

Аветисов В.А.
д.ф.-м.н., г.н.с.

Арутюнов В.С.
д.х.н., профессор, г.н.с.

Голубков М.Г.
д.ф.-м.н., в.н.с.

Прут Э.В.
д.х.н., профессор, г.н.с.

Соловьева А.Б.
д.х.н., профессор, г.н.с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОЛЛАГЕНОВОЙ МАТРИЦЫ ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ ОБЪЕМА МЯГКИХ ТКАНЕЙ, КАК АЛЬТЕРНАТИВА АУТОТРАНСПЛАНТАТАМ

Аджиева А.Б., Хабадзе З.С.

ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов»

Отсутствие достаточной ширины и высоты кератинизированной десны ведёт к ухудшению функции, эстетики имплантатов. В такой ситуации пациенту могут быть предложены два плана лечения. Вариант номер один — использование субэпителиального соединительнотканного трансплантата. Этот метод хорошо описан в литературе, имеет долгосрочные результаты и считается золотым стандартом. Однако для аутогенных трансплантатов всегда требуется донорский участок, что может привести к осложнениям и возможному повреждению анатомических структур.

В качестве альтернативы предлагается использовать объемно-стабильный коллагеновый матрикс, так как он позволяет уменьшить боль после операции, сократить продолжительность манипуляций, а количество материала не ограничено.

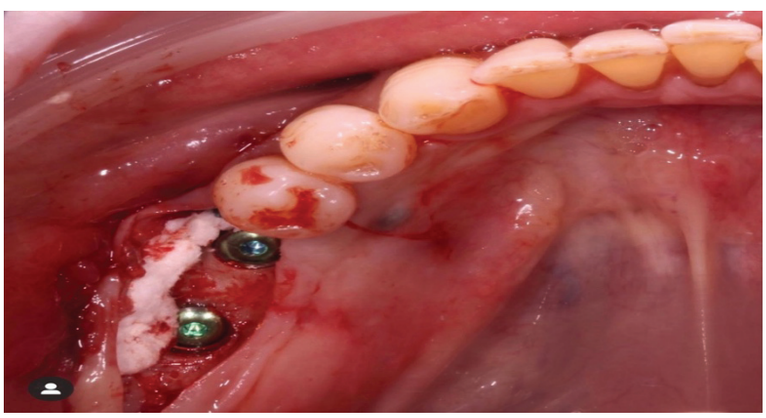


Рис. 1. Использование коллагеновой матрицы Fibro-gide для увеличения объема мягких тканей в области имплантатов.

Коллагеновая матрица показала приемлемую интеграцию в ткани. При использовании коллагеновой матрицы значительно сокращается время оперативного вмешательства. Увеличенные мягкие ткани имеют внешний вид, похожий на окружающие естественные мягкие ткани по текстуре и цвету, что делает их предпочтительными в эстетических зонах.

Данная коллагеновая матрица является достойной альтернативой аутотрансплантатам, его применение связано со значительно легче переносимым послеоперационным периодом, отсутствием осложнений, доступностью в неограниченных количествах и хорошими эстетическими результатами.

ОКИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФИБРИНОГЕНА, ВЫЗВАННЫЕ СВОБОДНО-РАДИКАЛЬНЫМ ОКИСЛЕНИЕМ

Азарова Д.Ю.[1,2], Гаврилина Е.С.[2], Юрина Л.В.[2], Васильева А.Д.[2], Индейкина М.И.[1,2], Бугрова А.Е.[2], Кононихин А.С.[1,2], Николаев Е.Н.[1,3], Розенфельд М.А.[2]

[1]*Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Московская область, Россия*

[2]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва*

[3]*Сколковский институт науки и технологий, Московская область, Россия*

Фибриноген (ФГ) является одним из белков плазмы крови, наиболее подверженных окислительной модификации. ФГ играет важную роль в процессе свертывания крови, фибринолизе, клеточных и матричных взаимодействиях, воспалительных процессах, заживлении ран и неоплазии (Рис.1). Окисление ФГ повреждает его структуру, а также влияет на функцию белка.

Фибриноген был выделен из цитратной плазмы крови человека. Свободнорадикальное окисление было индуцировано перекисью водорода и гипохлоритом, концентрация окислителя составляла 300 мкМ H_2O_2 и 50 мкМ HOCL. Методом масс-спектрометрии было обнаружено, что множество аминокислотных остатков, локализо-

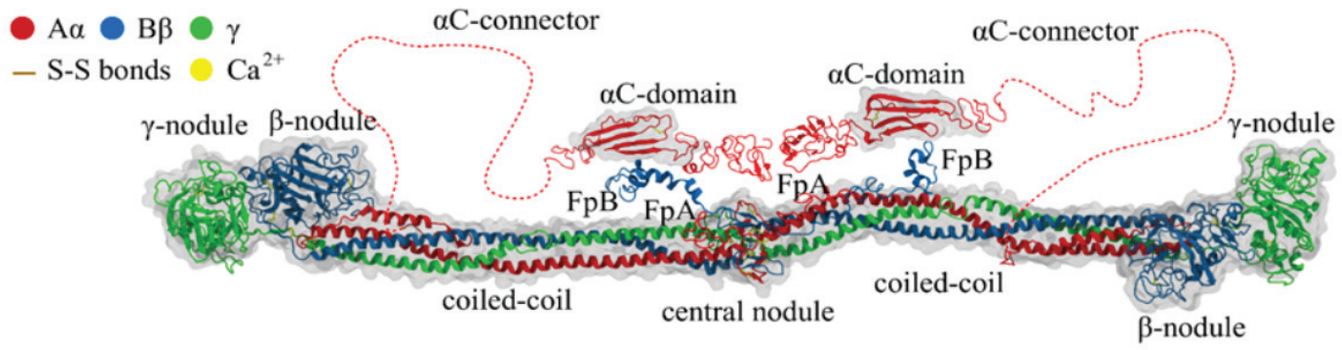


Рис. 1. Структура молекулы фибриногена. [Y.F. Zuev, et al. "Conformational Flexibility and Self-Association of Fibrinogen in Concentrated Solutions", J. Phys. Chem. B, 121: 7833-7843 (2017)].

ванных во всех трех полипептидных цепях и основных структурных элементах фибриногена, участвуют в окислении. Такое расположение может быть связано с тем, что участие каждого остатка в окислительной модификации определяется не только его химической природой, но и зависит от пространственной доступности этой аминокислоты в белке. Среди модификаций, обнаруженных в этих аминокислотных остатках, имеются случаи образования метионин сульфоксида, 2-оксогистидина и гидрокситриптофана вследствие присоединения одного атома кислорода к боковой цепи (+15,99), окисления триптофана до кинуренина (+3.99) и отщепления метантиола от боковой цепи Met (-48.00), а при окислении HOCL появляется специфическая для данного окислителя модификация — хлорирование тирозина (+33.96). Модифицированные аминокислотные остатки были обнаружены во всех трех полипептидных цепях и всех структурных областях молекулы фибриногена, за исключением E области.

Аминокислотные остатки, локализованные в области E, которые участвуют в связывании тромбина, не были подвержены окислительной модификации, что указывает на сохранение тромбин-связывающих сайтов молекулы фибриногена при окислении. Содержащей наибольшее количество окислительных сайтов является αC область, что подтверждает гипотезу о возможности данной области служить ловушкой для молекул АФК. Так, наиболее окисленной областью является αC область, в результате чего при формировании фибринового сгустка может снижаться αC- αC взаимодействие, но также данная область может служить ловушкой для АФК.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ С ЦИКЛОПРОПАНОВЫМ КОЛЬЦОМ

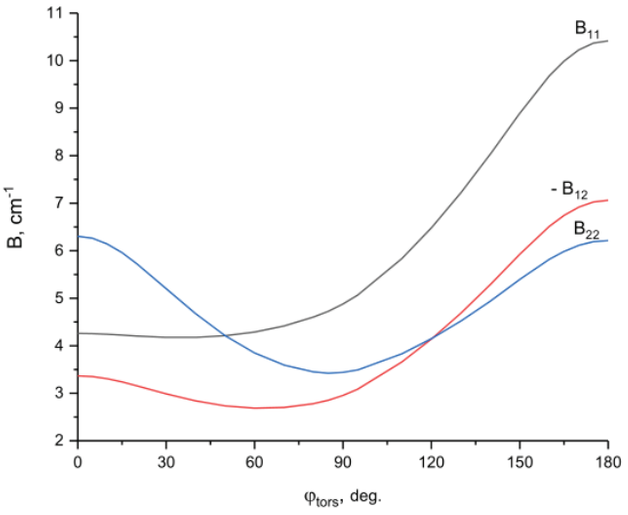
Акимов Г.А., Степин С.С., Батаев В.А., Годунов И.А.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, дом 1, строение 3,
ГСП-1, МГУ, химический факультет, Москва, Россия

Неэмпирическим методом квантовой химии MP2/cc-pVTZ изучено строение и конформационная динамика трех молекул в основном электронном состоянии, содержащих циклопропановый фрагмент: циклопропанкарбальдегида, фторангидрида и хлорангидрида циклопропанкарбоновой кислоты.

Все эти молекулы существуют в виде двух конформеров — цис и транс, отвечающих разной ориентации заместителя, связанного с циклопропановым кольцом. Для каждого из конформеров рассчитаны равновесные геометрические параметры, получены гармонические колебательные частоты, оценены барьеры внутреннего вращения. Полученные результаты удовлетворительно согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

При изучении формы поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) молекул особое внимание уделено свойствам сечений по нежесткой колебательной координате, отвечающей внутреннему вращению. Построенные сечения были использованы для решения вариационным методом серии ангармонических квантово-механических колебательных задач. Анализ формы сечений ППЭ показывает, что внутреннее вращение хорошо отделено от других молекулярных колебаний. Однако анализ кинетической части уравнения Шредингера, используемого для решения колебательной задачи, показывает, что внутреннее вращение может быть связано с низкочастотным деформационным колебанием заместителя. О такой связи можно судить на основании анализа изменения кинематических факторов B_{ij} в двумерной задаче, учитывающей два колебания: внутреннее вращение и антисимметричное деформационным колебание заместителя.



Из рисунка видно, что эта зависимость по-разному проявляется в *цис* (φ_{tors} = 0°) и *транс* (φ_{tors} = 180°) конформерах. В работе выполнен анализ взаимосвязи вращения трех разных заместителей (CHO, CFO и CClO) с их неплоским антисимметричным колебанием в *цис* и *транс* конформерах молекул.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00463, https://rscf.ru/project/22-23-00463/.

Рис. 1. Кривые зависимости B_{ij} от угла внутреннего вращения φ_{tors} для молекулы циклопропанкарбальдегида.

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Александров Н.В.[1], Гостева Е.А. [1], Старков В.В. [2]

[1]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*
[2]*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук*

В настоящее время актуальной задачей в области альтернативной энергетики является разработка новых типов протонно-проводящих мембран для топливных элементов.

В данной работе для создания пористых структур с разной морфологией пор использовался метод электрохимического травления монокристаллических пластин Si в растворах электролита на основе плавиковой кислоты и различных растворителей. В зависимости от параметров проведения процесса получены структуры с различной морфологией пористого слоя.

Так, при травлении кремниевых пластин марки КДБ (100)-8,6 в растворе HF : ISO в соотношении 6 : 1 + STAC (где STAC — хлорид цетилтриметиламмония) при плотности тока j = 15 мА/см^2 сформирована структура с плавно изменяющимся диаметром пор. В литературе такие структуры носят название ГПК-Вар. При травлении в течение 60 мин глубина полученного пористого слоя составила 43 мкм, диаметр пор изменялся от 120 единиц нм до 4 единиц мкм, согласно проведенному анализу СЭМ на сколах образцов.

Для получения макропористой структуры травление проводили с использованием кремния марки КДБ 8,6 (100), в растворе электролита HF : DMF = 1 : 10 при плотности тока j = 15 мА/см2 в течение 60 мин. Глубина образца составила 80 мкм при среднем диаметре пор 2 мкм.

При использовании электролита HF : C2H5OH = 1 : 1 + STAC, на пластинах кремния марки КДБ 0,005 (100), при плотности тока j = 80 мА/см2 в течение 60 мин, была сформирована нанопористая структура. Согласно результатам СЭМ, поры имеют одинаковый диаметр по глубине травления, с размерами порядка 20 нм при глубине пористого слоя порядка 180 мкм.

Для получения мембран на основе полученных образцов проведено удаление непротравленной части пластин кремния путём его шлифовки до проявления пористого слоя (рис. 1).

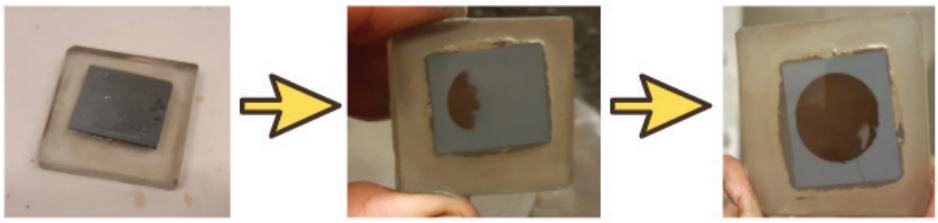


Рис. 1. Процесс проявления пористого слоя.

В результате проведения работы разработана и опробована технология получения мембран на основе пористого кремния; определены основные этапы — предварительное электрохимическое травления монокристаллических пластин кремния и последующая шлифовка непротравленного слоя.

Экспериментально установлено, что:

- увеличение времени травления ведёт к увеличению толщины пористого слоя;
- увеличение концентрации HF в растворе электролита способствует уменьшению размера формируемых пор.

ПИНЦЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ. ОТ «ЗЕЛЕНЫХ» МЕТОДОВ СИНТЕЗА ДО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ

Алексанян Д.В.

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

Пинцерные комплексы с тридентатным моноанионным каркасом являются одними из наиболее популярных объектов исследования в современной металлоорганической и координационной химии. В значительной степени это обусловлено легкостью модификации пинцерного каркаса, что открывает путь к направленному конструированию соединений с заданными свойствами. На протяжении последнего десятилетия нашей группой был получен широкий ряд неклассических пинцерных комплексов переходных металлов (M = Pd, Pt, Re, Ni и др.), относящихся как к *C*-металлированным соединениям с необычными (гетеро)ароматическими остовами, так и к *N*-металлированным производным с центральным амидным фрагментом (Рис. 1). Особое внимание было уделено разработке новой твердофазной методологии синтеза, включающей в том числе механохимическую активацию. Такой подход оказался эффективной и экологически безопасной альтернативой традиционным методам получения сложных металлоорганических систем в растворе и сделал этот ценный класс соединений более доступным. Среди полученных металлокомплексов были обнаружены сразу несколько типов потенциальных противоопухолевых агентов, перспективных люминофоров и эффективных (пре)катализаторов химических реакций, которые будут представлены в докладе.

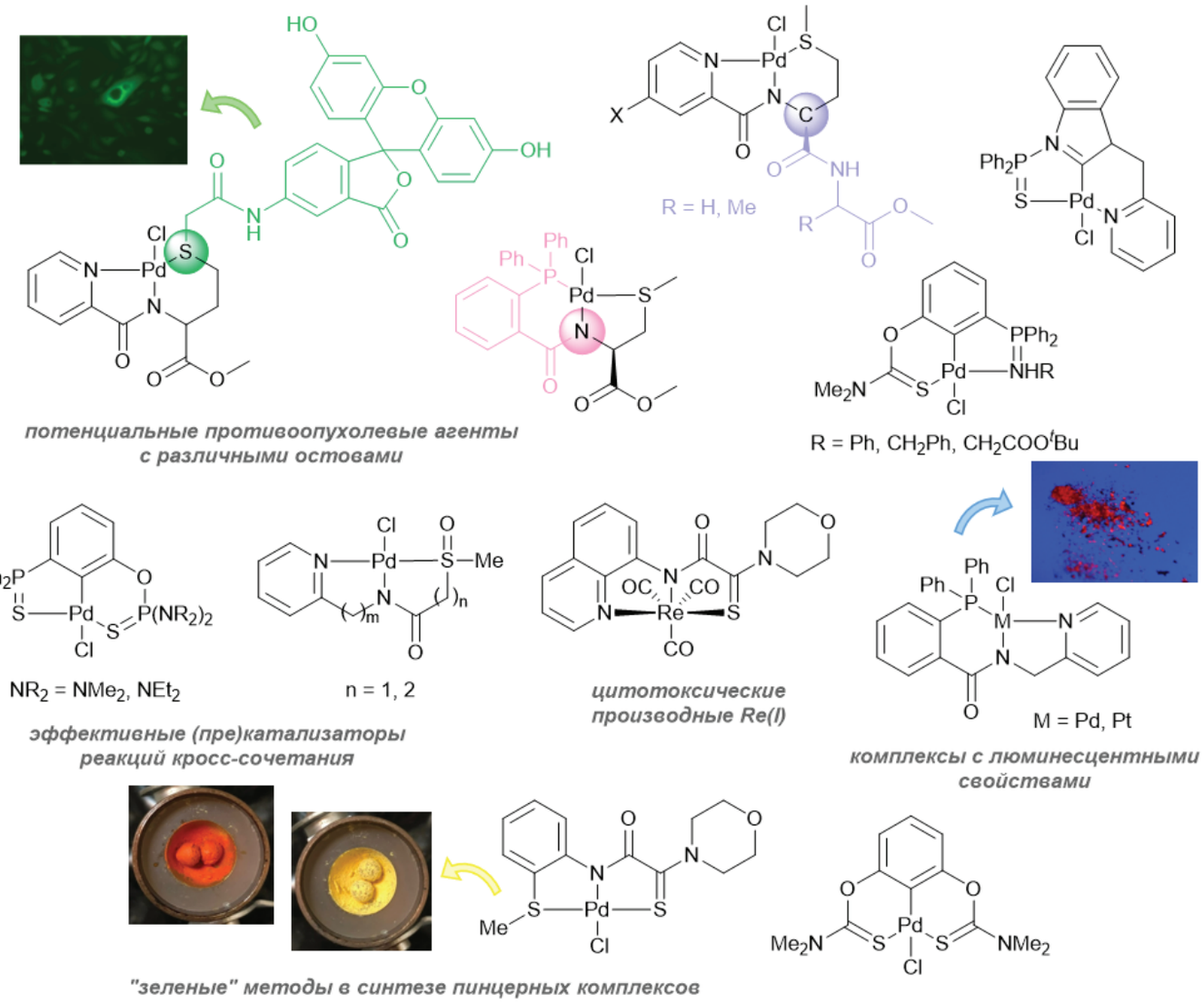


Рис. 1. Неклассические пинцерные комплексы переходных металлов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-73-00282).

ПОЛУЧЕНИЕ ТРОЙНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПЭНП–ПОЛИЛАКТИД–КРАХМАЛ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ

Алексанян К.В.[1], Роговина С.З.[1], Шахов А.М.[1], Иванушкина Н.Е.[2]

[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва*

[2]*Институт биохимии и физиологии микроорганизмов им. Г.К. Скрябина, Федеральный исследовательский центр Пущинский научный центр биологических исследований Российской академии наук, Пущино, Московская область*

Одним из подходов по решению существующих экологических проблем связанных с накоплением полимерных отходов является создание биоразлагаемых полиемрных материалов на основе синтетических полимеров с введением полимеров природного происхождения или получаемых из природного сырья. В данной работе были получены композиции на основе полиэтилена низкой плотности (ПЭНП) с полилактидом, синтезируемым из природного мономера молочной кислоты, и крахмалом, являющимся дешевым полисахаридом. Тройные композиции были получены в условиях сдвиговых деформаций в роторном диспергаторе, на выходе образовывался порошок. Изучение фракционного состава показало, что со снижением доли природных компонентов доля мелких фракций возрастает. Исследование механических свойств композиций ПЭНП–полилактид–крахмал показало, что введение жестких природных компонентов к ПЭНП приводит к возрастанию модуля упругости и снижению удлинения при разрыве. Значения предела прочности тройных композиций ниже, чем исходных полимеров. Как известно, водопоглощение является косвенной характеристикой биоразлагаемости. Как и следовало ожидать, наибольшие значения водопоглощения были получены для композиций с максимальным содержанием крахмала. Способность к биодеструкции была исследована рядом независимых методов. Согласно испытаниям на биоразалагемость в условиях, имитирующих окружающую среду (определение потери массы образцов после экспонирования в почве), интенсивность потери массы зависит от содержания крахмала в смеси. В ходе лабораторных тестов на грибостойкость была показана интенсивная пигментация образцов, изменение текстуры и образование шероховатой поверхности, а интенсивность развития грибов оценена максимальным баллом по шестибалльной шкале. Для выявления различий в механизмах биодеградации образцов в различных условиях использовали метод СЭМ. После экспонирования образцов в почве их целостность была нарушена за счет появления множественных сквозных отверстий, свидетельствующих о протекании деструкционных процессов. После испытаний на грибостойкость было отмечено появление сети волокнообразных наростов на поверхности, образующейся в результате жизнедеятельности грибов. Проникновение грибов в материал приводит к его эрозии и появлению шероховатости на поверхности. С использованием ИК-спектроскопии также исследовали особенности биодеградации образцов в различных условиях. Анализ спектров образцов до и после заражения спорами плесневых грибов показал, что содержание крахмала на поверхности уменьшается. В то же время при рассмотрении спектра поверхности тройной композиции видно, что происходит уменьшение интенсивности характеристических полос, относящихся не только к крахмалу, но и к полилактиду. Полученные данные свидетельствуют о том, что в процессе биодеструкции в почве, морфология образцов претерпевает существенные изменения, связанные не только с активным воздействием внешних факторов на крахмал, но и частичной деструкции полилактида. В результате происходит инверсия тройной полимерной матрицы, выражающейся в нарушении монолитности и распаду на исходные полимеры.

Работа выполнена в рамках Госзадания ФИЦ ХФ РАН.

ВЛИЯНИЕ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С N-ЭТИЛТИОМОЧЕВИНОЙ НА АКТИВАЦИЮ NRF2-ЗАВИСИМЫХ ПРОЦЕССОВ В ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТКАХ

Амозова В.И.[1], Ступина Т.С.[1], Санина Н. А.[1,2,3], Балакина А.А.[1]

[1]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

[3]*Московский государственный областной университет, Мытищи*

Транскрипционный фактор NRF2, влияющий на экспрессию генов, является ключевым белком-регулятором антиоксидантного ответа клеток на воздействие различных соединений. В связи с этим NRF2 считается перспективной терапевтической мишенью для лечения многих социально значимых заболеваний, в том числе опухолевых. Поиск соединений, влияющих на различные биохимические процессы в опухолевых клетках, также является актуальной задачей современной науки. Одним из таких соединений является нитрозильный комплекс железа с N-этилтиомочевиной, который обладает окислительно-восстановительным потенциалом за счет ионов железа, входящих в его состав, и является спонтанным донором оксида азота.

Исследование проводилось на клетках линии HepG2 (гепатоцеллюлярная карцинома человека). С помощью метода проточной цитофлуориметрии был проведен анализ профиля клеточного цикла при действии исследу-

емого соединения, который показал накопление клеток в области SubG1 и снижение их количества в других областях гистограммы, что говорит об активации клеточной гибели.

Изучение механизма клеточной гибели показало, что при действии комплекса происходит активация каспазы-3 — фермента, принимающего участие в регуляции процесса апоптоза. Также было установлено, что комплекс существенно снижает как экспрессию генов белков семейства IAP's — ингибиторов апоптоза, так и их внутриклеточное содержание.

Действие комплекса на клетки линии HepG2 сопровождалось существенным (в 6 раз относительно контроля) увеличением внутриклеточного содержания монооксида азота, а также значительным повышением (более, чем в 20 раз относительно контроля) внутриклеточной концентрации АФК.

В ходе работы было отмечено увеличение внутриклеточного содержания и ядерная транслокация redox-регулирующего транскрипционного фактора Nrf2 и активация его генов-мишеней, таких как *SOD2*, *TXN1*, *GPX1*, *NQO1*, *HMOX1* и *GCLM*.

Кроме того, была показана активация и ядерная транслокация транскрипционного фактора p53, а также увеличение экспрессии его генов-мишеней — *P21* и *PMAIP1*.

Таким образом, цитотоксическое действие нитрозильного комплекса железа с N-этилтиомочевиной на клетки связано с активацией апоптотической клеточной гибели и сопровождается активацией транскрипционных факторов p53 и Nrf2-зависимой антиоксидантной системы клеток.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННОГО ДЕРМАТИТА, ИНДУЦИРОВАННОГО ПЛОТНОИОНИЗИРУЮЩИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ НА МЫШАХ

Аникина В.А.[1], Сорокина С.С.[1], Попова Н.Р.[1], Замятина Е.А.[1], Шемяков А.Е.[2]

[1]ФГБУН Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН
[2]ФГБУН Физико-технический центр ФИАН

Количество зарегистрированных случаев злокачественных новообразований неуклонно растет и составляет ежегодно более 19 млн новых случаев. Более чем в 70% случаев эффективный метод лечения злокачественных новообразований — радиотерапия, которая применяется как самостоятельный метод лечения, а также в сочетании с химиотерапией и хирургией. Более чем в 90% радиотерапии применяются классические методы лечения, включающие применение редкоионизирующего излучения, которое имеет низкую линейную передачу энергии (ЛПЭ) менее 10 кэВ/мкм и высокую проникающую способность, поэтому передача энергии происходит по всему пути луча и затрагивает здоровые органы и ткани. К современным методам радиотерапии относится применение плотноионизирующего излучения (протоны, нейтроны), которое обладает высокой ЛПЭ (более 10 кэВ/мкм) за счет чего проникающая способность низкая, а наведение дозы прецизионное, что минимизирует повреждение здоровых тканей и органов.

Однако при любом методе радиотерапии в 95% случаев в качестве побочного эффекта формируется та или иная степень радиационного дерматита, которая варьируется от слабой эритемы и сухого шелушения до влажного шелушения, изъязвлений и хронического радиационно-индуцированного повреждения кожи. В следствии чего, актуальной проблемой современной радиационной биомедицины является разработка новых эффективных мер и средств профилактики и лечения радиационного дерматита. При этом для исследования таких средств необходимо разработать воспроизводимые экспериментальные модели радиационного дерматита in vivo, которых в настоящее время недостаточно, а модели радиодерматита, индуцированные плотноионизирующим излучением отсутствуют. В связи с чем, целью данного исследования является создание воспроизводимой модели протон-индуцированного радиационного дерматита на мышах.

Модель радиодерматита, индуцированного плотноионизирующим излучением (протоны), получена на самцах мышей колонии SHK. Проведена серия экспериментов, в ходе которых подобраны оптимальные доза, мощность, площадь воздействия и глубины проникновения пучка, а также отработаны методы фиксация, наркотизация и эпиляция животных. Анализ дозиметрической пленки, установленной под кожу животных, показал, что оптимальное значение энергии для облучения — 88,5 МэВ. Такое значение энергии является приемлемым поскольку максимум энерговыделения находится непосредственно в эпидермисе и дерме, не затрагивая подлежащие ткани и органы.

При выборе оптимальной дозы облучения были получены следующие результаты: при 35 Гр у 25% экспериментальных животных отмечено развитие радиодерматита 1-2 степени, при 45 Гр радиодерматит 2-3 степени отмечали у 33% животных, а облучение в дозе 50 Гр приводило к формированию радиационного дерматита у 100% животных. Кроме того, стоит отметить, что в группах 35 Гр и 45 Гр формирование ярко-выраженного радиационного дерматита отмечалось на 22-ые сутки, а увеличение дозы до 50 Гр способствовала сокращению латентного периода в 2 раза, что способствовало более быстрому течению патогенеза радиодерматита (острая эритема на 11-ые сутки). Выраженная стадийность и ускоренное формирование радиационно-индуцированного повреждения делают данную модель рациональной для оценки эффективности новых средств, предназначенных для профилактики и лечения радиационного дерматита.

ДЕКОРИРОВАННЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ: ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ ВОДОРОДА

Аникина Е.В., Бескачко В.П.

ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)»

Углеродные нанотрубки (УНТ) уже давно исследуются как возможный материал для водородных хранилищ во многом благодаря своей высокой удельной поверхности и прочности. Ранее уже было показано, что на чистых бездефектных трубках возможно достижение интервала энергий связи водорода (200-600 мэВ/H_2), необходимого для осуществления энергетически выгодных сорбционных-десорбционных циклов, только в случае внутренней сорбции на узких трубках. Однако в этом случае из-за стерических ограничений невозможно достигнуть приемлемой водородной емкости, которая внутри УНТ(5,5) не составляет и 1 масс. % (при требуемых 6,5 масс. %). Декорирование литием бездефектных УНТ позволило увеличить энергии связи водорода до нужных значений и в случае внешней сорбции. Если считать предельной концентрацию лития, при которой еще не образуется металлических кластеров, то водородная емкость при внешней сорбции лития и водорода на бездефектной УНТ составит 7-9 масс. % (3-4 молекулы водорода на один атом лития). При этом декорирование литием не влияет на сорбцию водорода по другую сторону стенки УНТ (различия с энергетическими характеристиками водородных комплексов на чистых УНТ лежат в пределах погрешности вычисления энергий связи).

Однако создаваемое атомом лития перераспределение электронной плотности может оказать влияние на второй атом лития, добавляемый с другой стороны стенки УНТ (приводя, например, к изменению заряда, передаваемого атомами металла нанотрубке). Это, в свою очередь, может изменить энергетические и геометрические характеристики водородного комплекса, образующегося вокруг адатома лития. Для проверки этой гипотезы была рассмотрена адсорбция водорода на бездефектных нанотрубках с двумя атомами лития, расположенными с двух сторон от одного углеродного гексагона.

Расчеты с применением теории функционала электронной плотности были проведены с помощью пакета SIESTA. Ячейка моделирования содержала 4 элементарных ячейки УНТ(7,7). В не периодичных направлениях было взято не менее 40 Å вакуума. Оптимизация параметров базисных наборов была проведена для всех элементов, составляющих рассматриваемую систему (H, C, Li). С разбиением *k*-точек 1x1x32 точность вычисления энергии связи водорода составила ~10 мэВ. Геометрия оптимизировалась методом сопряженных градиентов. В расчете энергии связи молекулы водорода учитывалась поправка Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора. Результаты расчетов с локальным приближением для обменно-корреляционного функционала представлены в таблице 1.

Таблица 1. Энергия связи (мэВ/H_2) молекулы водорода в комплексе УНТ(7,7)+2Li+$n$$H_2$

n	1	2	3	4
H_2 внутри	294	298	279	266
H_2 снаружи	218	209	226	202

Энергии связи H_2 в системе с двумя металлическими адатомами на ~15 мэВ превышали соответствующие энергии связи в системе, где присутствует только один атом лития. Таким образом, сделанные расчеты показывают, что в комплексах УНТ+Li+H_2 можно получить энергии связи вблизи или даже несколько выше требуемой границы. Исследование выполнено при финансовой поддержке молодой науки ЮУрГУ.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ ЭТОПОЗИДА НА ОСНОВЕ ГИДРОФОБИЗИРОВАННОЙ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Антонова М.М., Лисенкова Ю.С., Ермоленко Ю.В., Гельперина С.Э.

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

Гиалуроновая кислота (ГК) является одним из наиболее перспективных биополимеров-носителей для направленной доставки лекарственных веществ (ЛВ). В организме ГК связывается с клеточным рецептором CD44, гиперэкспрессия которого характерна для многих опухолевых клеток. Таким образом, ГК может выполнять роль не только носителя ЛВ, но и вектора для доставки его в опухолевые клетки. Особый интерес представляют гидрофобизированные производные ГК, способные образовывать мицеллы, которые могут быть нагружены гидрофобным ЛВ.

Цель настоящей работы — разработка метода получения мицеллярной формы труднорастворимого противоопухолевого ЛВ этопозида (ЕТО) на основе ГК, гидрофобизированной олеиновой кислоты (ГК-С18).

Для получения мицелл, нагруженных ЕТО, использовали метод упаривания растворителя. Суть его заключается в длительном перемешивании 40 мл 1 % водного раствора ГК-С18 с ЕТО, 20 мг которого растворяли в минимальном количестве этилового спирта. Полученную смесь упаривали на роторном испарителе до получения пленки, которую далее растворяли в дистиллированной воде. ЕТО, не включенный в мицеллы, удаляли путем фильтрации через стекловолоконный фильтр (1 мкм); полученный мицеллярный раствор лиофилизировали.

Гидродинамический диаметр полученных мицелл составил 373,7 нм (рис. 1), дзета-потенциал поверхности — -50,9 мВ. Эффективность загрузки ЕТО в мицеллы ГК-С18 составила 74,14%. Широкое распределение мицелл по размерам, PDI 0,344 (рис.1 а), объясняется их способностью собираться в ассоциаты. Нагруженные ЕТО мицеллы стабильны в течение 24 часов в физиологическом растворе и в клеточной среде DMEM. Их стабильность в среде RPMI сохраняется до разбавления в 200 раз.

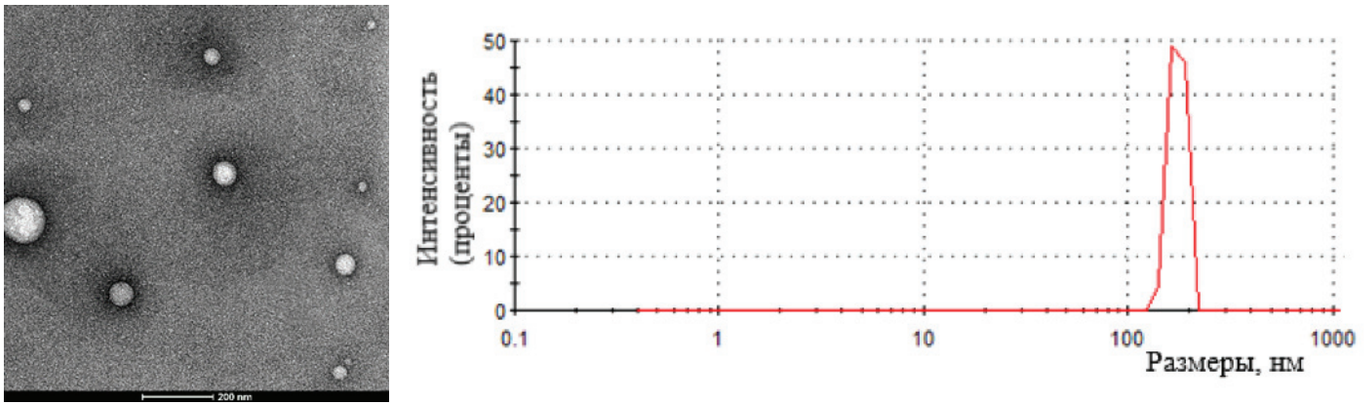


Рис. 1. а) ТЭМ изображения мицелл ГК-С18:ЕТО;
б) Распределение размеров полученных мицеллярных структур (метод динамического светорассеяния).

Можно ожидать, что использование мицелл на основе ГК-С18 позволит не только создать безопасную инъекционную форму этопозида, но и повысит селективность его действия в отношении опухолевых клеток.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-025-00381/20.

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЯ ДВУХТОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МУТАНТНЫХ ФОРМ БЕЛКА EGFP

Аслоповский В.Р., Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Флуоресцентные белки используются в биологических исследованиях в качестве маркеров для изучения живых клеток и тканей. Модифицированный зеленый флуоресцентный белок EGFP с улучшенными спектральными характеристиками является одним из наиболее широко используемых для этих целей. В настоящее время активно развивается и применяется двухфотонная флуоресцентная микроскопия, которая имеет ряд преимуществ перед традиционной конфокальной. Поскольку метод должен быть чувствительным, яркость флуоресценции должна быть как можно выше. Она зависит, в частности, от сечения двухфотонного поглощения и квадрата интенсивности падающего излучения, поэтому поиск флуоресцентных белков с большим сечением двухфотонного поглощения является важной задачей. Целью работы является анализ влияния окружения хромофора на сечение двухфотонного поглощения в белке EGFP.

В данной работе построена полная атомистическая модель мутации EGFP T203I, оптимизирована ее геометрия, рассчитано сечение двухфотонного поглощения и проведен анализ факторов, влияющих на него. Оптимизация геометрии проводилась методом QM/MM в варианте PBE0/(aug)-cc-pVDZ//CHARMM; квантовая часть содержала 159 атомов, включающих в себя хромофор и его ближайшее окружение. Энергии вертикальных электронных переходов рассчитаны методом XMCQDPT2 в базисе (aug)-cc-pVDZ с векторами нулевого приближения, полученными методом CASSCF в активном пространстве, состоящем из 14 электронов на 13 π-орбиталях хромофора, с усреднением электронной плотности по двум и по семи состояниям. Расчет момента перехода и разности средних дипольных моментов проведен в нулевом порядке этой теории. В работе проведен анализ влияния параметров расчетной схемы на величины сечений двухфотонного поглощения. Показано, что усреднение по большему числу состояний дает лучшее согласие с экспериментальными данными.

Сечение двухфотонного поглощения является макроскопической характеристикой вещества. Оно может быть рассчитано из микроскопической вероятности двухфотонного перехода, которая, в свою очередь, в рамках

двухуровневой модели зависит от разности энергий электронных уровней S_0 и S_1, дипольного момента перехода $S_0 \rightarrow S_1$ и разности средних дипольных моментов состояний S_0 и S_1. В рамках данной модели показано, что основной вклад в сечение двухфотонного поглощения вносит разница средних дипольных моментов при переходе $S_0 \rightarrow S_1$ ($\Delta\mu$). В случае EGFP изменение вектора разности средних дипольных моментов направлено от имидазольного кольца хромофора к фенольному. Таким образом, увеличение сечения двухфотонного поглощения EGFP может быть достигнуто путем модификации белкового окружения хромофора при введении точечных мутаций, влияющих на электростатическое поле белка вблизи хромофора. Увеличению сечения отвечает изменение заряда окружения фенольного кольца хромофора на более положительный, а имидазольного — на более отрицательный.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22-13-00126 с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

РАДИОПОГЛОЩАЮЩИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ BFO-PFN НА МИКРОПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ В СВЧ-ДИАПАЗОНЕ

Астафьев П.А., Жидель К.М.

Научно-исследовательский институт физики, Южный федеральный университет
Россия, 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194

Одной из актуальных областей применения функциональных материалов является СВЧ-техника. Сегнетоэлектрики и мультиферроики, обладая высокой диэлектрической проницаемостью, могут быть использованы в диэлектрических резонаторах и фильтрах, существенно снижая вес и габариты разрабатываемых систем. Возможность менять вектор спонтанной поляризации или намагниченности открывает возможности для создания перестраиваемых электрическим полем устройств. Для подобных разработок требуется проводить комплексные исследования электродинамических свойств материалов различных составов в СВЧ диапазоне с использованием различных методов. В настоящей работе твердые растворы (1-x)$BiFeO_3$-x$PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O_3$ рассматривается как перспективный материал диэлектрических резонаторов или фильтров.

Исследовалась зависимость положения собственных резонансных частот и ширины полосы поглощения цилиндрических образцов диаметром 12 мм и толщиной 1 мм от концентрации $PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O_3$ в диапазоне частот 300 кГц — 26,5 ГГц. Диаметр и толщина образцов варьировалась в пределах 5% относительно средних значений, что было связано со спецификой изготовления материала, однако даже небольшие отличия формы могут повлиять на положения резонансов, поэтому в данной работе речь идет лишь о качественной оценке. Измерения проводились с помощью векторного анализатора цепей P9375A «Keysight» при этом образцы помещались на отрезок микрополосковой линии (МПЛ). После получения зависимостей S-параметров от частоты рассчитывался коэффициент поглощения материала, как разность коэффициента рассеяния МПЛ с образцом и пустой МПЛ, которые рассчитывались с учетом S_{11} и S_{12}.

Исследования показали, что составы с высокой концентрацией $PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O_3$ (преобладает сегнетоэлектрическая фаза) практически не проявляют резонансного поведения, но при этом имеют наиболее узкую полосу поглощения (рис. 1).

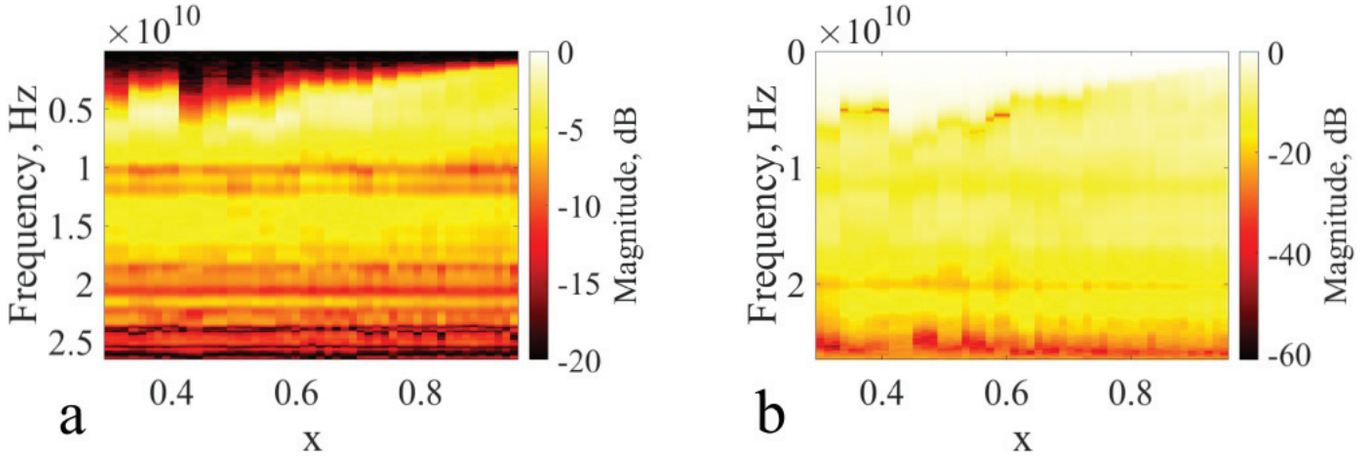


Рис. 1. Зависимости дисперсии коэффициента поглощения (a) и коэффициента передачи (b) от концентрации $PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O_3$.

Полученные результаты помогут в будущих исследованиях и выборе составов для дальнейшей разработки СВЧ-устройств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, научный проект № 0852-2020-0032), (БА30110/20-3-07ИФ).

ПОЛУЧЕНИЕ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОКСИДАЗ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ *OGATAEA PARAPOLYMORPHA* DL-1

Атрошенко Д.Л.[1,2], Шеломов М.Д.[1,3], Хороненкова С.В.[3], Ушакова Ю.А.[1], Савин С.С.[1,3], Тишков В.И.[1,2,3]

[1]Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия;
[2]Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Москва, Россия
[3]ООО «Инновации и высокие технологии МГУ», Москва, Россия

Оксидаза D-аминокислот (DAAO) — это фермент, который катализирует окисление D-аминокислот в соответствующие α-кетокислоты с образованием пероксида водорода и иона аммония. Этот фермент находит широкое практическое применение в различных областях биотехнологии.

Для успешного применения ферментов на практике необходимо проводить поиск и изучение новых ферментов с улучшенными свойствами. При анализе генома дрожжей *Ogataea parapolymorpha* DL-1 было обнаружено 6 генов, потенциально кодирующих оксидазы D-аминокислот.

В данной работе получены и охарактеризованы 5 из 6 данных ферментов. Для одного из 6 ферментов не удалось провести экспрессию в растворимой форме. Экспрессию проводили в клетках *E. coli* с последующей очисткой при помощи хроматографических методов.

Были определены основные физико-химические характеристики ферментов. Изучение кинических параметров показало, что все ферменты имеют различные спектры субстратной специфичности. Это является показателем важной биохимической функции данных DAAOs дрожжах, что ранее не было изучено. Кроме того, оказалось, что все ферменты обладают уникальными свойствами, делающими их интересными для использования на практике.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 21-34-70040).

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ЭМУЛЬСИЙ В ЦЕЛЯХ КОНТРОЛЯ РЕЖИМОВ ЖИРОПОДАВЛЕНИЯ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ

Панина О.Ю.[1], **Ахмад Е.С.[1],** Богачев Д.Ю.[2], Семенов Д.С.[1], Громов А.И.[3]

[1] Государственное бюджетное учреждение здравоохранения города Москвы «Научно-практический клинический центр диагностики и телемедицинских технологий Департамента здравоохранения города Москвы», Россия
[2] ООО «ЭмульКом»
[3] АО «Группа компаний «Медси»»

Целью данной работы стала оценка точности работы двухточечной и трехточечной Dixon технологий магнитно-резонансной томографии (МРТ) посредством сопоставления полученных данных при сканировании специально изготовленного фантома с заданными значениями процентного содержания жира.

Для моделирования веществ с разной концентрацией жировой фазы были выбраны прямые эмульсии типа «масло в воде» (массовая концентрация жира от 0 до 70%). Растворы были сформированы на основе растительных масел (подсолнечное и соевое). Для составления устойчивой эмульсии применялся эмульгатор BTMS. Для получения однородной физически стабильной эмульсии диспергирование (эмульгирование) проводилось путем нагрева эмульгатора, смешения его с растительным маслом и эмульгированием его с помощью ультразвукового диспергатора IKA Ultra Turrax T 25.

Пробирки с эмульсиями помещались в цилиндрический фантом. Сканирование выполнялось на МРТ томографе 1,5 Т Optima MR450w (GE, США) при двух режимах Dixon: двухточечный метод «Lava Flex» и трехточечный метод «IDEAL» (Рис. 1). По полученным МРТ изображениям оценивались данные фракции жира и в последствии сопоставлялись с заданными значениями.

Фантомное моделирование с использованием прямых эмульсий позволило определить смещение измеряемой фракции жира от заданных (истинных). В данной работе было продемонстрировано, что точность измерения процентного содержания жира в режиме «IDEAL» несколько выше, чем в режиме «Lava-Flex».



Рис. 1. Схема проведения эксперимента: а — установка готовых пробирок в фантоме; б, в — проведение МРТ-исследования фантома с РЧ-катушкой GEM Flex Body

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПРИ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ АВТОЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ СЛАБОСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ АНИОНОВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ

Белецан О.Б., Бойченко А.Н., Боченкова А.В.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

Фотоиндуцированный перенос электрона играет ключевую роль в таких процессах как радиационное повреждение ДНК, фотоактивация сенсорных белков, процессах астрофизики. Механизмы образования и релаксации метастабильных электронно-возбужденных состояний, являющихся ключевыми в процессах переноса электрона, в настоящее время изучаются с помощью фотоэлектронной спектроскопии молекулярных анионов в газовой фазе. Процессы переноса электрона из слабосвязанных электронно-возбужденных состояний приводят к появлению низкоэнергетических электронов в фотоэлектронных спектрах. Целью данной работы является развитие теоретических подходов изучения механизмов образования низкоэнергетических электронов из слабосвязанных состояний анионов биологических хромофоров.

В работе разработан и реализован метод расчета фотоэлектронных спектров при колебательной автоэмиссии электронов из слабосвязанных электронно-возбужденных состояний молекулярных анионов. Метод основан на расчете матричных элементов неадиабатического взаимодействия в пространстве как электронных, так и ядерных переменных. Матричные элементы неадиабатического взаимодействия в пространстве ядерных переменных рассчитывались в базисе колебательных волновых функций в модели смещенных многомерных гармонических поверхностей с параллельными нормальными модами. При расчетах также учитывалась термически неравновесная заселенность колебательных уровней в электронно-возбужденном состоянии молекулярного аниона при возбуждении из основного электронного состояния лазерными импульсами с различной энергией. Матричные элементы вектора неадиабатической связи между электронно-возбужденным и ионизированным состоянием молекулярного аниона в пространстве электронных переменных, спроектированные на нормальные моды, рассчитывались с помощью многоконфигурационного метода самосогласованного поля в полном активном пространстве CASSCF(12,12)/(aug)-cc-pVDZ+. Вычисления энергий и градиентов в различных электронных состояниях аниона проведены с использованием инвариантной многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений второго порядка в варианте XMCQDPT2/CASSCF(14,14)/(aug)-cc-pVDZ+.

С помощью разработанного метода исследован механизм колебательной электронной эмиссии из первого электронно-возбужденного состояния S_1 аниона хромофора зеленого флуоресцентного белка $pHBDI^-$ при его возбуждении в видимом диапазоне, а также проведена интерпретация низкоэнергетической области его экспериментальных фотоэлектронных спектров. Установлено, что электронно-возбужденное состояние S_1 изолированного анионного хромофора $pHBDI^-$ является слабосвязанным. Показано, что распределение электронов по кинетической энергии в фотоэлектронных спектрах этого аниона определяется матричными элементами неадиабатического взаимодействия S_1/D_0+e^-, связанными с определенными колебательными модами. Полученные

результаты позволили идентифицировать канал колебательной автоэмиссии электронов в экспериментальных спектрах и разделить несколько каналов эмиссии, приводящих к образованию низкоэнергетических электронов.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РФФИ №20-33-90183.

ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, ДИОКСИДА ТИТАНА И УГЛЕРОДА В ЖИВЫХ ОРГАНИЗМАХ

Гостева Е.А., **Белик К.Д.,** Зубарева П.Д.

Российский Университет Дружбы Народов, Москва, Россия

Благодаря открытию наночастиц у медицины появились новые возможности для развития, однако вместе с этим остро встал вопрос о безопасности использования нано-размерных веществ. Определение острой токсичности может существенно продвинуть науку в данном направлении, но в текущий момент ученые уделяют не так много внимания комплексному анализу токсичности наночастиц, останавливаясь лишь на определении их средне-летальных концентраций, полу-максимальных эффективностей и т.д. Помимо этого, в большинстве работ не приводятся нормативные документы, позволяющие определить класс опасности исследуемых веществ. Таким образом, цель данной работы — составить собственную классификацию острой токсичности, учитывающую большую выборку статей, по трем выбранным веществам: наночастицам серебра, диоксида титана и углерода, а также оценить полученные значения в рамках актуальности их использования. Чтобы определить острую токсичность исследуемых элементов, мы воспользовались двумя Межгосударственными стандартами: ГОСТ 32424–2013 и ГОСТ 12.1.007–76. Всего было найдено по 3 значения для наночастиц серебра, диоксида титана и углерода в статьях выпущенных за 2017–2022 годы.

Таблица 1. Результаты поиска значений показателей для определения класса опасности наночастиц

Испытуемый организм	Наночастица	Тип показателя	Значение	Класс опасности	ГОСТ
R. subcapitata	Нано-серебро	EC50 (72 ч)	0,045 мг/л	1	Первый
Грызуны	Нано-серебро	LD50	>5000 мг/кг	4	Второй
Грызуны	Гель серебра	LD50	1266 мг/кг	3	Второй
R. subcapitata	Нано-титан	EC50 (72 ч)	3,6 мг/л	2	Первый
D. Magna	Нано-титан	EC50 (48 ч)	30 мг/л	3	Первый
Грызуны	Нано-титан	LD50	>12 000 мг/кг	4	Второй
Artemia salina	Нано-углерод	EC50 (48 ч)	455 мг/л	4	Первый
Dunaliella t.	CNT	EC50 (96 ч)	0,8 мг/л	1	Первый
Грызуны	Фуллерен	LD50	600 мг/кг	3	Второй

Изучив результаты, был сделан вывод, что определение класса опасности по вышеописанным стандартам не позволяет сделать общий вывод по острой токсичности наночастиц серебра, диоксида титана и углерода по отдельности и вместе. Таким образом, оценка острой токсичности наноматериалов в научных работах должна заключаться в конкретных случаях для каждого элемента при учете всех его особенностей, таких как форма, кристаллическая решетка, главный размер и др.

CLAM-SHELL ФТАЛОЦИАНИНЫ МАГНИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ

Беликова А.А., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.

Ивановский Государственный Химико-Технологический университет

Фталоцианины — это макроциклы, которые содержат сопряженную 18-ти электронную систему и 4 изоиндольных фрагмента, которые связаны через мезоатомы азота. Clam-shell фталоцианины содержат в себе два фталоцианиновых макрокольца, соединённых мостиковыми заместителями по одному периферическому положению. Свойства таких соединений отличаются от их мономерных аналогов, что привлекло к себе внимание ученых. Данные соединения могут быть использованы в качестве полупроводников, нелинейно оптических ма-

териалов, катализаторов. Отдельно можно выделить применение таких фталоцианинов в ФДТ, так как на данный момент эта область активно развивается. Данный метод лечения предусматривает использование вещества, которое активируется при облучении его светом с определенной длинной волны — фотосенсебилизатора. К фотосенсебилизаторам предъявляются высокие требования, среди которых наличие длинноволновой полосы поглощения в электронных спектрах. Данные соединения обладают таким свойством и поэтому перспективны в этой области.

В рамках данной работы был проведен синтез димерного фталоцианина магния, соединенного мостиковым заместителем по одному периферическому положению. Синтез проводился в растворе изоамилового спирта при температуре кипения растворителя с использованием обратного холодильника. В качестве исходных соединений были использованы нитрилы различной структуры и четырехводный ацетат магния. Успешность синтеза проверяли с помощью масс-спектрометрии и ИК-спектроскопии, а также тонкослойной хроматографии. Предположительно реакционная смесь содержит 2 основных продукта: мономерный и димерный фталоцианин магния. На основании данных тонкослойной хроматографии была предпринята попытка разделения данной смеси с помощью экстракции из этанола, в процессе которой наблюдалось частичное растворение вещества.

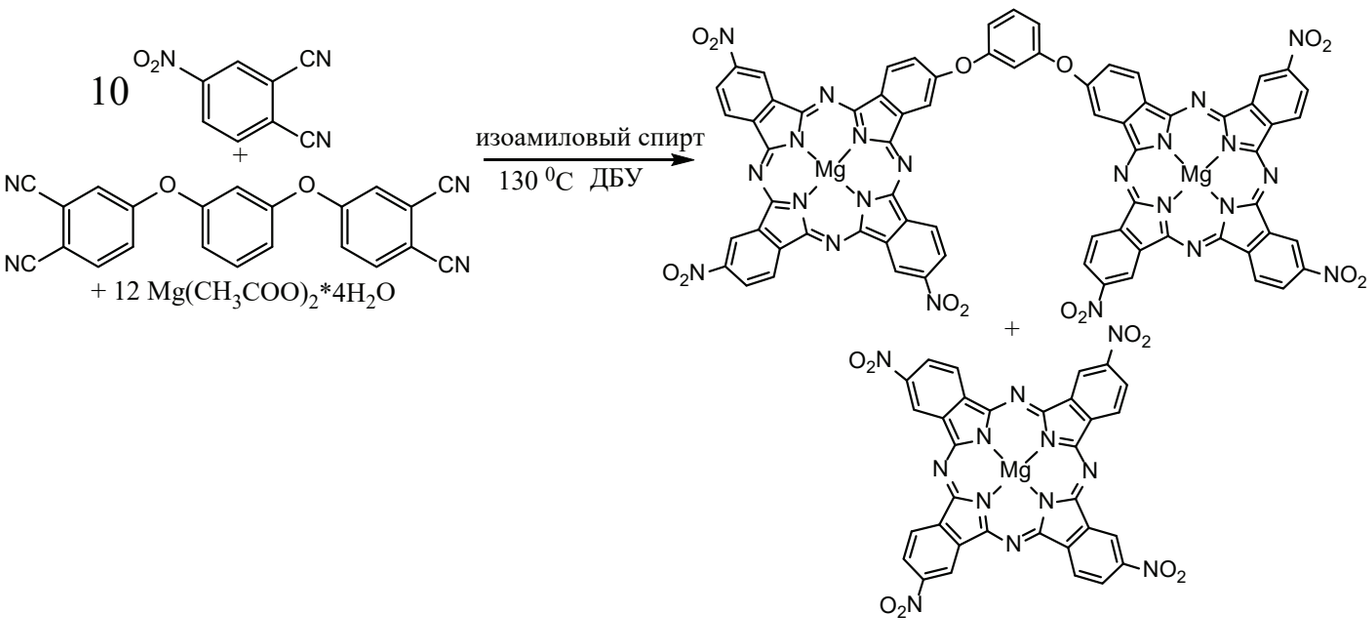


Рис. 1. Схема синтеза clam-shell фталоцианина магния

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного фонда, соглашение №17-73-20017

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ТОЛФЕНАМОВОЙ КИСЛОТЫ ПО ДАННЫМ NOESY

Белов К.В., Киселев М.Г., Соборнова В.В., Крестьянинов М.А., Ходов И.А.
ФГБУН «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова» РАН, Иваново, Россия

Толфенамовая кислота (ТФА) — представитель группы фенаматов, который применяется, как нестероидный противовоспалительный препарат (НПВП). Структура молекул ТФА включает фрагменты антраниловой кислоты и 3-хлор-2-метилфенильные группы, связанные через амидный мостик (см. Рис. 1а). ТФА обладает конформационно-определяемым полиморфизмом. При этом определение преобладающей конформации молекул лекарственных веществ в растворах с наличием интерфейса раздела фаз является ключом к пониманию особенностей формирования кристаллических форм. По данным квантово-химических расчетов получены параметры структуры конформеров ТФА, которые связаны с вращением 3-хлор-2-метилфенильной группы относительно антранилового фрагмента (см. Рис. 1б). Существует восемь полиморфных форм ТФА, которые характеризуются в том числе изменением конформаций, что обуславливает актуальность исследований. Для проведения расчета долей конформеров ТФА применен подход на основе анализа данных ядерного эффекта Оверхаузера (NOESY) в рамках модели изолированной спиновой пары (ISPA).

На основе результатов 1D (^{1}H, ^{13}C) ЯМР и 2D (^{1}H-^{13}C HSQC, ^{1}H-^{13}C HMBC, ^{1}H-^{1}H NOESY) проведено отнесение резонансных сигналов соответствующим протонам соединения. Выполнена идентификация кросс-пиков в 2D ЯМР спектрах и установлены величины химических сдвигов сигналов (см. Рис. 1в). Для расчета долей конформеров толфенамовой кислоты использован подход ISPA, в рамках которого определено расстояние между

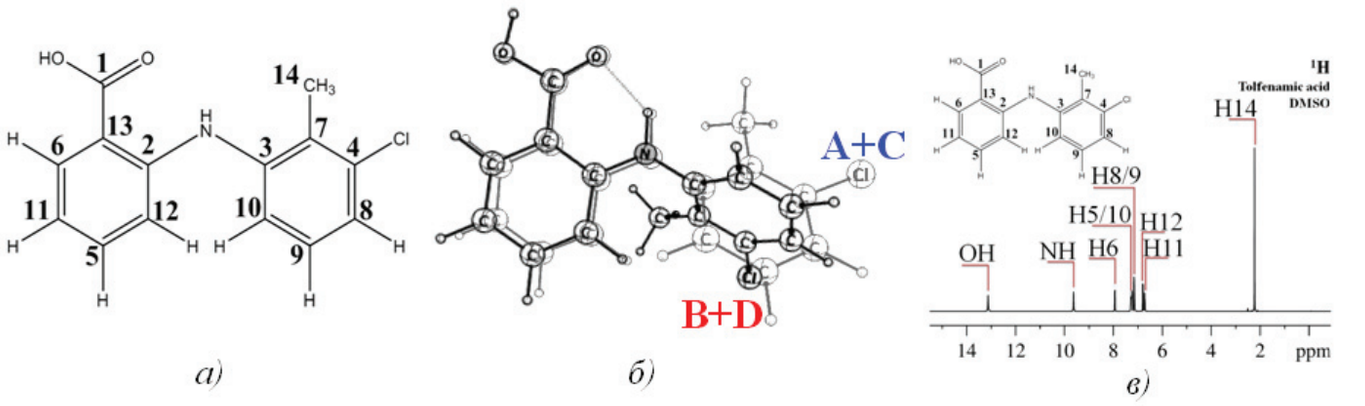


Рис. 1. а) Структура молекулы толфенамовой кислоты; б) пространственная структура преобладающих конформеров молекул толфенамовой кислоты; в) ^{1}H ЯМР спектр толфенамовой кислоты.

атомами водорода H12-H14 (r_{exp} = 3.42 Å). В то же время, для структур конформеров A,C и B,D из квантово-химических расчетов расстояние H12-H14 составляет r_1 = 4.84 Å и r_2 = 3.15 Å соответственно. Разница между r_{exp} и r_1 составляет 1.42 Å, а между r_{exp} и r_2 — 0.27 Å, следовательно, B и D являются преобладающими в растворе ДМСО. Численные значения долей конформеров определены с использованием выражения (1).

$$x_1 = r_1^6 \left(r_2^6 - r_{\text{exp}}^6 \right) / r_{\text{exp}}^6 \left(r_2^6 - r_1^6 \right)$$

При сравнении результатов ЯМР и данных кристаллографической базы показано, что характеристики конформаций молекул в растворе соответствуют параметрам структуры молекул в твердой фазе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ № 22-23-00793).

НЕЙРОПРОТЕКТОРНОЕ ДЕЙСТВИЕ ГИНЗЕНОЗИДОВ

Белякова Е.Д.[1], Искалиева А.Р.[1], Ереско С.О.[2,3], Айрапетов М.И.[4]

[1]Санкт-петербургскй государственный педиатрический медицинский университет
[2] Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет [3]Санкт-Петербургский государственный университет
[4] Институт экспериментальной медицины

Алкоголизм — заболевание, приводящее к расстройствам физического и психического здоровья. Длительное потребление этанола способствует развитию состояния нейровоспаления, приводящего к дегенерации различных структур в центральной нервной системе (ЦНС). Гинзенозиды — соединения, содержащиеся в растениях рода Panax, привлекают все большее внимание исследователей ввиду их потенциального ингибирующего действия на процессы нейровоспаления, которые до сих пор остаются точно не установленными.

Показано, что длительное воздействие этанола способствует развитию провоспалительных реакций в головном мозге посредством активации TLR-системы (система Toll-подобных рецепторов), а различные гинзенозиды (Rg1, Rg2, Rg3, Re, Rb1, Rh2) способны корректировать патофизиологические механизмы развития нейровоспаления. На основании результатов ряда исследований установлено повышение экспрессии CD40 мышиной клеточной линии N9 (клетки микроглии) при воздействии гинзенозида Rg1 (34 мкг/мл), а в эксперименте с крысами Rg1 (40 мг/кг) ингибирует активацию пути NF-κB и экспрессию провоспалительных цитокинов IL-1β, IL-6, TNF-α в префронтальной коре головного мозга крыс. Гинзенозид Rg2 (20 мг/кг) ингибирует увеличение экспрессии TLR4, MyD88 и NF-κB и снижает экспрессию провоспалительных цитокинов IL-1β, TNF-α в головном мозге крыс, а гинзенозид Rg3 (10 мг/мл) снижает активацию микроглии путем ингибирования NF-κB в клетках микроглии BV-2; Rg3 (20 мг/кг) снижает гибель клеток и подавляет экспрессию провоспалительных цитокинов IL-1α/β, IL-6, TNF-α и MCP-1 в головном мозге мышей. Гинзенозид Re (9 мкг/мл) снижает повышенную экспрессию CD40, индуцированную IFNy, ингибирует продукцию IL-6, TNF-α, NO и АФК в мышиной клеточной линии N9 (клетки микроглии); Re (7,5 мкг/мл) — ингибирует участвующие в экспрессии медиаторов воспаления CAMKs и MAPKs в микроглиальных клетках мыши BV2. Гинзенозид Rb1 (20 мкг/мл) увеличивает экспрессию miR-130b-5p в головном мозге крыс, что в свою очередь способствует снижению активации TLR4/ NF-κB, ингибированию апоптоза нейронов и экспрессии провоспалительных факторов. Гинзенозид Rh2 (20 мкг/мл) ограничивает высвобождение iNOS, IFN-γ и TNF-α из активированной микроглии BV2 и ткани головного мозга мыши,

повышая жизнеспособность нейронов в головном мозге, подавляет каскад сигналов TLR4/TRIF, ингибирует экспрессию TLR4, ослабляет пути передачи сигналов от NF-κB.

Определённые виды гинзенозидов (Rg1, Rg2, Rg3, Re, Rb1, Rh2) способны снижать уровень нейровоспаления, воздействуя на различные компоненты провоспалительного иммунного ответа. Способность гинзенозидов, содержащихся в экстракте растений рода Panax, по всей видимости, снижать TLR-активацию микроглии представляет собой новую терапевтическую мишень для модуляции иммунных функций в нейродегенеративных заболеваниях ЦНС.

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ СОСТАВА MOX2 (X=S, SE) В КАЧЕСТВЕ АНОДА ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Березникова Л.А.[1], Суханова Е.В.[2], Попов З.И.[2]

[1] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный*

[2] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук, Москва*

Актуальной задачей современного материаловедения является поиск материалов для применения в металл-ионных аккумуляторах повышенной ёмкости. Перспективным классом двумерных материалов для такого применения являются дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), представляющие собой слой атомов переходного металла, располагающийся между двумя слоями атомов халькогена и имеющие структурную формулу MX2.

В представленной работе исследуется новая фаза состава MoX2, полученная методом поиска случайных структур — Ab initio Random Structure Searching (AIRSS). Стабильность данной структуры была исследована при помощи построения спектров фононных колебаний. Далее была рассмотрена адсорбция атомов щелочных металлов Li и Na на поверхности новой структуры и определены барьеры миграции атомов по поверхности (Рисунок 1). Это позволило показать наиболее вероятные пути миграции атомов по поверхности монослоя. Благодаря структурным особенностям, рассматриваемой фазы, атомы щелочных металлов имеют возможность диффундировать не только вдоль межслоевого пространства, но и в поперечном направлении за счет наличия пор, это позволяет рассматривать новую структуру в качестве высокоемкостного материала для металл-ионных аккумуляторов.

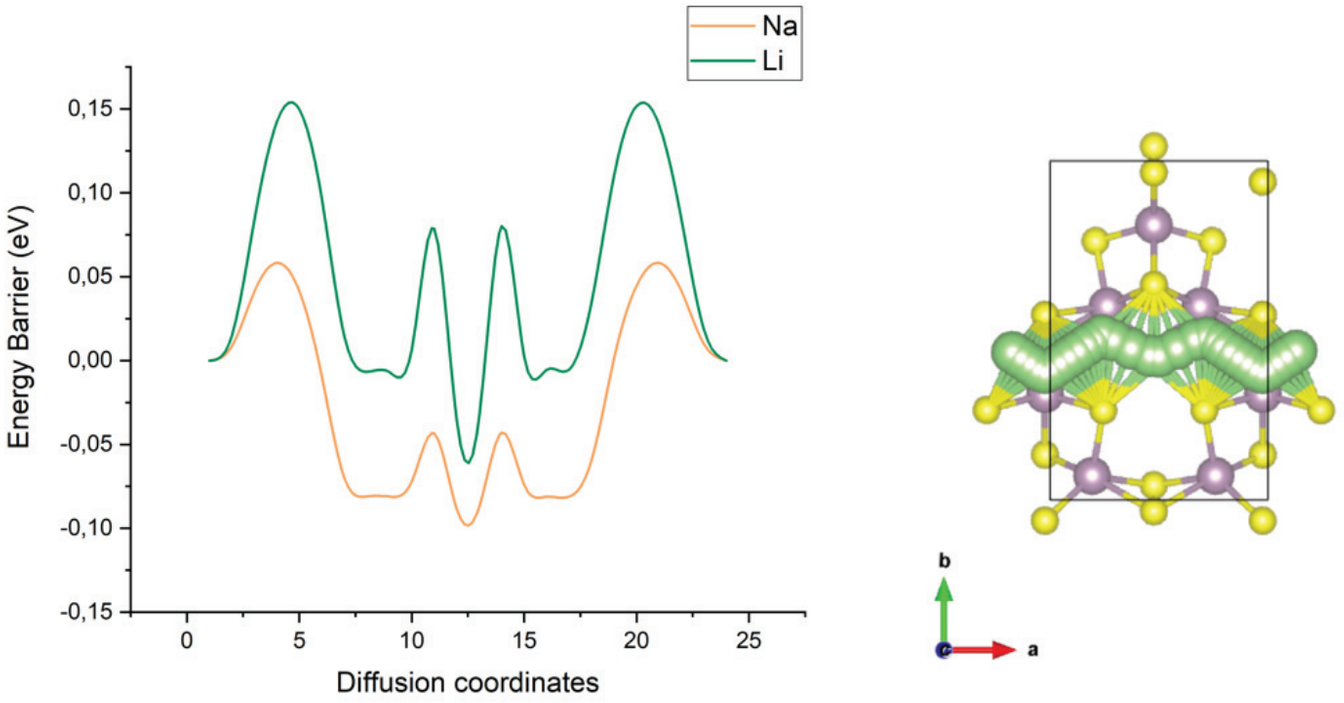


Рис. 1. Пути диффузии щелочного металла на поверхности монослоя **MoS2**

СИНТЕЗ СЕНСОРНЫХ ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ С BODIPY

Бобров А.В., Молева Н.В., Марфин Ю.С.

Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет

Флуоресцирующие молекулы в настоящее время активно используются в качестве зондов для исследования физико-химических и биохимических систем из-за высокой чувствительности метода, также сильное влияние на спектральные характеристики люминофора оказывает окружающая среда. Одними из перспективных и наиболее исследуемых соединений в этой области является класс открытоцепных олигопирролов — борфторидные комплексы дипирролилметенов (BODIPY). За счёт узких полос поглощения и флуоресценции, а также довольно простой модификации заместителей их применяют в различных областях науки и техники. Люминофоры на основе BODIPY обладают выраженным откликом на изменение природы окружения их используют как сенсоры на отдельные молекулы, среди которых, например, молекулы ацетона, этанола и бензола. Поэтому данные люминофоры могут найти применение в медицине для диагностики некоторых заболеваний, а также для мониторинга содержания паров ацетона, этанола и бензола в воздухе промышленных предприятий и лабораторных помещений. Но, большинство таких сенсоров — жидкофазные, что представляется эксплуатационно не удобным. Одним из способов решения данной задачи является иммобилизация молекул сенсоров в состав матриц-носителей. В качестве матрицы нами были выбраны этилцеллюлоза которая в настоящее время доступна, относительно недороги, проста в использовании и позволяют закрепить краситель.

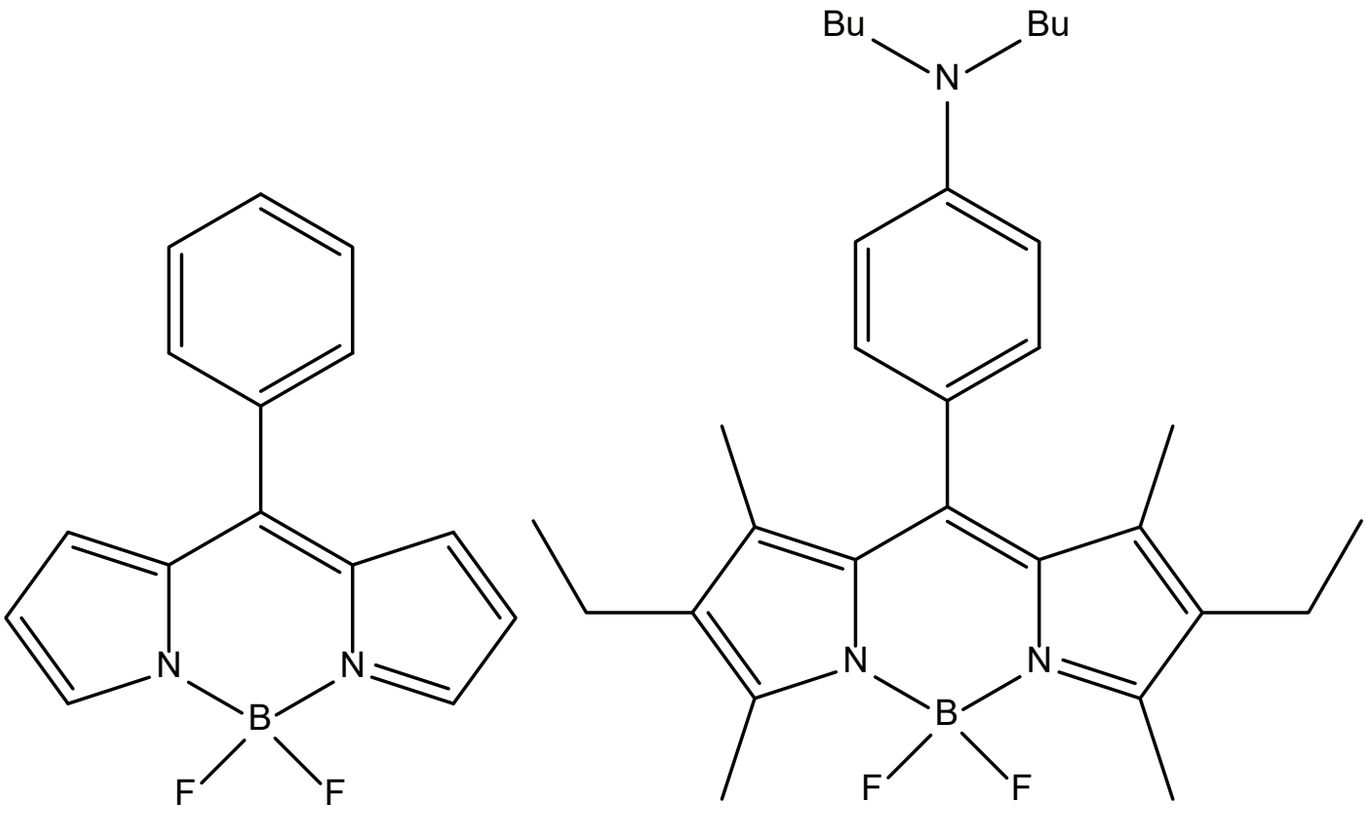


Рис. 1. Используемые в работе BODIPY.

В данной работе описывается получение и исследование сенсорных свойств материалов *мезо*-фенил/дибутиламинофенил замещенного BODIPY в полимерных матрицах на основе этилцеллюлозы которые дают отклик на пары ацетона, бензола и других легколетучих растворителей.

В ходе работы получены гибриды таблетированной формы, допированные *мезо*-фенил/дибутиламинофенил BODIPY. Определено влияние паров ацетона, бензола и спиртов на изменение спектральных характеристик материала. Определены пределы обнаружения ацетона, этанола и бензола для материлов. Доказана возможность использования гибридных материалов с BODIPY люминофором в качестве сенсора на наличие паров ацетона, этанола и бензола.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90172).

ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПЕСТИЦИДА, ПРОИЗВОДНОГО СЛОЖНОГО 2-ЭТИЛГЕКСИЛОВОГО ЭФИРА, В ТРЕХМЕСЯЧНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Богданова А.В.

Федеральное бюджетное учреждение науки «Федеральный научный центр гигиены им. Ф. Ф. Эрисмана» Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека

Действующие вещества пестицидов, рекомендуемых к применению в сельском хозяйстве, должны проходить всестороннее токсиколого-гигиеническое изучение, что является основой для предотвращения неблагоприятного влияния пестицидов на здоровье работающих и населения, а также на санитарное состояние окружающей среды.

Целью работы являлось определение параметров острой токсичности при введении вещества в желудок и нанесении на кожу, оценка раздражающего действия на кожу и слизистую оболочку глаза, изучение сенсибилизирующего эффекта и характера биологического действия пестицида, производного сложного 2-этилгексилового эфира в 3-х месячном субхроническом эксперименте.

Токсикологические исследования выполнялись в соответствии с принятыми методическими подходами, соответствующими принципам надлежащей лабораторной практики (GLP). В 3-х месячном субхроническом эксперименте на крысах-самцах были испытаны следующие дозы пестицида: 1, 5 и 15 мг/кг массы тела. Оценка функционального состояния организма животных была проведена по интегральным и специфическим показателям.

В результате проведенных исследований были установлены параметры острой токсичности, было оценено раздражающее действие на кожу и слизистую оболочку глаза, проведена оценка сенсибилизирующего эффекта, был изучен характер биологического действия вещества в субхроническом эксперименте. Так, были установлены параметры: $ЛД_{50}$ перорально для самцов крыс 989,86±202,45 мг/кг массы тела, $ЛД_{50}$ дермально > 2000 мг/кг массы тела. Было выяснено, что действующее вещество пестицида не оказывает раздражающего действия на кожу крыс и кроликов, однако оказывает раздражающее действие на слизистую оболочку глаза кроликов, и при этом не обладает сенсибилизирующим эффектом.

Установлено, что при многократном пероральном введении производного пестицида, сложного 2-этилгексилового эфира, он обладает политропным действием на организм крыс-самцов в дозе 15 мг/кг массы тела. Дозы пестицида 1 и 5 мг/кг не вызывали статистически значимых изменений в организме подопытных животных по изученным показателям.

Таким образом, доза производного пестицида, сложного 2-этилгексилового эфира, 5 мг/кг может быть принята в качестве недействующей (NOEL), а доза 15 мг/кг в качестве действующей.

ОПИСАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ СОЛЬВАТАЦИИ НА ВЕРТИКАЛЬНЫЕ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ В РАСТВОРЕ

Бойченко А.Н., Боченкова А.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Флуоресцентные белки широко используются в различных областях науки и техники, например биоимиджинге. Известно, что они могут подвергаться процессам фотоиндуцированного окисления, протекающим через электронно-возбужденные состояния хромофора белка, что сопровождается изменением их спектральных свойств и может быть использовано для создания новых светочувствительных редокс-биосенсоров для визуализации внутриклеточных процессов. Одной из наиболее важных характеристик процесса фотоокисления является энергия вертикальной ионизации хромофора в конденсированной фазе. Данную величину можно определить с помощью микрожидкостной фотоэлектронной спектроскопии в сочетании с методами квантовой химии. Целью данной работы является разработка метода расчёта энергии вертикальной ионизации анионных биологических хромофоров в водном окружении, анализ эффектов сольватации на рассчитываемые величины и способов описания этих эффектов.

Разработанный метод представляет из себя гибридный подход, который позволяет учесть эффекты специфической сольватации ближайших молекул воды, связанных сильными водородными связями с анионами хромофоров, эффектов микросольватации и макросольватации на разных уровнях теории. Параметры равновесных геометрических конфигураций исследуемых систем большого размера (вплоть до 19 000 молекул воды) ищутся в рамках нескольких этапов, которые включают в себя молекулярно-динамическое моделирование с использованием классических молекулярно-механических силовых полей, оптимизацию микросольватированной системы

с 1000 молекулами воды на основе теории функционала электронной плотности в комбинации с методом потенциалов эффективных фрагментов DFT/EFP и последующее увеличение системы до макросольватированной системы в рамках классических подходов с фиксированной геометрией микросольватной оболочки. Энергии вертикальной ионизации в зависимости от размера системы рассчитываются с помощью разностной схемы на уровне DFT/EFP, а также в рамках расширенного варианта многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений XMCQDPT2/EFP. Преимущество метода XMCQDPT2/EFP заключается в возможности получения сбалансированной оценки для энергий нескольких порогов ионизации, а также для энергий вертикального возбуждения анионов в рамках одного расчета. В качестве объектов исследования были выбраны фенолят-анион — типичный модельный фрагмент наиболее важных биологических хромофоров, а также хромофоры зеленого флуоресцентного белка (GFP) и желтого фотоактивного белка (PYP).

Рассчитанные значения энергии вертикальной ионизации хорошо согласуются с экспериментальными значениями для всех исследуемых систем. Обсуждается важность размерных, структурных и поляризационных эффектов для получения количественных оценок энергии вертикальной ионизации биохромофоров в водном окружении. Также обсуждается влияние параметров расчетной схемы на уровне XMCQDPT2/EFP. Полученные результаты позволяют интерпретировать экспериментальные спектры многофотонной ионизации фенолят-иона и анионных хромофоров белков GFP и PYP и установить роль электронно-возбужденных состояний в процессе их фотоиндуцированной ионизации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-33-90183 с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА-БОЛЬЦМАНА И СООТВЕТСТВУЮЩИЕ ИМ ТЕНЗОРЫ НАПРЯЖЕНИЙ. ПРИЛОЖЕНИЕ К НЕОДНОРОДНЫМ ИОННЫМ ЖИДКОСТЯМ И РАСТВОРАМ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Будков Ю.А.[1,2]

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)
[2]Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН

В докладе будет представлен общий теоретико-полевой подход, основанный термодинамической теории возмущений, позволяющий получать из первых принципов модифицированные уравнения Пуассона-Больцмана для неоднородных растворов электролитов и ионных жидкостей как уравнение Эйлера-Лагранжа для большого термодинамического потенциала как функционала электростатического потенциала. Используя теорему Нётер, будет получено общее выражение для тензора напряжений и, на основе этого, получены общие выражения для макроскопической силы, действующей на диэлектрик или проводник, погруженный в ионную жидкость. Кроме того, будет получено общее среднеполевое выражение для расклинивающего давления в неоднородном растворе электролита или ионной жидкости, заключенной в плоской наноразмерной поре.

Работа поддержана грантом Президента РФ (МД-341.2021.1.3) и грантом РНФ (21-11-00031).

СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СОПОЛИМЕРОВ ВИНИЛИДЕНФТОРИДА, ДОПИРОВАННЫХ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ

Бурьянская Е.Л.[1,2], Градова М.А.[1], Градов О.В.[1], Киселев Д.А.[2], Ильина Т.С.[2], Кочервинский В.В.[3]

[1]ФИЦ ХФ РАН, Москва
[2]НИТУ «МИСиС», Москва
[3]АО «ВНИИХТ», Москва

Биосовместимость, высокая химическая и термическая стабильность, а также пиро- и пьезоэлектрические свойства сополимеров винилиденфторида (ВДФ) обуславливают широкий интерес к материалам на их основе. По сравнению с жесткими и хрупкими неорганическими материалами сегнетоэлектрические полимеры широко используются в гибких электронных устройствах, датчиках и сенсорах. Это обуславливает актуальность и практическую значимость исследований свойств сополимеров ВДФ и разработки технологий получения материалов с заданными характеристиками.

Плёнки на основе сополимера дифторэтилена с гексафторпропиленом (ПВДФ-ГФП) были получены методом полива при комнатной температуре в атмосфере воздуха. Допирование полимерной матрицы тетрапиррольными красителями — тетрафенилпорфирином (ТФП) и его цинковым комплексом (ZnТФП) производилось путем кристаллизации пленки из общего растворителя — ацетона. Концентрация полимера в растворе составляла 5%, а концентрация красителя 10^{-4}–10^{-5} моль/л.

Образцы исследованы методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и силовой микроскопии пьезоотклика (СМП). Получены изображения поверхности внутренней и внешней сторон пленок, а также сигналы латерального и вертикального пьезоотклика и петли локального пьезоэлектрического гистерезиса. Рассчитаны значения среднеквадратичной шероховатости. Амплитуда сигналов пьезоэлектрического отклика выше для внешней (шероховатой) стороны. Для всех образцов характерно наличие микропор, возникших в процессе кристаллизации при испарении растворителя.

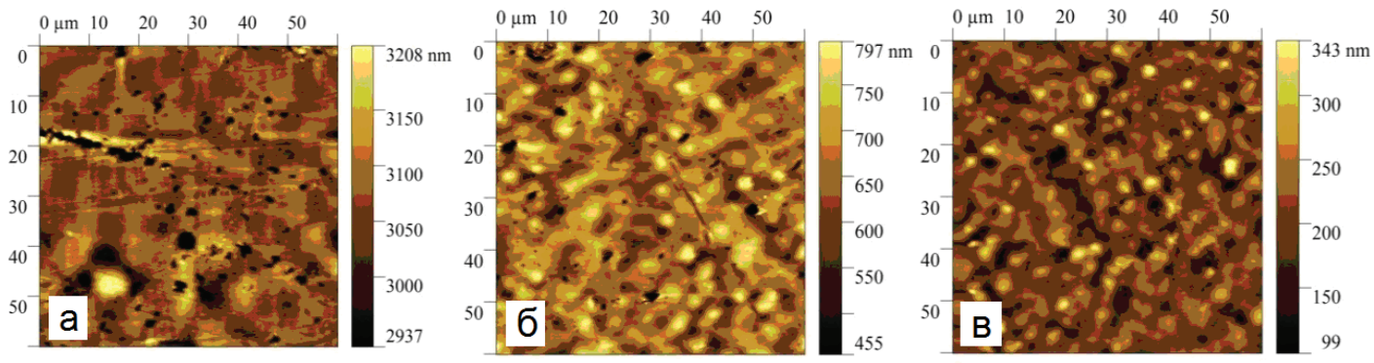


Рис. 1. АСМ изображения поверхности сегнетоэлектрических полимерных пленок (а — ПВДФ-ГФП без красителя; б — ПВДФ-ГФП с ТФП; в — ПВДФ-ГФП с ZnТФП)

Методом ИК-Фурье спектрометрии исследовано соотношение полиморфных фаз в пленках в зависимости от добавленного красителя. Выявлено, что каждому из трех изученных образцов присуще наличие сегнетоэлектрической β-фазы, но при добавлении красителя увеличивается доля α-фазы. По данным оптической спектроскопии ТФП в полимерной матрице находится в протонированной форме, а ZnТФП подвергается агрегации. Плёнка, допированная ТФП обратимо изменяет окраску в зависимости от кислотности среды, что позволяет рассматривать материал в качестве основы pH-сенсора.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №FFZE-2022-0009 «Полимеры и композиционные материалы нового поколения с заданными комплексами механических и функциональных свойств: синтез, структура и свойства, теория и моделирование».

ЧАСТИЦЫ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ КАК НОСИТЕЛИ ИНТРАНАЗАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Бусленко А.В.[1], Ванцян М.А.[1], Трушина Д.Б.[2,3], Букреева Т.В.[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»
[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3]ФГАОУ ВО Первый МГМУ имени И.М. Сеченова

При создании новых лекарственных форм минимальный расход действующего вещества, его контролируемое высвобождение, а также снижение токсических эффектов могут быть обеспечены иммобилизацией целевых веществ на частицах-носителях. В настоящее время интраназальный способ введения является одной из перспективных стратегий повышения эффективности доставки лекарственных средств в мозг. С этой целью в качестве носителя могут быть использованы пористые частицы карбоната кальция структурной модификации ватерит. В данной работе исследована загрузка частиц $CaCO_3$ лекарственным препаратом кортексин. Кортексин представляет собой смесь пептидов, поэтому он быстро деградирует при введении в кровоток. Кроме того, интраназальное введение препарата безболезненно и удобно для пациентов.

Кортексин загружали в частицы карбоната кальция двумя способами: адсорбцией и соосаждением. По данным динамического светорассеяния средний размер контейнеров составил 3,0± 0,5 мкм. С помощью гель-проникающей хроматографии была показана селективность включения различных фракций пептидного препарата методом соосаждения. При загрузке методом адсорбции обе фракции включаются в частицы (табл.1).

Таблица 1. Результаты гель-проникающей хроматографии.

Раствор	Фракция	Молекулярная масса, кДА	Содержание фракции, масс. %
Исходный р-р кортексина	Высокомолекулярная	20-300	32.23
	Низкомолекулярная	0.4-0.6	67.77
Супернатант после адсорбции	Высокомолекулярная	20-300	35.36
	Низкомолекулярная	0.4-0.6	64.64
Супернатант после соосаждения	Высокомолекулярная	-	-
	Низкомолекулярная	0.5-20	100

Также была показана возможность адсорбции гиалуроновой кислоты на поверхности контейнеров для придания им мукоадгезивных свойств с целью увеличения времени нахождения частиц в носовой полости.

Параметры разработанных контейнеров (средний размер, загрузка, мукоадгезивная оболочка) свидетельствуют об их перспективности для интраназальной доставки препарата.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТОПЛИВНОЙ СТРУИ

Бырдин К.А.[1], Сметанюк В.А.[1], Фролов С.М.[3]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия*

[2]*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

Расчет самовоспламенения струи жидкого топлива (керосина) требует совместного использования моделей дисперсной среды и газофазных реакций. Результат расчета определяется достоверностью моделирования каждого элементарного процесса и всего явления в целом. В работе газофазное окисление жидкого керосина моделировали с помощью глобального и детального кинетического механизма н-додекана или суррогата, состоящего из 9 нормальных алканов с числом атомов углерода от 8 до 16. Применение глобального механизма позволило получить удовлетворительное согласие результатов по задержкам самовоспламенения, полученным с помощью детального механизма (отличие менее чем в 1,5-2 раза), а также с экспериментальными данными.

Для описания нагрева/испарения и дробления капель керосина использовали модель Фролова и WAVE модель соответственно. Модель испарения проверена путем сравнения с экспериментами в условиях микрогравитации: получено удовлетворительное согласие результатов по величине константы испарения k и по времени испарения капли. Так, для капель н-декана, различие по величине k между расчетами и экспериментами составило менее 6%. Для капель н-гексадекана максимальная ошибка по k не превышала 50%. Отметим, что при использовании стандартной модели Дуковича ошибка определения константы испарения k достигала 100% и более. Модель дробления содержит две модельных константы. Корректировка константы, определяющей время дробления капли, позволяет получить хорошее согласие расчетных и экспериментальных результатов в задаче о

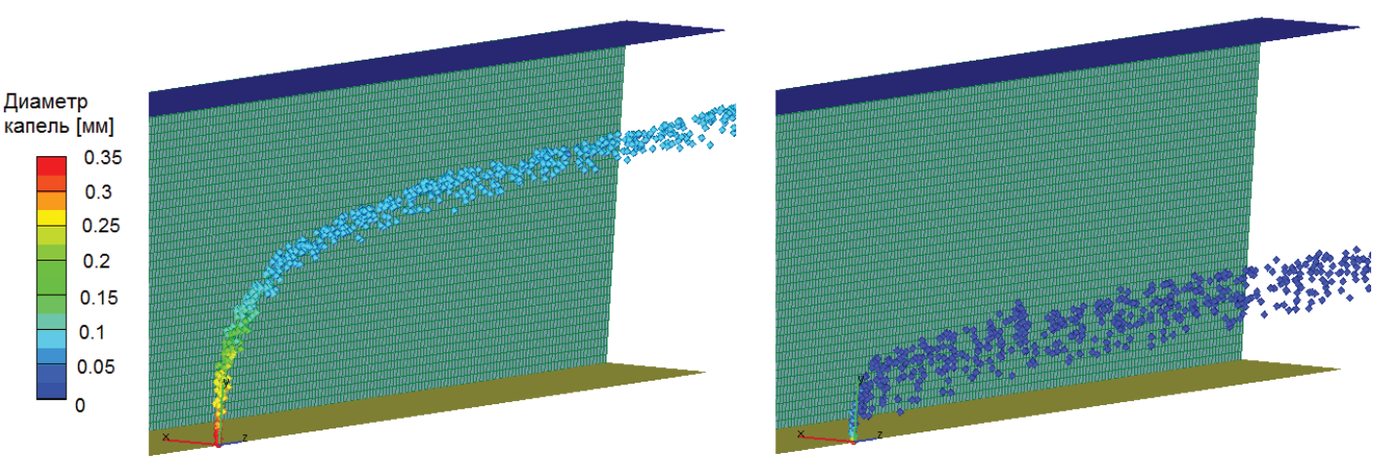


Рис. 1. Вид капельного факела при поперечном впрыске в поток воздуха для константы, определяющей время дробления капли, равной 30 (а) и 1 (б) соответственно.

поперечном впрыске струи керосина в холодный поток. Пример капельного факела при впрыске жидкой струи в поток показан на рис.1.

В задаче о самовоспламенении струи керосина в камере постоянного объема использованы как детальный, так и глобальный кинетические механизмы. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных самовоспламенении струи керосина в камере постоянного объема показывает удовлетворительное совпадение как по времени задержки самовоспламенения от начала впрыска, так и по положению зоны продуктов сгорания.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФТАЛОЦИАНИНОВ, СОДЕРЖАЩИХ НА ПЕРИФЕРИИ АЗОХРОМОФОРЫ

Бычкова А.Н., Еремеев И.Е., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Фталоцианины привлекают внимание исследователей на протяжении многих лет. Синтезировано и идентифицировано большое количество новых фталоцианиновых лигандов и их комплексов. Введение на периферию молекулы фталоцианинов азохромофоров позволит расширить диапазон светопоглощения. Фталоцианины данного типа имеют большое практическое значение и могут быть использованы не только в качестве пигментов и красителей, а также в качестве материалов для солнечной энергетики, микроэлектроники, фотосенсибилизаторов для ФДТ.

Практическое использование фталоцианиновых макроциклов ограничено из-за их низкой растворимости и проявления самоассоциации, однако при химической модификации периферии макроцикла фталоцианина и координации редкоземельных элементов возможно улучшить растворимость целевых комплексов и избежать агрегации.

В связи с этим целью настоящей работы был синтез и изучение физико-химических свойств фталоцианинатов эрбия и гадолиния, содержащих на периферии азохромофорные группы.

Синтез осуществляли темплатной конденсацией соответствующего фталонитрила с ацетатом эрбия и гадолиния в кипящем изо-амиловом спирте в присутствии ДБУ (схема 1). Разделение полученных продуктов проводили с привлечением колоночной хроматографии на силикагеле.

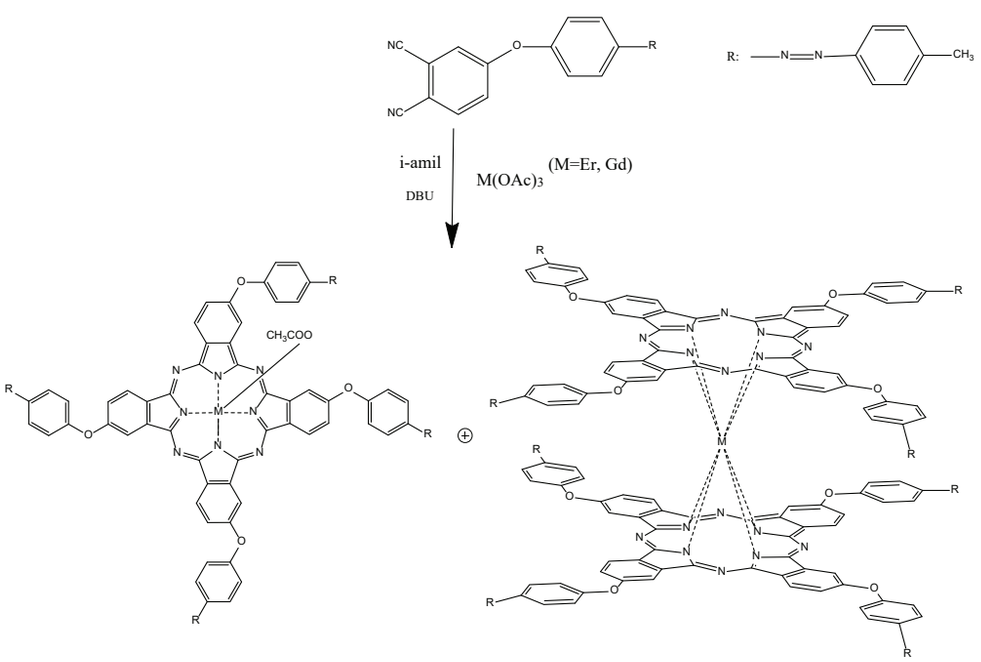


Рис. 1. Схема синтеза фталоцианинов, содержащих на периферии азохромофоры

Идентификацию состава и структуры данных соединений проводили с помощью современных физико-химических методов.

Благодаря хорошей растворимости целевых комплексов в органических растворителях изучены их спектральные свойства. Показано, что сочетание фталоцианиного и азохромофора расширяет диапазон спетопоглощения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение 22-23-00831 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

ОСОБЕННОСТИ ФЛУКТУАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ ИДЕАЛЬНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОЛЕЦ С БОЛЬШИМ РАДИУСОМ ИНЕРЦИИ

Валов А.Ф.

Федеральный Исследовательский Центр «Химическая Физика» им. Н.Н. Семёнова Российской Академии Наук

Изучается статистика идеальной полимерной петли длины N, радиус инерции которой линейно зависит от длины R_g=cN, где c — некоторая константа. Показывается, что задача о флуктуациях кольцевого полимера с большим фиксированным радиусом инерции может быть сведена к задаче о блуждании заряженной частицы во внешнем постоянном магнитном поле. Численно и аналитически показывается, что флуктуации замкнутого случайного блуждания с фиксированным радиусом инерции принадлежат гауссову классу универсальности. Показывается, что с помощью дополнительных геометрических ограничений можно ввести траектории в режим аномального флуктуационного поведения с показателем флуктуаций 1/3, типичным для класса универсальности Кардара — Паризи — Жанга.

СТРУКТУРИРОВАНИЕ И ОБРАЗОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ И ФАЗ ПРИ ОБРАБОТКЕ ВОДНЫМИ ФЛЮИДАМИ ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ КАТАЛИЗАТОРОВ LA/AL_2O_3

Васютин П.Р.[1], Синев М.Ю.[1], Лагунова Е.А.[1], Ивакин Ю.Д.[2], Гордиенко Ю.А.[1]

[1]*Федеральный Исследовательский Центр «Химическая Физика» им. Н.Н. Семёнова Российской Академии Наук, Москва, Россия*

[2]*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

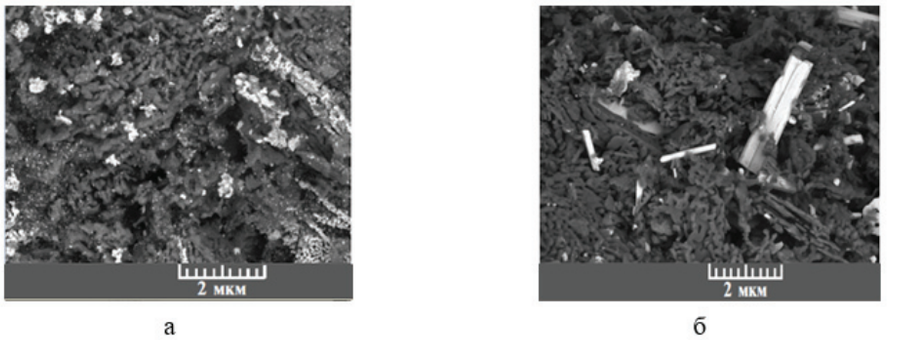
Обработка материалов в среде водных флюидов (ВФ) — один из наиболее перспективных и быстроразвивающихся методов получения кристаллических оксидных материалов, в том числе их метастабильных форм, традиционный термический синтез которых невозможен.

Гетерогенные катализаторы, как правило, являются композиционными материалами, в состав которых входят компоненты различной химической природы, сложно взаимодействующие между собой. Основными факторами для достижения высоких показателей активности, селективности и стабильности, а также необходимых механических характеристик являются определенный химический и фазовый состав композита, его морфология, размеры частиц компонентов, их структура, и взаимное расположение.

В данной работе рассмотрено влияние свойств носителя и условий синтеза (температура обработки, плотность и состав ВФ) нанесенных лантансодержащих систем на их структуру и каталитические свойства в процессе окисления метана.

Показано, что высокотемпературная обработка предшественников систем La_2O_3/α-Al_2O_3, на основе носителей различной морфологи приводит к образованию различных соединений лантана ($LaAlO_3$, $La_{10}Al_4O_{21}$ и La_2O_3), причем интенсивность химического взаимодействия носителя и нанесенного компонента коррелирует с плотностью структуры оксида алюминия. Установлено, что процессы структуро- и фазообразования в системах La_2O_3/Al_2O_3 протекают с разной скоростью и по различным механизмам при обработке ВФ и при высокотемпературной обработке. Например, при воздействии ВФ на системы, содержащие предшественник оксида лантана на α-Al_2O_3, полученный из коммерческого γ-Al_2O_3 компании «Sorbis Group», образуются вытянутые хорошо ограненные призмовидные кристаллы и кристаллы округлой формы, структуры первого типа представляют собой частицы $La(OH)_3$, а второго — алюмината лантана (рис. 1б). При высокотемпературной обработке на поверхности носителя наблюдается только образование кристаллов $LaAlO_3$ (рис. 1а).

Обсуждается возможность варьировать морфологию и структуру композитов при сочетании обоих методов воздействия. а также управляемо менять каталитические свойства при одинаковом брутто-составе.



а б

Рис. 1. Микрофотографии образцов La_2O_3/α-Al_2O_3:
а — прошедшего высокотемпературную обработку на воздухе;
б — обработку в ВФ.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАРРАГИНАНА

Винник Д.А.[1,2], Фомичёв И.А.[1,3], Давыдова Г.А.[1]

[1]Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Московская область, Российская Федерация
[2]Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева биологический факультет, Самара, Российская Федерация
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова биотехнологический факультет, Москва, Российская Федерация

На сегодняшний день получили широкое распространение полисахаридные гели, используемые для быстрого заживления ран и ожогов. Благодаря их уникальной биосовместимости, гибким методам получения, спектру составляющих и желательным физическим характеристикам, они стали материалом выбора для многих применений в регенеративной медицине.

Каррагинан, полисахарид, полученный из морских водорослей, обладает антиоксидантными, антибактериальными и иммуномодулирующими свойствами. Но в литературе очень мало информации о взаимодействии каррагинана с другими полисахаридами. Целью данной работы является определение оптимальных составов и условий получения биополимерных композиций на основе каррагинана.

Для исследования совместимости каррагинана (К) с другими полисахаридами, такими как альгинат натрия (А), метилцеллюлоза (М), гуаровая (Г) и ксантановая (КК) камеди, при этом суммарная концентрация смешанного раствора по полимеру оставалась равной 2 масс.%. Приготовление всех гелей проводили, выдерживая растворы при 90°С не менее 2-х часов.

Была исследована вязкость полисахаридных композитных гелей при различных соотношениях компонентов. Установлено, что все исследуемые гели при концентрации 2% являются неньютоновскими жидкостями. Кривые характеристической вязкости, представляющие собой зависимости вязкости от концентрации, позволяют судить о надмолекулярной организации растворов полимеров. Чем больше ход кривых отклоняется от горизонтального положения, тем выше аномалия вязкости, тем значительнее характер течения раствора отличается от ньютоновского. Характер структурообразования в полимерных смесях в значительной степени определяется совместимостью полимерных компонентов. Наибольшая совместимость получена для смесей (К)/(М), для которых в значительном диапазоне составов наблюдается положительное отклонение вязкости от аддитивных величин. Этот факт может свидетельствовать в пользу образования лабильных гетероагрегатов. Для раствора (К)/(А) получено отрицательное отклонение значений вязкости от аддитивных величин, что свидетельствует об ограниченной совместимости этих полимеров в водном растворе. А для растворов (К)/(Г) при концентрациях (К) в смесях 10–40% наблюдается наибольшее положительное отклонение вязкости от аддитивных величин и говорит о взаимодействии этих полисахаридов посредством водородных связей, что подтверждается литературными источниками.

Биосовместимость полученных бинарных соединений на основе каррагинана изучали методами МТТ и прямого контакта на кератиноцитах линии HaCat. Все гели не оказывают угнетающего воздействия на клетки.

Мы планируем на основании систематического изучения физико-химических свойств гелей на основе полисахаридов выявить закономерности, отражающие функциональную взаимосвязь состава и структуры композиционных материалов на основе полисахаридов от природы и концентрации полимеров.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ ИНДИКАТОРОВ КАЛЬЦИЯ

Волдаева О.Н.[1], Клещина Н.Н.[2], Боченкова А.В.[2]

[1]Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
[2]Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Fura-2 — флуоресцентный краситель, широко используемый для визуализации свободных ионов Ca^{2+} внутри клетки. С его помощью, например, изучают осцилляции концентрации ионов Ca^{2+} внутри тромбоцитов, что в свою очередь позволяет больше узнать о процессах сигнализации в этих клетках. В состав красителя входят 5 карбоксильных групп, которые могут образовывать хелатный комплекс с ионом Ca^{2+}. На способность данного красителя к комплексообразованию и на его спектральные характеристики влияет pH, а также наличие других ионов в растворе. Исследование фотофизических свойств флуоресцентных ин-

дикаторов с помощью методов квантовой химии позволяет получить информацию об основных факторах, влияющих на форму и положение их спектров в различном окружении. Однако моделирование спектров поглощения в реальном окружении — нетривиальная и до конца не решенная задача из-за наличия неоднородного уширения спектров как за счет окружения, так и конформационной подвижности красителя. Целью данной работы является разработка методики моделирования структуры и фотофизических свойств полианионных комплексообразующих красителей на примере флуоресцентного индикатора Fura-2 в растворе и создание автоматизированного алгоритма для моделирования формы спектральных полос с учетом однородного и неоднородного уширения.

В работе предложена методика моделирования спектров поглощения комплексообразующих красителей в водном растворе в присутствии различных ионов металлов, которая включает в себя следующие этапы: (1) молекулярно-динамическое моделирование в NPT ансамбле при 300 K с использованием параметров силового поля CHARMM с целью выбора конфигураций для последующих этапов моделирования и усреднения; (2) оптимизация геометрических параметров выбранных структур с помощью метода КМ/ММ с использованием гибридного функционала PBE0 в сочетании с параметрами силового поля CHARMM в варианте механического внедрения; (3) расчёт энергий вертикального возбуждения, вероятности переходов и параметров вибронной модели с помощью инвариантной многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений второго порядка XMCQDPT2 с учетом влияния окружения в рамках метода потенциала эффективных фрагментов EFP; (4) моделирование вибронной структуры спектра при гомогенном уширении на основе расчета перекрывания колебательных волновых функций различных электронных состояний в модели линейной связи в приближении Франка-Кондона; (5) расчёт интегрального электронно-колебательного спектра путем усреднения вдоль молекулярно-динамической траектории.

С использованием разработанной методики установлены основные факторы, влияющие на форму и положение полос в спектрах поглощения кальциевого индикатора Fura-2, выявлены вклады однородного и неоднородного уширения, а также объяснена природа сдвига максимумов поглощения при связывании ионов кальция.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана Российским научным фондом (грант №21-73-00145).

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ МОНОГАЛОГЕНЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛОВ

Волков Н.Д., Хомякова П.С., Нигматуллин Д.Р.
ФИЦ ХФ РАН, Москва, Россия

Для построения химического блока модели изменения климата необходимы знания элементарных реакций галогенированных углеводородов. Однако успех построения химического блока модели изменения климата ограничен отсутствием информации о механизмах реакций, включая константы скорости и продукты элементарных стадий реакций с участием свободных радикалов.

Реакции галогенбензолов C_6H_5Cl и C_6H_5F с радикалами OH изучались ранее:

$C_6H_5Cl + OH \rightarrow$ Продукты (1)
$C_6H_5F + OH \rightarrow$ Продукты (2)

Методом конкурирующих реакций с применением молекулярно-пучковой масс-спектрометрии была изучена кинетика реакций атомарного фтора с хлор- и фторбензолом. В роли конкурирующих реакций выступали реакции атомарного фтора с циклогексаном и бензолом.

$C_6H_5Cl + F \rightarrow C_6H_4ClF + H$ (3a) $\Delta H = 97.2$ кДж/моль
$\rightarrow C_6H_4Cl + HF$ (3b) $\Delta H = 108.5$ кДж/моль
$C_6H_5F + F \rightarrow C_6H_4F_2 + H$ (4a) $\Delta H = 32$ кДж/моль
$\rightarrow C_6H_4F + HF$ (4b) $\Delta H = 108.5$ кДж/моль

Впервые были определены константы скорости реакций хлор- и фторбензола с атомарным фтором, величины которых составили:

$k_3 = (1.9 \pm 0.6)\cdot10^{-10}$ см^3 молекула$^{-1}$ с$^{-1}$,
$k_4 = (1.1 \pm 0.3)\cdot10^{-10}$ см^3 молекула$^{-1}$ с$^{-1}$.

В таблице 1 приведены измеренные нами константы скорости реакций галогенбензолов с атомарным фтором, а также константы скорости реакций галогенбензолов с радикалом OH и атомарным хлором по данным литературы. Можно видеть, что реакции галогенбензолов с атомарным фтором на несколько порядков быстрее по сравнению с реакциями этих веществ с атомарным хлора и радикалом OH.

В работе будут представлены данные о продуктах исследованных реакций.

Таблица 1. Константы скорости реакций галогенбензолов с атомарными Cl, F и радикалами OH

Галогенбензол	k_{OH}, см^3 молекула$^{-1}$ с$^{-1}$	k_{Cl}, см^3 молекула$^{-1}$ с$^{-1}$	k_{F}, см^3 молекула$^{-1}$ с$^{-1}$
C_6H_5Cl	$(6.0 \pm 0.3)\cdot10^{-13}$ $(7.4 \pm 0.9)\cdot10^{-13}$	$(9.8 \pm 2.4)\cdot10^{-16}$	$(1.9 \pm 0.6)\cdot10^{-10}$
C_6H_5F	$(6.3 \pm 0.8)\cdot10^{-13}$	-	$(1.1 \pm 0.3)\cdot10^{-10}$

Полученные кинетические данные будут использоваться при выборе условий лабораторного получения первичных радикалов, образующихся в реакциях 3 и 4, при изучении реакций этих радикалов с молекулярным кислородом.

Работа частично поддержана грантом Госзадания АААА-А20-120021390044-2 и грантом РФФИ 19-05-50076 — Микромир.

ОСОБЕННОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ SMART-КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНОГО МАГНИТНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ

Воронцов С.А., Соболев К.В., Колесникова В.Г., Родионова В.В., Левада Е.В.

Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия

Значительный интерес к теме «умных» композитов связан с развитием науки в направлении химических и биологических технологий, а также запросами современного производства материалов для медицинских приложений. Макромолекулы полимеров имеют цепное строение и, благодаря этому, обладают набором физических и химических свойств, таких как эластичность, термопластичность и прочность, что позволяет решить комплекс задач для широкого круга отраслей. Таковыми полимерами являются поливинилиденфторид (PVDF) и полилактид (PLA). Использование PLA наиболее актуально в производстве компонентов для химической и фармацевтической отраслей. Последние годы активно развивается направление изготовления композитных материалов с добавлением ферромагнитных наночастиц Fe3O4 на основе различных полимеров для создания биомедицинских приложений. При добавлении наноразмерного магнитного наполнителя в пьезоэлектрический полимер возможно создание уникального магнито-электрического композита, обладающего высоким магнито-электрическим эффектом.

В данной работе представлены исследования серии образцов на основе полимера PLA с добавлением наночастиц Fe3O4 в количестве 5%, 10%, 15% и 20% от общей массы композита, полученных методом ракельного ножа (Doctor Blade method).

Был разработан протокол получения smart-композитов на основе полимера PLA. С помощью сканирующего электронного микроскопа (SEM) была исследована толщина, полученных полимерных композитов и обнаружены дефекты на поверхности. На рентгеновском порошковом дифрактометре (powder XRD) была исследована кристаллическая и фазовая структура полученной полимерной плёнки, а также узнать состав образца и размер зёрен PLA. Изучена топология поверхности, полученных образцов, определён модуль упругости, модуль жесткости и пьезосвойства полимерной плёнки.

Таким образом, была разработана новая методика изготовления «умного» композитного материала с равномерным распределением магнитных нановключений. Отработан метод получения воспроизводимых композитов одинаковых геометрических параметров (толщины, пространственных размеров, шероховатости поверхности). Для всех образцов были измерены адгезивные свойства и модуль упругости.

Была установлена зависимость прочности композита от концентрации магнитных нановключений. Полученные 2D-материалы в дальнейшем могут быть использованы в качестве подложек для развития клеточных культур и создания биомедицинских приложений.

ВЛИЯНИЕ ГИПОХЛОРИТ- И ПЕРОКСИД- ИНДУЦИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ПЛАЗМИНОГЕНА НА ПОВРЕЖДЕНИЕ СТРУКТУРЫ И БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ

Васильева А.Д.[1], Юрина Л.В.[1], Азарова Д.Ю.[1], **Гаврилина Е.С.[1],** Иванов В.С.[1], Индейкина М.И.[1], Бугрова А.Е.[1], Кононихин А.С.[2,3], Николаев Е.Н.[2], Розенфельд М.А.[1]

[1]Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, Российской академии наук, Москва, Россия
[2]Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
[3]Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе, Федеральный химико-физический центр им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

Целью настоящего исследования было определить влияние окисления плазминогена, индуцированного гипохлоритом и перекисью водорода, на модификацию отдельных участков в первичной структуре профермента и на активность плазмина, образующегося из окисленного плазминогена.

Плазминоген является зимогенной формой плазмина, фермента, который играет фундаментальную роль в некоторых физиологических и патологических процессах, в том числе, в растворение сгустков фибрина, деградации внеклеточного матрикса, ремоделировании тканей и заживлении ран, а также в сердечно-сосудистых заболеваниях, воспалении и миграции опухолевых клеток.

Результаты, полученные с помощью MS/MS, электрофореза и колориметрии, продемонстрировали, что ни один из окисленных аминокислотных остатков, обнаруженных в проэнзиме, обработанном 25 мкм $HOCl/OCL^-$ или 100 мкм H_2O_2, не был функционально значимым для плазминогена. Однако обработка плазминогена увеличивающимися концентрациями $HOCl/OCL^-$ от 25 мкм до 100 мкм или H_2O_2 от 100 мкм до 300 мкм способствовала частичной потере активности окисленного плазмина.

Было показано, что несколько остатков метионина (Met57, Met182, Met385, Met404, Met585 и Met788), локализованных в различных доменах белка, служат ловушками АФК, обеспечивая таким образом эффективный защитный механизм против окислительного стресса. Окисленные Trp235, Trp417, Trp427, Trp761 и Tyr672, скорее всего, были ответственны за снижение биологической активности Glu-плазминогена, подвергнутого сильному окислению.

Результаты настоящего исследования, наряду с результатами предыдущих исследований, показывают, что структура Glu-плазминогена адаптирована к окислению, чтобы противостоять окислительному стрессу, вызванному АФК.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-74-00146. В работе использовалось оборудование ЦКП ИБХФ РАН.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ И ГРАВИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РОСТА ПЛЕНОК ОКСИДА МОЛИБДЕНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ АТОМНО-СЛОЕВОГО ОСАЖДЕНИЯ

Максумова А.М.[1], **Гаджимурадов С.Г.[1],** Дамыров У.Б.[1], Сулейманов С.И.[1], Абдулагатов И.М.[1], Абдулагатов А.И.[1,2]

[1]Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Дагестан, Россия
[2]ООО АСО НаноТех, г. Махачкала, Дагестан, Россия

В данной работе проведено исследование процесса термического атомно-слоевого осаждения (АСО) пленок оксида молибдена (MoO_x) с использованием $MoOCl_4$ и H_2O. Процесс роста наблюдали *in situ* методом кварцевого пьезоэлектрического микровзвешивания (КПМ) в диапазоне температур от 115 до 180 °С. Рост пленки MoO_x осуществлялся попеременными поверхностными реакциями паров $MoOCl_4$ и H_2O. Термохимические расчеты для газофазной реакции $MoOCl_{4(г)} + 2H_2O_{(г)} \rightarrow MoO_3 + 4HCl_{(г)}$ при 150 °С (ΔG = -17.23 ккал/моль) показывают, что данная реакция может протекать самопроизвольно. Процесс АСО MoO_x схематично можно представить в виде циклически повторяющихся поверхностных полуреакций А и Б:

Реакция А $\quad](-OH)_x{}^* + MoOCl_{4(г)} \rightarrow](-O)_x\text{-}MoO(Cl)_{4-x}{}^* + xHCl_{(г)}$
Реакция Б $\quad](-O)_x\text{-}MoO(Cl)_{4-x}{}^* + (4\text{-}x)H_2O_{(г)} \rightarrow](-O)_x\text{-}MoO(OH)_{4-x}{}^* + (4\text{-}x)HCl_{(г)}$,

где * — поверхностные реакционные группы,] — поверхность, x — количество прореагировавших гидроксильных групп (-OH), HCl — газообразный продукт поверхностных реакций. Расчеты из КПМ данных показали, что в процессе реакции $MoOCl_4$ с гидроксилированной поверхностью в основном наблюдается его монодентатное присоединение к поверхности. Следующий за этим напуск H_2O ведет к реакции замещения -Cl лигандов на -OH группы с формированием мостиковых -Mo-O-Mo- связей как показано на рисунке 1.

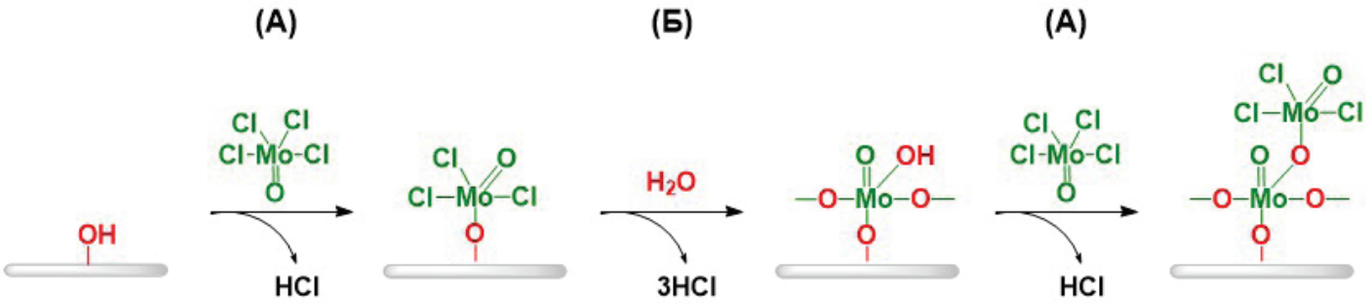


Рис. 1. Схема возможных поверхностных процессов взаимодействия паров $MoOCl_4$ и H_2O в процессе АСО MoO_x при 150 °С.

С целью более детального исследования поверхностных реакций проведены квантово-химические расчеты термодинамических параметров (ΔG) реакций А и В при трех указанных выше температурах. Расчёты были проведены негибридным методом PBE/DFT с функциональным базисом def2-TZVP, использовались кластерные модели молибденсодержащих структур различной функциональности. Для расчетов использовали кластерную модель поверхности SiO_2 на основе сечения <111> с параметрами

β-кристобалита (в качестве псевдоатомов использовали атомы Н). Анализ расчетных данных подтвердил данные КПМ и показал максимальный энергетический выигрыш для монодентатных реакций на поверхности.

Работа выполнена в рамках Государственного Задания FZNZ-2020-0002.

ПОРИСТЫЕ БИОСОВМЕСТИМЫЕ СПЛАВЫ И ПРОБЛЕМЫ ИХ ИССЛЕДОВАНИЯ

Галимзянов Б.Н., Никифоров Г.А., Мокшин А.В.

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

В настоящее время пористые сплавы находят широкое применение в различных областях, например, в имплантологии и протезировании, в производстве электродов для аккумуляторных батарей, для производства топливных контейнеров, микроскопических фильтрующих элементов, различных датчиков и элементов радиоэлектроники. К наиболее перспективным относятся биосовместимые сплавы с эффектом памяти-формы, которые являются основными материалами для развития биоинженерии и энергетики будущего. Среди таких сплавов широко известным является нитинол (сплав $Ni_{50}Ti_{50}$), который обладает наиболее благоприятными функциональными свойствами, по сравнению с другими сплавами.

Существует несколько методов производства пористых металлических сплавов, в том числе, пористого нитинола. Самым популярным является метод спекания порошков микронного размера, позволяющий получать пористые образцы с пористостью порядка 55 %. Однако при спекании порошков нитинола могут образоваться так называемые вторичные фазы Ti_2Ni и $TiNi_3$, которые являются очагами для формирования трещин. Наличие таких фаз может сильно повлиять на результаты механических испытаний: снижаются прочностные свойства пористого сплава.

В компьютерном моделировании для получения пористого нитинола с кристаллической структурой применяется метод вырезания пор с использованием компьютерных алгоритмов. В отличие от экспериментальных методов синтеза пористых материалов, моделирование также позволяет получать аморфный пористый сплав. Как правило, здесь применяется метод изохорного охлаждения и метод инъекции газа в жидкий расплав. Преимущество методов компьютерного моделирования заключается в возможности управления параметрами пористой структуры, такими как пористость, линейные размеры пор, геометрия и распределение пор в объеме системы.

Одной из главных проблем в моделировании пористого нитинола является получение пористой структуры, где распределение и геометрия пор будут соответствовать параметрам пор экспериментального образца. На эксперименте образцы миллиметрового размера, в то время как в моделировании это порядка ста нанометров. Для решения этой проблемы нами предложен критерий масштабирования пористой структуры, который через моделирование позволяет получить пористую структуру, близкую к структуре экспериментальных образцов. Согласно этому критерию, отношение между средним линейным размером пор и линейным размером системы должно совпадать с таким же отношением, рассчитанным для экспериментального образца. Мы находим, что использование данного критерия масштабирования позволяет корректно сопоставлять результаты моделирования и эксперимента для пористых образцов с различной степенью пористости.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

ПРОТОНИРОВАНИЕ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ЗНАЧЕНИЙ ИОННОЙ СИЛЫ

Гамов Г.А., Яруллин Д.Н., Медведева А.С., Гудырина М.А., Погодина Е.И., Завалишин М.Н.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Аскорбиновая кислота является одним из наиболее важных для живых организмов соединением. Этот кофермент входит в состав диоксигеназ и регулирует множество биохимических окислительно-восстановительных реакций. Способность аскорбиновой кислоты подвергаться автоокислению в присутствии некоторых ионов d-металлов (например, Cu^{2+}, Fe^{2+}) находит применение в аналитической химии этих элементов. Поскольку окислительно-восстановительные свойства аскорбиновой кислоты, во многом, определяются протонированной формой, в которой она находится в растворе, а состав форм, в свою очередь определяется константами диссоциации, которые сильно зависят от ионной силы среды, исследование протонирования аскорбат-иона при разных значениях ионной силы является актуальным.

В настоящей работе константы протонирования двухзарядного аскорбат-иона определены спектропотенциометрическим методом при T = 298 K, I = 0.10; 0.25; 0.50; 1.0; 2.0; 3.0; 5.0 моль/л. Результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1. Константы протонирования двухзарядного аскорбат-иона при разных значениях ионной силы

I, моль/л (NaCl)	0.10	0.25	0.50	1.0	2.0	3.0	5.0
$\lg \beta_1$ [a]	11.29±0.09	11.34±0.04	11.28±0.01	11.15±0.02	10.80±0.05	10.64±0.04	10.40±0.07
$\lg \beta_2$ [b]	15.44±0.11	15.54±0.09	15.39±0.01	15.19±0.04	14.80±0.10	14.70±0.06	14.38±0.09
$\lg K_2$ [a]	4.15±0.06	4.20±0.08	4.11±0.01	4.04±0.04	4.00±0.09	3.96±0.05	3.98±0.05

[a] Погрешности представляют собой полуширину доверительного интервала при доверительной вероятности 0.95 и размере выборки 4 эксперимента

[b] Погрешности представляют собой квадратный корень из суммы квадратов погрешностей определения $\lg \beta_1$ и $\lg K_2$ ($\Delta = \sqrt{\Delta^2_{\lg \beta_1} + \Delta^2_{\lg K_2}}$).

С целью определения стандартных констант диссоциации аскорбиновой кислоты, экспериментальные результаты и литературные данные были обработаны в рамках теории Дебая-Хюккеля при помощи уравнения Васильева и теории специфических ионных взаимодействий.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZZW-2020-0009) при поддержке Совета по грантам при Президенте Российской Федерации (проект МК-923.2022.1.3). Использовано оборудование центра коллективного пользования ИГХТУ (при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект 075-15-2021-671)

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕСТЕРИТА

Ганичев Я.А.[1], Полотнянко Н.А.[1], Тюрин А.В.[2], Чареев Д.А.[1,3]

[1]*Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московской области Университет «Дубна», Дубна, Россия*

[2]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

[3]*Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, Россия*

Определение принципиально новых термодинамических характеристик для соединения Cu_2ZnSnS_4, аналога минерала кестерита (в литературе также встречается как CZTS), представляет большой интерес для исследований, так как имеющиеся литературные данные недостаточны и не согласуются между собой.

В настоящей работе исследовали образец, для синтеза которого использовали метод «получения кристаллов из раствора в расплаве с использованием стационарного температурного градиента». Результаты анализа с помощью метода рентгенофазового и рентгеноспектрального микроанализа подтвердили, что кристаллическая структура и стехиометрическое соотношение элементов образца соответствует кестериту.

Измерения изобарной теплоемкости (C_p) проводили на адиабатическом вакуумном калориметре с дискретным нагревом БКТ-3 в интервале 4.91-348.38 K, полученные экспериментальные данные (144 экспер. точки) представлены на рисунке 1. Как видно, теплоемкость образца во всем изученном интервале температур возрастает монотонно и не проявляет аномалий. Сглаживание экспериментальных значений $C_p(T)$, проводили с использованием метода сплайн-аппроксимации, погрешность БКТ-3 не превышала 0.5% и при 298.15 K составила 0.2%.

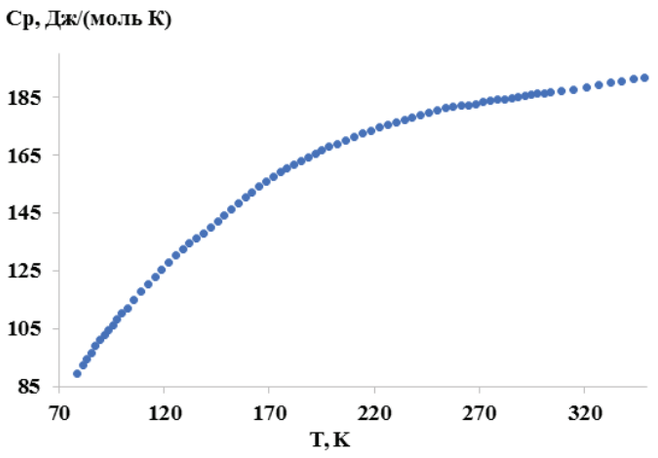


Рис. 1. Температурная зависимость изобарной теплоемкости для CZTS

По данным $C_p = f(T)$ были рассчитаны стандартные термодинамические функции, при 298.15 К получили: $C_p° = 186.9±0.4$ Дж/(моль·К); $S° = 263.5±0.5$ Дж/(моль·К); $H°(298.15)-H°(0) = 37.35±0.07$ кДж/моль; $Ф° = 138.1±0.3$ Дж/(моль·К).

В заключение отметим, что калориметрические исследования теплоемкости кестерита были осуществлены впервые. В дальнейшем планируется экспериментальные измерения C_p кестерита в высокотемпературной области методом ДСК.

Работа выполнена при финансовой поддержке ведущих научных школ Российской Федерации в рамках проекта «Халькогениды: рост кристаллов, геохимия, термодинамика и физические свойства» (НШ-2394.2022.1.5).

ТЕРМОДИНАМИКА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С БАРИЦИТИНИБОМ — ИММУНОМОДУЛЯТОРОМ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

Гарибян А.А.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия.

Барицитиниб (BCN, рис. 1) — иммуномодулятор нового поколения, который в 2017 году был одобрен для лечения ревматоидного артрита.

BCN является селективным ингибитором Янускиназ и проявляет противовоспалительный, иммуномодулирующий, а также противоопухолевый эффект. Применение BCN усложняется из-за его плохой растворимости в воде, что приводит к тяжелым побочным эффектам.

Нами была определена растворимость BCN в различных буферных растворах с физиологическим значением pH при 17-37 ˚C и рассчитаны термодинамические параметры процесса растворения. Установлено, что растворимость BCN в кислой среде выше, чем в нейтральной из-за протонирования лекарственного соединения.

Дальнейшая работа заключалась в увеличении растворимости BCN за счет комплексообразования с циклодекстринами (cyclodextrins, CDs) — природными олигосахаридами, способными к образованию комплексов по типу «хозяин-гость».

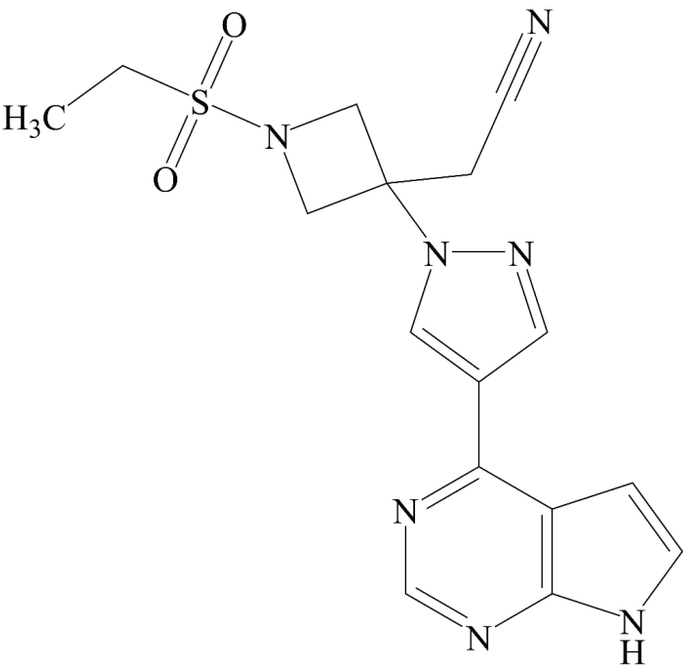


Рис. 1. Структурная формула барицитиниба.

В настоящей работе были рассмотрены природные α-CD, β-CD и -CD, которые различаются числом глюкопиранозных остатков в цикле и размером внутренней полости. Процесс комплексообразования BCN с CDs был изучен с помощью ряда физико-химических методов. Получены и проанализированы термодинамические параметры образования комплексов в буферных растворах (pH 1.6 и 6.8), имитирующих среду ЖКТ.

Выявлено влияние CDs на мембранную проницаемость BCN через различные модельные мембраны (PermeaPad, MWCO).

В рамках данной работы было установлено, что β-CD является наиболее эффективным солюбилизатором барицитиниба и образует с лекарственным веществом энтальпийно-энтропийно стабилизированные комплексы включения состава 1:1.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-73-00119.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОПУЛЯРНЫХ МАРОК МОЛОТОГО КОФЕ

Гаспарян К.Г. [1], Тюбаева П.М.[2]

[1] *Российский экономический университет им. Г. В. Плеханов*
[2]*Интитут биохимической физики имени Н.М. Эмануэля РАН, Москва*

Кофе-один из самых популярных напитков в мире, почти треть населения мира пьет его. Ежегодно производится около 7 миллионов тонн кофе, Бразилия, безусловно, является крупнейшим в мире производителем. Качественный кофейный напиток содержит необходимые макро- и микроэлементы, для этого стоит осознано выбирать производителя. В настоящее время в производстве используют следующие ботанические виды кофейного дерева: Coffea Arabica Linney, Coffea Canephora Pierre и Coffea Liberica Hiern, но либерику используют меньше всего, данный сорт занимает 1% от всего рынка, поэтому мы не будем его рассматривать.

Умеренное потребление качественного кофе приносит пользу организму, так как он содержит биоактивные соединения, включая полифенолы, которые известны своими противовоспалительными свойствами, антиоксиданты, защищающие организм от воздействия свободных радикалов, необходимые витамины и минералы, например, витамин B2, витамин PP, K, Ca, P и т.д...

Считается, что товар из высокоценового сегмента более качественный, чтобы проверить это, мы провели физико-химические эксперименты 4-ех разных популярных марок кофе: Dammi Caffe и Starbucks Pike Place из высокоценового сегмента, Lebo из среднеценового сегмента и Лента из низкоценового сегмента.

Физико-химическое исследование образцов кофе проводилось в несколько этапов.

Первым этапом была микроскопия молотого кофе. Средний размер частиц 1-ого образца составил 37— 39 мкм. При микроскопии 2-ого образца были хорошо видны частички но уже объединённые, возможно это из-за высокой влажности образца, ширина = 294 мкм, длина = 430 мкм. У 3-его образца наблюдались 2 типа частиц: крупные (тёмные) и мелкие (светлые), у крупных частиц средний размер = 170 мкм, у мелких = 65 мкм. У 4-ого образца средний размер частиц составлял 315 мкм.

В следующем этапе мы определяли количество влаги, для данного эксперимента использовался анализатор влажности AGS 50. У 1-ого образца доля влаги = 5,19%, у 2-ого = 6,55%, у 3-его =2,63%, 4-ого =3,17%.

По Госту 32775–2014 «Кофе жареный. Общие технические условия» содержание влаги не должно превышать 5,5% от общей массы, из этого выходит, что марка «Лента» не проходит по стандартам ГОСТ.

Далее мы проводили качественную реакцию на содержание кофеина концентрированной азотной кислотой. Больше всего тетраметилаллоксантина выделилось в образце №4, что показывает наибольшее содержание кофеина, а наименьшая концентрация кофеина наблюдалась в образце № 1.

Следующим этапом проводили качественные реакции на содержание цикория и витамина Р (рутина). Цикорий определяли солью FeCl3; раствора цикория приобретает бурый цвет, а раствор натурального кофе — темно-зеленый. Цвет раствора образцов №1,3 и 4 был темно-зеленым, во 2-ом образце наблюдался темно-зеленый цвет, уходящий в бурый. Можем предположить, что во 2 образце есть добавка цикория

Опыт по определению рутина проводился титрантом KMnO4 с добавлением индигокармина в титруемое вещество, при наличии витамина раствор окрасится в желто-оранжевый цвет. Опыты показали, что во всех образцах содержится остаток витамина, но никак не полноценный рутин.

Проведенные эксперименты показали, что по стандартам проходят все марки кофе кроме «Лента», лучшие физико-химические показатели у «Starbucks» из высокоценового сегмента.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИЛАКТИД-ВОССТАНОВЛЕННЫЙ ОКСИД ГРАФЕНА, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ СПОСОБАМИ

Гасымов М.М.[1], Роговина С.З.[1], Ломакин С.М.[2], Кузнецова О.П.[1], Шевченко В.Г.[3]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук*
[2]*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук*
[3]*Институт синтетически полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук*

Одним из активно развивающихся направлений создания новых композиционных материалов является получение полимерных композиций на основе полимеров различных классов, содержащие углеродные наноразмерные наполнители. Особый интерес среди подобных нанонаполнителей вызывает восстановленный оксид графена (ВОГ), представляющий собой монослой sp^2-гибридизированных атомов углерода, расположенных в двумерной решетке и придающий композициям с его использованием высокие термические, механические и электрические характеристики. В последние годы появились работы, посвященные разработке композиций на основе синтезируемого из природного сырья биоразлагаемого полиэфира полилактида (ПЛА), содержащих в качестве наполнителя наноразмерные производные графена, демонстрирующие существенное улучшение их свойств при гораздо более низких концентрациях наполнения, чем в случае традиционно используемых наполнителей.

В данной работе композиции ПЛА-ВОГ, содержащие наполнитель в широком диапазоне концентраций, были получены двумя способами: в условиях твердофазного смешения под действием сдвиговых деформаций и синтезом в жидкой фазе. Изучены структура, а также механические, теплофизические и электрические свойства композиций с различной степенью наполнения и на основе полученных результатов проведен сравнительный анализ их свойств. Исследование структуры композиций методом СЭМ показало, что при твердофазном получении образцов наблюдается равномерное распределение частиц ВОГ в матрице полимера, тогда как при синтезе в жидкой фазе происходит образование агломератов. Именно с этим обстоятельством связан наблюдаемый рост прочностных характеристик композиций по мере возрастания концентрации наполнителя при твердофазном синтезе по сравнению с жидкофазным, а также обнаруженная более высокая электрическая проводимость композитов, свидетельствующая, что порог протекания для них ниже, чем для композиций, полученных жидкофазным методом. При изучении теплофизические свойств композиций методом ДСК, установлено, что теплоты «холодной кристаллизации» для образцов, полученных твердофазным методом выше, чем для композиций, синтезированных жидкофазным способом. Это также свидетельствует о более равномерном распределении ВОГ в ПЛА при твердофазном смешении, приводящем к снижению сегментальной подвижности цепей ПЛА и затруднению формирования кристаллической структуры ПЛА в расплаве. Наблюдаемое резкое снижение степени кристалличности с ростом концентрации ВОГ связано также и с аморфизацией ПЛА вследствие воздействия сдвиговых деформаций в процессе их получения.

Таким образом, полученные результаты убедительно демонстрируют влияние способа получения на структуру и комплекс свойств образующихся композиций.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ проекта 22-23-00369).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНОСТИ ТЕТРАКАТИОННОГО ПРОИЗВОДНОГО БАКТЕРИОХЛОРИНА НА КЛЕТКАХ В 2D- И 3D-УСЛОВИЯХ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ

Глинская Е.Г.[1], Каршиева С.Ш.[1], Ахлюстина Е.В.[2], Макарова Е.А.[3], Меерович Г.А.[2,4], Кудан Е.В.[1]

[1]ЧУ Лаборатория биотехнологических исследований «3Д Биопринтинг Солюшенс»
[2]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
[3]Государственный научный центр «НИОПИК»
[4]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Производные бактериохлоринов являются перспективными кандидатами для лечения онкологических заболеваний. Они представляют собой низкотоксичные соединения, активность которых проявляется только при облучении в ближней ИК области спектра (700–800 нм). Известно, что монослойная культура клеток не отражает всё многообразие межклеточных контактов, а также контактов клеток с внеклеточным матриксом, поэтому всё большее распространение приобретают исследования активности лекарственных препаратов на сфероидах — трехмерных агрегатах из клеток.

Целью нашей работы являлось определение фототоксичности и цитотоксичности тетракатионного производного бактериохлорина на опухолевых клетках линий HCT-116 и Huh7 в 2D (монослойная культура) и 3D (сфероиды) условиях культивирования.

Были сформированы сфероиды из клеток обеих линий при первоначальных концентрациях 1000, 3375, 8000, 16000 и 27000 клеток на сфероид, изучена кинетика их роста на протяжении 6 дней и выбрана оптимальная концентрация для формирования сфероидов. Далее изучена динамика накопления тетракатионного производного бактериохлорина в клетках и сфероидах, после чего исследована фототоксичность (активность при облучении) и цитотоксичность (активность в отсутствие облучения) препарата на клетках в 2D- и 3D-условиях культивирования. Для оценки фототоксичности препарат добавляли к клеткам и сфероидам в различных концентрациях и

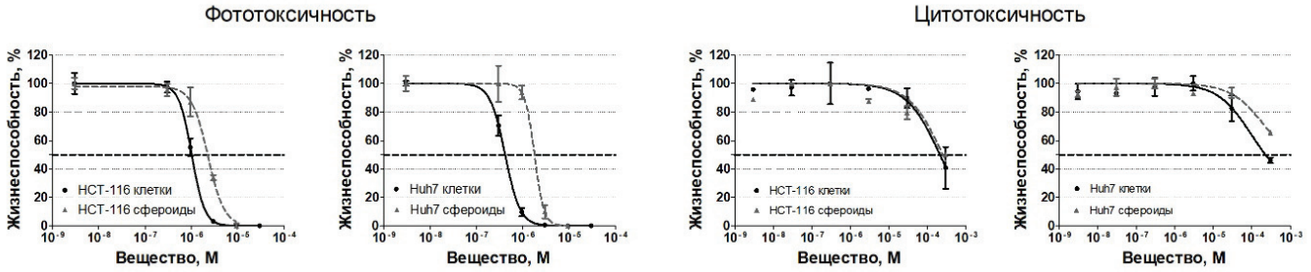


Рис. 1. Фототоксичность и цитотоксичность тетракатионного производного бактериохлорина на клетках HCT-116 и Huh7 в 2D- и 3D-условиях культивирования.

через 3 часа проводили облучение клеток и сфероидов с помощью галогеновой лампы через широкополосный фильтр КС-13 (длина волны 760 нм), расчетная световая доза составляла 48 Дж/см2, после чего продолжали инкубацию на протяжении 24 часов. Кривые зависимости жизнеспособности клеток и сфероидов от концентрации препарата при облучении и в отсутствие облучения представлены на рис. 1.6.

Было установлено, что оптимальной концентрацией для формирования сфероидов с диаметром, не превышающим 300 мкм для проникновения кислорода, питательных веществ и тестируемого препарата в центр сфероида, является 1000 клеток на сфероид. Время накопления тетракатионного производного бактериохлорина в клетках и сфероидах составляет 3 часа. Фототоксичность вещества на обеих клеточных линиях на два порядка выше, чем его цитотоксичность как в 2D-, так и 3D-условиях культивирования. При этом фототоксичность вещества на сфероидах чуть ниже, чем на монослойной культуре клеток.

ПОЛУЧЕНИЕ ЛАНТАНИД-СОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Головин С.Н., Япрынцев М.Н., Лебедева О.Е.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Институт фармации, химии и биологии, Белгород, Россия

Слоистые двойные гидроксиды (СДГ) — соединения, состоящие из бруситоподобных гидроксидных слоев, в которых часть двухзарядных катионов изоморфно замещена трехзарядными, а избыточный положительный заряд компенсирован анионами, локализованными в пустотах межслоевого пространства. Общую формулу СДГ можно выразить следующим образом: $[M(II)_{1-x}M(III)_x(OH)_2]^{x+}[A^{n-}_{x/n}\cdot yH_2O]^{x-}$, где M(II) и M(III) — катионы двух- и трехзарядных металлов соответственно, а A^{n-} — n-валентный анион. В композиционном аспекте СДГ обладают значительной гибкостью: их катионный и анионный состав, а также молярное соотношение между катионами, можно изменять в весьма широких пределах. Главным ограничивающим фактором здесь являются ионные радиусы соответствующих катионов, которые не должны быть слишком велики. Отдельный интерес представляют структуры, содержащие катионы лантанидов, инкорпорирование которых позволяет получать материалы со специфическими свойствами, например, оптическими или электрическими.

Главной сложностью при синтезе лантанид-содержащих СДГ является большой ионный радиус катионов лантанидов, но в некоторых случаях могут возникать и специфические трудности. Так, внедрение катионов церия (III) осложняется тем, что они весьма легко окисляются до четырехвалентного состояния. Основным методом синтеза СДГ является соосаждение, которое в последнее время все чаще комбинируется с гидротермальной обработкой на этапе «старения», что позволяет ускорить процесс и повысить кристалличность получаемых образцов.

В рамках нашей работы методом соосаждения с последующей гидротермальной обработкой выполнен синтез СДГ, содержащих катионы таких лантанидов, как церий, самарий, европий, гадолиний и диспрозий.

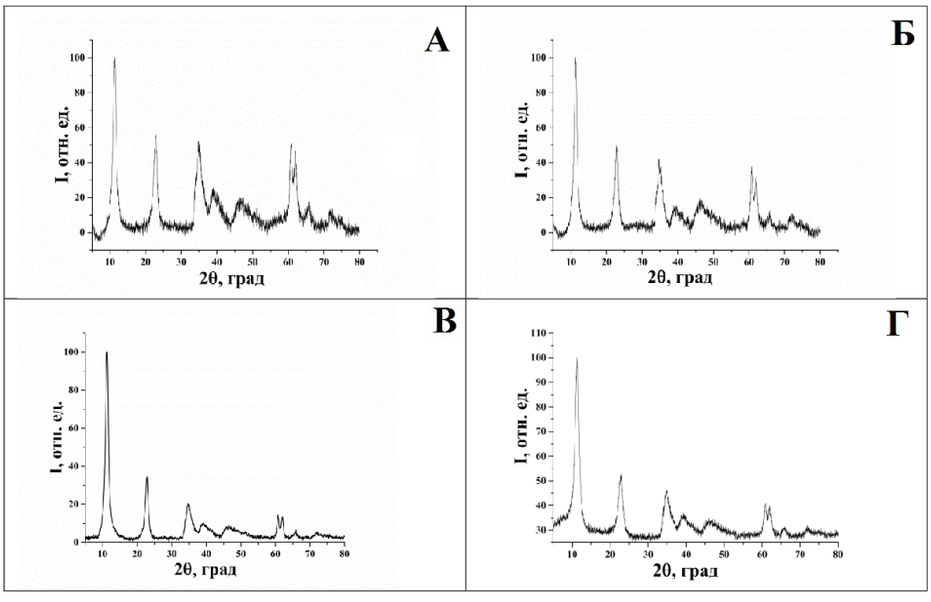


Рис. 1. Порошковые рентгеновские дифрактограммы некоторых образцов лантанид-содержащих СДГ, полученных соосаждением с последующей гидротермальной обработкой:
А — Ni/AlDy; Б — Ni/AlEu; В — Ni/AlGd; Г — NiAlSm.

ВЛИЯНИЕ ПОРОШКОВЫХ ЭЛАСТОМЕРНЫХ МОДИФИКАТОРОВ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ

Горбатова В.Н., Гордеева И.В., Дударева Т.В., Красоткина И.А., Никольский В.Г.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

Модификация является важным условием применения дорожных битумов. Рынок модификаторов обширен и модификаторы различной природы по–разному влияют на сопротивление образованию различных дефектов дорожного полотна.

В данной работе рассмотрено влияние активного порошка дискретно девулканизованной резины, получаемого из техногенных отходов — отработанных шин (АПДДР-Ш) и из отработанных лицевых масок противогазов (состоящих из натурального каучука) (АПДДР-НК).

Сравнение модификаторов проводили на битуме БНД 60/90, определяя температуру разрушения в статических условиях эксплуатации методом ABCD. Испытание проводили на образцах, подвергнутых последовательно технологическому RTFO старению и эксплуатационному PAV старению. Концентрация модификатора составила 12,5%.

Как показали результаты, температура растрескивания модифицированных образцов ниже по сравнению с битумом. Для БНД 60/90 температура растрескивания составила –34,3°С, для модифицированных образцов АПДДР-Ш –39,2°С, АПДДР-НК –42°С.

Деформация при разрушении составила 16,2, 26,8, 33,8 μS, соответственно. Наилучший результат показал образец, содержащий АПДДР-НК, снижая температуру растрескивания на 8°С, что говорит о большой прочности структуры, образуемой в битуме частицами и молекулами НК. Однако, применение модификаторов на основе НК вызывает затруднения, связанные с его стоимостью и логистикой. Переработки изделий, отслуживших свой срок эксплуатации возможна, но таких изделий не так много и это приводит к удорожанию модификатора. Наиболее целесообразным будет использование такого вида модификатора на особо ответственных участках дорог.

Проведена работа по определению оптимальной концентрации модификатора АПДДР-Ш. В качестве битума был выбран БНД 90/130 и на его основе добавляли различные концентрации АПДДР-Ш в количестве 7,5%, 12,5%, 15%. На рисунке 1 представлены данные по температуре разрушения и деформации при разрушении.

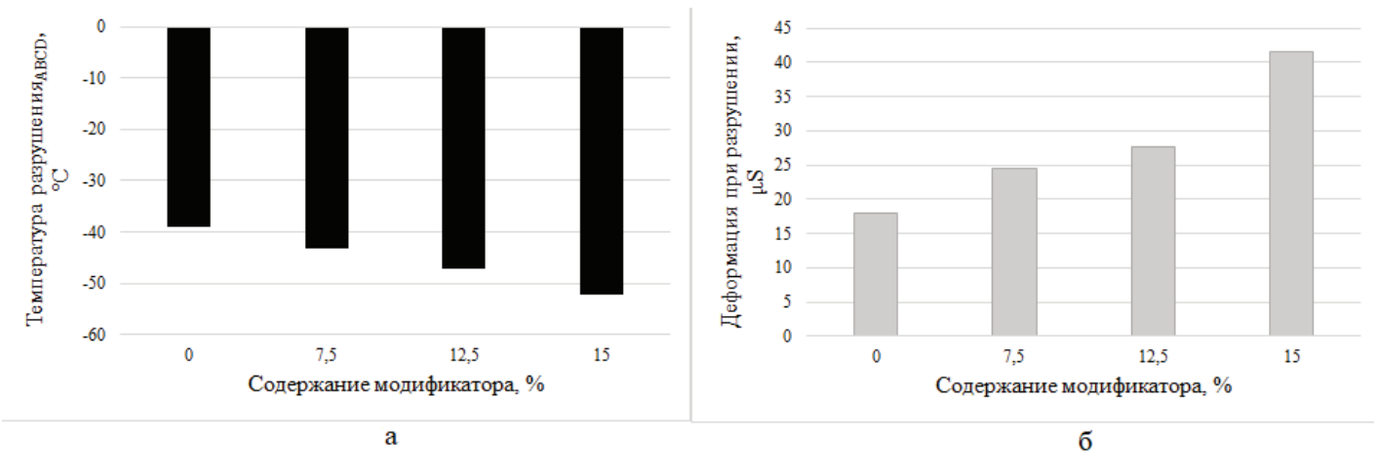


Рис. 1. Влияние концентрации АПДДР-Ш на температуру растрескивания (а) и деформацию при разрушении (б).

С увеличением концентрации модификатора низкотемпературные характеристики улучшаются. Как уже говорилось выше, модификация должна обеспечивать оптимальные свойства во всем температурном диапазоне. Как показали ранее проведенные исследования, концентрация резиновой крошкой выше 15% увеличивает вязкость битума, что привести к осложнениям при укладке асфальтобетонной смеси.

Введение АПДДР-Ш 12,5% обеспечивает оптимальные свойства во всем температурном диапазоне.

МОДИФИКАЦИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНОЙ ЛЕНТЫ GMCC ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Горгола А.О.[1,2], Астахов М.В.[1]

[1]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г.Москва, Россия*
[2]*Институт металлургии и материаловедения имени А.А.Байкова РАН, г.Москва, Россия*

Разработка новых систем хранения электрической энергии и модификация уже имеющихся имеет важное значение для возобновляемых источников энергии, а именно для увеличения их эффективности и срока службы. Среди различных систем хранения энергии суперконденсаторы (СК) привлекают исследователей сочетанием таких характеристик, как быстрый заряд и разряд, высокая удельная мощность и экологичность. Для электродных материалов СК важен размер пор: при очень больших размерах пор площадь активной поверхности электродного материала мала, при малых — в поры затруднено попадание крупных ионов. Для увеличения размера пор и их количества в углеродных материалах обычно проводят процесс, называемый активацией. Цель данной работы заключалась в увеличении удельной ёмкости поверхности ленты GMCC, использующейся в качестве основы для электродов двойнослойных СК, электрохимическим методом.

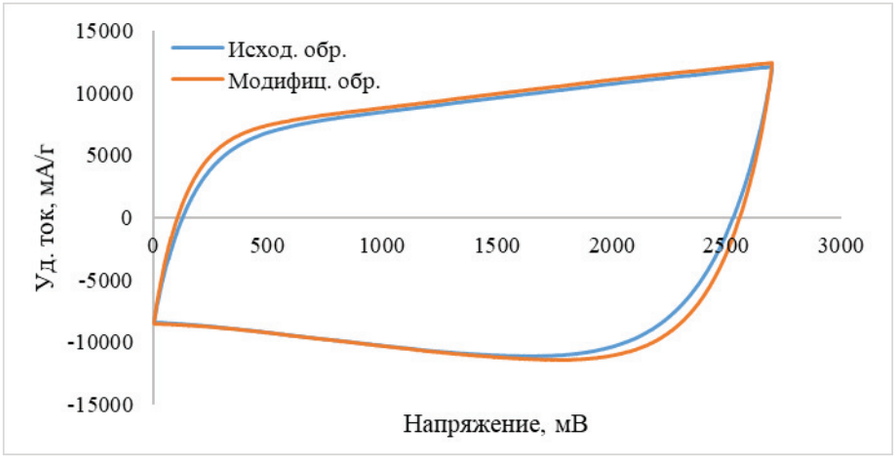


Рис. 1. Кривые циклической вольтамперометрии.

Для проведения электрохимической модификации разработана и собрана установка, состоящая из Н-образной колбы, колбы с отводом и источником постоянного тока. В Н-образную колбу заливался раствор электролита гидрокарбоната аммония (5 % масс.), а в колбу с отводом — баритовая вода. Две колбы соединялись силиконовой трубкой. Электроды, вырезанные из ленты GMCC и подключенные к аноду и катоду источника питания, помещались в колбу с электролитом. На электроды периодически в течение трёх подходов по 5 с подавалось постоянное напряжение равное 5 В, с релаксацией между подходами в течение 15 с. После испытания электроды сушились в печном шкафу 1 час с температурой 120 °С. Из пары, состоящей из модифицированного и немодифицированного электродов, собирали ячейки СК. Электрохимические характеристики таких ячеек сравнивались с ячейками из электродов, не подвергавшихся модификации.

По результатам циклической вольтамперометрии было установлено, что в ячейках, имеющих модифицированный электрод, удельный ток увеличивается на 2,3% по сравнению с исходным образцом (рис. 1). Была рассчитана ёмкость ячеек, которая в исходном образце равняется 81,55 Ф/г, а в модифицированном — 83,35 Ф/г, то есть емкость увеличилась на 2,2%.

СОЗДАНИЕ ПОРИСТЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СПОСОБНОСТИ К БИОРАЗЛОЖЕНИЮ

Григорьева Е.А.[1], Попов А.А.[1, 2]

[1]*ФГБУН «Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля» РАН*
[2]*ФГБОУ ВО «Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова»*

В работе предложено создание биоразлагаемого пористого композиционного материала, путём введения в синтетический полимер наполнителей природного происхождения.

В качестве полимера-матрицы использовали полиэтилен низкой плотности (ПЭ); для придания пористой структуры вводили дисперсный химический порообразователь гидрокарбонат натрия (гид) в количестве 1,5 %

масс.; в качестве наполнителей использовали в одной композиции древесную муку (ДМ) с размером частиц 100 мкм, в дугой — кукурузный крахмал (кр) с размером частиц 100 мкм, в количестве 30 % масс. Образцы для испытаний в виде плёнок были получены методом экструзии.

Прежде всего были определены физические параметры полученных материалов: плотность и пористость, средние диаметры пор. Величина плотности составила 0,6 — 0,7 г/см^3, что ниже величины плотности ПЭ, взятого в качестве контрольного образца (0,92 г/см^3). Микроскопия образцов показала, что поры в их структуре закрытые, имеют сферическую форму, равномерно распределены по всему объёму. Во всех образцах преобладали поры диаметром до 0,20 мм.

Для определения способности к биоразложению с образцами были поведены испытания на определение водопоглощения в течение 52 сут. и изменения прочностных свойств после натурных испытаний в почве открытого грунта, приготовленного в соответствии с ГОСТ 9.060-75 для лабораторных испытаний, в течение 6 мес. Результаты испытаний показаны в таблице 1.

Таблица 1. Результаты определения водопоглощения и прочности образцов

Композиция	Водопоглощение, % (±0,5%)	Прочность исходная, σ, МПа (±0,2МПа)	Прочность, σ, МПа (±0,2МПа) после 6 мес. натурных испытаний
ПЭ	0,5	7,6	7,4
ПЭ+1,5%гид	10,1	4,1	3,6
ПЭ+1,5%гид+30%ДМ	33,5	3,1	2,6
ПЭ+1,5%гид+30%кр	32,0	2,3	1,7

Образцы пористых композиционных материалов показали увеличенное водопоглощение по сравнению с контрольным образцом. По границам раздела фаз «полимер-наполнитель», а также поглощаемая сообщающимися порами и частицами наполнителя, вода проникает в толщу пористого пространства материала; обеспечиваются благоприятные условия для развития микроорганизмов. За период натурных испытаний у образцов композиционных материалов величина прочности понизилась. Макромолекулы полимера на поверхности, граничащей с порой или частицей наполнителя, более напряжённые, находятся в термодинамически неравновесном состоянии, подвижность их затруднена, связи деформируются. В таком состоянии, при условии воздействия факторов окружающей среды, легче происходит отрыв атома водорода различными акцепторами (кислород, соединения азота), легче происходит разрушение цепи полимера.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИДЕОСТИМУЛЯЦИИ НА УРОВЕНЬ ГОМОКАРНОЗИНА И КИСЛОТНОСТИ В ЗРИТЕЛЬНОЙ КОРЕ ЧЕЛОВЕКА

Грицкова А.В.[1], Яковлев А.В.[2,3,4], Манжурцев А.В.[1,2,4], Ублинский М.В.[2,4], Ахадов Т.А.[2], Семенова Н.А.[1,2,3,4]

[1]Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова
[2]Научно-исследовательский институт неотложной детской хирургии и травматологии
[3]Федеральный Исследовательский Центр химической физики Российской Академии Наук
[2]Инситут биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук

Гомокарнозин (Нс) — дипептид гамма-аминомасляной кислоты (ГАМК) и гистидина. Нс в головном мозге человека играет роль нейромедиатора и проявляет противосудорожные эффекты. Молекула Нс содержит в себе молекулу ГАМК, и их сигналы ЯМР отличаются только наличием в спектре Нс резонансных линий протонов имидазольной группы в низкопольном диапазоне. Используя импульсную последовательность MEGA-PRESS (ИП МР) (TE=80ms, TR=2000ms, NSA=288), можно выделить сигнал ГАМК в области 3 м.д. и по интенсивности сигнала Нс оценить вклад в интенсивность сигнала ГАМК, получая более точную оценку концентрации ГАМК. Также при помощи сигналов Нс можно определить pH.

В исследовании приняли участие 17 здоровых человек. Спектроскопический воксель располагался в активированной зрительной коре. После накопления спектров в состоянии покоя получены спектры во время стимуляции, мерцающей с частотой 8Гц шахматной доски. Каждое накопление проводилось 9 мин. 36 сек.

Данные, полученные с томографа, были обработаны в Matlab. Проведены фазовая и частотная коррекция, усреднение по динамикам внутри каждого волонтера, усреднение спектров среди всех участников эксперимента, а также on и off серий. Интенсивность определена как один из параметров аппроксимации для пика Нс (δ=7.0) и для протонов креатина (δ=3.027). Найдены максимальные значения пиков Нс (δ=7.0) в покое и при активации и соответствующие им химические сдвиги. Погрешность химического сдвига определена как разность химических сдвигов N-ацетиласпартата при активации и в покое. Для полученных значений химических сдвигов посчитаны значения pH. Для оценки вклада Нс в пик при δ=3 м.д. получен модельный спектр Нс для ИП МР. Интенсивность пика Нс при δ=7 м.д. в модельном спектре приведена к экспериментальному значению в покое, затем найдена соответствующая ей интенсивность сигнала Нс при δ=3 м.д. в модельном спектре.

Таблица 1. Значения pH и интенсивностей пика Нс в покое и при активации

	Пик, м.д.	pH	I_{HC}/I_{Cr}
Активация	7,0412	7,136 ± 0,011	0,130 ± 0,021
Покой	7,0317	7,189 ± 0,011	0,133 ± 0,071

Для полученных значений pH и химического сдвига проводился двувыборочный t-test для $\alpha<0.05$. Из результата теста следует, что присутствует статистически значимая разница в уровнях pH ($p<0.001$) при наличии зрительного стимула и в покое. Интенсивность сигнала Нс не изменяется ($p>0.5$). Сигнал Нс в покое составляет 30±8% от интенсивности пика при δ=3 м.д. в спектре MEGA-PRESS.

Уменьшение pH при зрительной активации может быть объяснено повышением концентрации лактата. Во время длительной стимуляции наблюдается увеличение концентрации лактата в зрительной коре человека, что подтверждает полученные нами результаты.

ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛИМЕР-ГРАФЕНОВЫХ АЭРОГЕЛЕЙ ПУТЕМ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МОНОМЕРА ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НЕПОСРЕДСТВЕННО НА ГРАФЕНОВЫХ ЧАСТИЦАХ

Гудков М.В., Бревнов П.Н., Рывкина Н.Г., Шиянова К.А., Гулин А.А., Крашенинников В.Г., Горенберг А.Я., Новокшонова Л.А., Мельников В.П.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

В данной работе предложена и исследована темплатная стратегия *in-situ* полимеризации для получения аэрогелей графен/полимер с улучшенными механическими свойствами, высокой пористостью, необычной кристаллической структурой и настраиваемыми электрофизическими и гидрофобными свойствами. Предложенный подход изучен на примере системы восстановленный оксид графена (ВОГ)/сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ). Также предложен новый метод полимеризации этилена непосредственно на поверхности листов графена, предварительно структурированных в качестве темплата (шаблона) в виде аэрогеля.

Показано, что in-situ полимеризация этилена на поверхности листов ВОГ происходит равномерно во всем объеме аэрогеля. При содержании СВМПЭ в аэрогеле менее 20 мас.%, пористые композиционные материалы демонстрируют прекрасную упругость и высокую электропроводность. Содержание полимера более 80 мас.% приводит к материалам с выраженной пластичностью, улучшенными гидрофобными свойствами и увеличенным в 49 раз модулем упругости по сравнению с чистым ВОГ аэрогелем.

Варьирование содержания полимера в композиционных аэрогелях позволяет изменять электропроводность композитов в диапазоне от $4.8*10^{-6}$ до $4.9*10^{-1}$ См/м, а также управлять гидрофобными свойствами материалов. Разработанный подход позволит создавать новые высокопористые композитные материалы с высокоразвитой морфологией поверхности и уникальными физико-химическими свойствами, контролируемыми толщиной полимерного слоя на поверхности графеновых листов и/или свойствами исходного темплата.

Такие композиты могут быть использованы в качестве материалов для реконструктивной хирургии, космической, авиационной промышленности или специальных применений в условиях крайнего севера.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФИЦ ХФ РАН.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 1-ЭТИЛ-3-МЕТИЛИМИДАЗОЛИЙ ТЕТРАФТОРБОРАТА В ЗАРЯЖЕННЫХ ПЛОСКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПОРАХ

Гурина Д.Л.[1,2], Одинцова Е.Г.[1,2], Будков Ю.А.[1]

[1]*Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова НИУ ВШЭ*
[2]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН*

Поведение ионной жидкости (ИЖ) (1-этил-3-метилимидазолий тетрафторбората) в плоских отрицательно заряженных углеродных нанопорах различной ширины (1 ÷ 15 нм) (Рис.1) изучено методом молекулярно-динамического моделирования с использованием полно-атомного и крупнозернистого силовых полей. Обсуждаются такие характеристики, как зарядовая, массовая и численная плотности ионной жидкости внутри поры, расклинивающее давление как функция ширины поры, функции радиального распределения и угловые распределения. Для ионной жидкости заключенной в поры шириной менее 5 нм характерна структура с чередующимися слоями катионов и анионов. Катионы, в ближайшем к заряженным поверхностям слое, находятся преимущественно в параллельной ориентации. Вблизи поверхностей графена при σ =-12.8 мкКл/см^2 наблюдается эффект сверхкомпенсации заряда, а при σ=-41.6 мкКл/см^2 — эффект насыщения решетки. Обнаружена корреляция между расклинивающим давлением и структурой ионной жидкости. С увеличением ширины поры область ионной жидкости, состоящая из чередующихся слоев катионов и анионов, постепенно замещается областью близкой по структуре к объемной фазе ИЖ, что приводит к уменьшению расклинивающего давления.

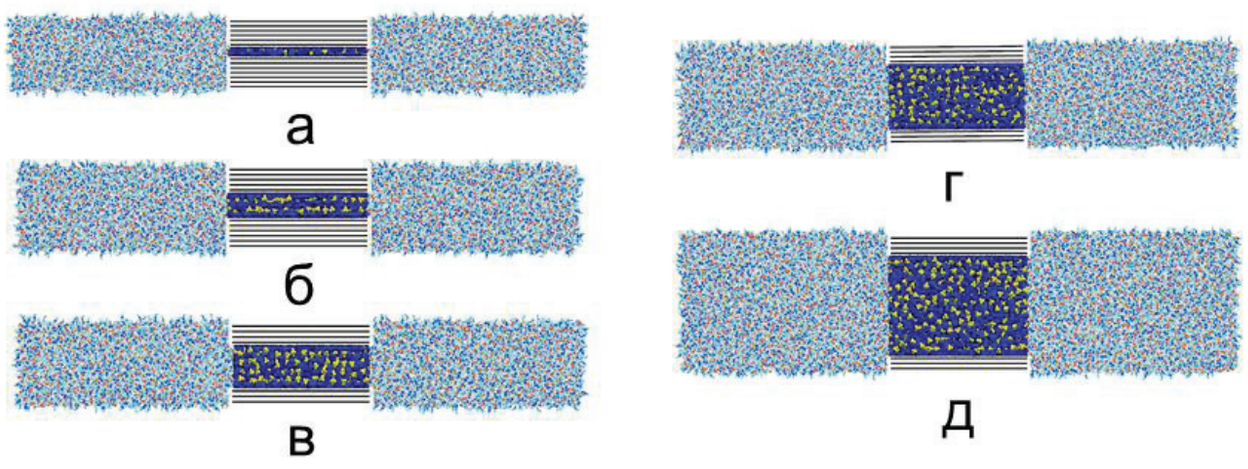


Рис. 1. Снимки ячеек моделирования. Синим и желтым цветом в области поры представлены ионы $[EMIM]^+$ и $[BF_4]^-$ в порах шириной 1 нм (а), 2 нм (б), 3 нм (в), 5 нм (г) и 7 нм (д). Черным цветом обозначены атомы углерода графеновых листов. Оранжевым, розовым, белым, голубым и синим цветами в области объемной ИЖ обозначены атомы бора, фтора, водорода, углерода и азота.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ № 21-11-00031 (расчет структурных характеристик), и гранта Президента РФ № MD-341.2021.1.3 (расчет расклинивающего давления).

ПОЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОЭНЕРГИИ ИЗ ГРАДИЕНТА КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕТОДОМ ОБРАТНОГО ЭЛЕКТРОДИАЛИЗА

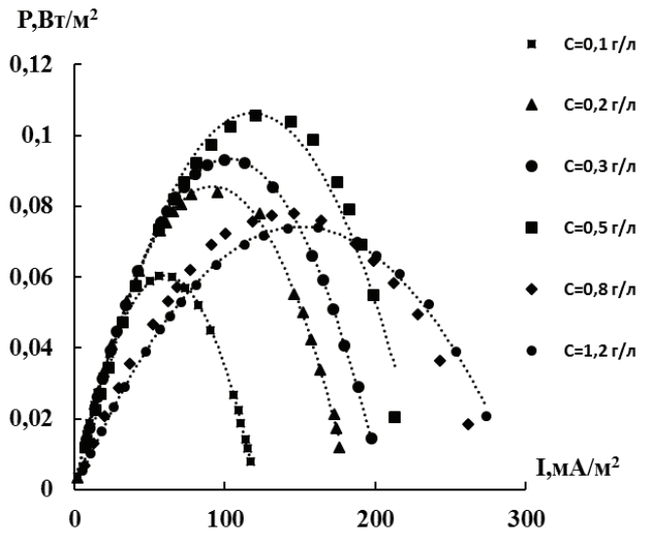
Давыдов Д.В., Мельников С.С., Ачох А.Р., Коржов А.Н., Лоза С.А., Бондаренко И.Д.

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»

Обратный электродиализ (RED) является многообещающей технологией преобразования градиента солености в полезную электроэнергию, её возможно получить при смешивании двух водных растворов разной солености.

Объектами исследования являлись чешские гетерогенные ионообменные мембраны Ralex CM, Ralex AMH (Mega a.s., Czech Republic). Для исследования мощностных характеристик процесса обратного электродиализа был выбран модельный раствор морской воды Чёрного моря с солесодержанием хлорида натрия 20 г/л, а в качестве пресной воды использовались растворы с различным содержанием NaCl от 0,1-1,2 г/л. Лабораторный электродиализатор состоял из 9 парных камер.

Результаты измерений мощностных характеристик на модельном растворе Чёрного моря при различном солесодержании NaCl в «пресной воде» представлены на рисунке 1.



Максимальная выходная мощность при данном градиенте солёности наблюдается при концентрации 0,5 г/л. Это может быть описано зависимостью выходной мощности от сопротивления, а также потенциала разомкнутой цепи.

При увеличении солесодержания NaCl в «пресной воде» сдвиг происходит в область с большей плотностью тока это связано с вкладом омической и неомической составляющей сопротивления.

Рис. 1. Зависимость удельной мощности электродиализатора от плотности тока

ПОЛУЧЕНИЕ ОЛОВОСОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ РАЗЛИЧНЫЕ ДВУХВАЛЕНТНЫЕ КАТИОНЫ

Даминдарова В.Н.[1], Япрынцев М.Н.[2], Лебедева О.Е.[1]

[1]*Белгородский государственный национальный исследовательский университет*
[2]*Центр коллективного пользования «Технологии и Материалы НИУ «БелГУ»*

Методом соосаждения при 30 °С получены оловосодержащие слоистые двойные гидроксиды (СДГ) с карбонат-анионами, расположенными в межслоевом пространстве. Варьируемым параметром был катион двухвалентного металла, участвующего в формировании структуры бруситоподобных слоев и частично заменяемого ионами Sn^{2+} (степень замещения составляла 10 %). В качестве объектов исследования выбраны магний, кобальт и никель.

Изучение продуктов синтеза осуществлялось методом рентгенофазового анализа. Параметры: дифрактометр Rigaku (CuKα-излучение), шаг сканирования по 2θ — 0,02°. Дифрактограммы образцов представлены на рис. 1.

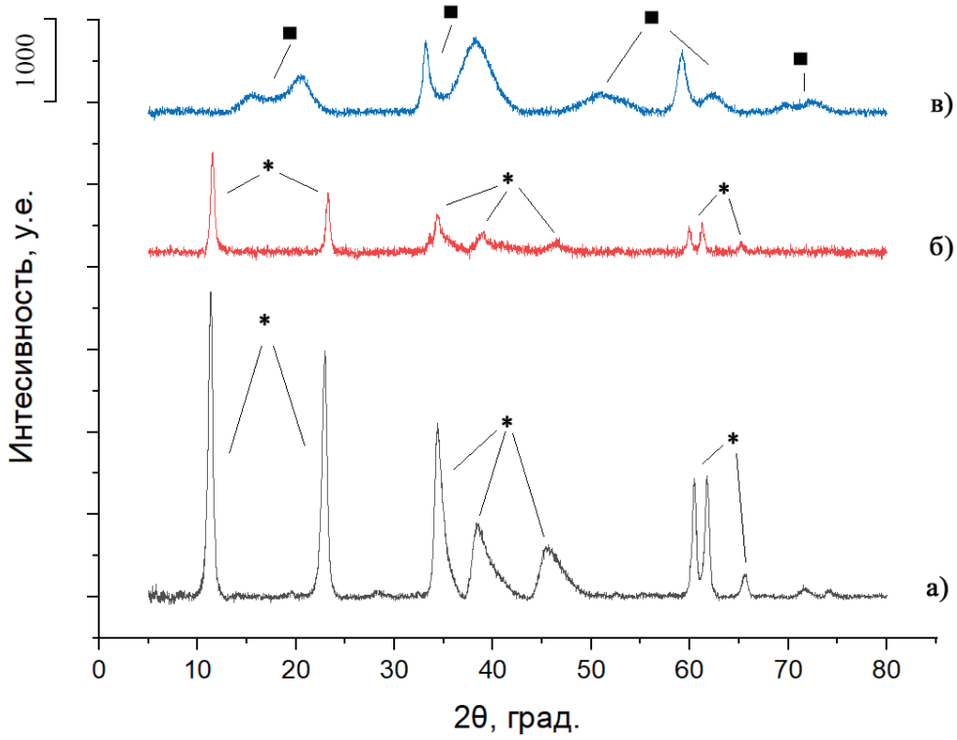


Рис. 1. Дифрактограммы образцов:
а) MgSn/Al-СДГ; б) CoSn/Al-СДГ; в) NiSn/Al-СДГ. Условные обозначения: * — фаза СДГ, ▪ — $Ni(OH)_2$.

Установлено, что бруситоподобная структура образуется только при синтезе образцов, содержащих Mg^{2+} и Co^{2+}, причем в обоих случаях наблюдаются характерные для СДГ рефлексы: (003), (006), (012), (015), (018) и дублет (110)-(113). Однако при сравнении следует отметить существенную разницу в количественном соотношении фаз: магний-содержащего гидроталькитоподобного соединения образовалось существенно больше. Слоистый двойной гидроксид, содержащий катионы никеля и олова, не сформировался: единственной идентифицируемой фазой является гидроксид Ni(II). Учитывая, что гидроксид алюминия зафиксирован не был, можно сделать вывод о его аморфном состоянии либо отсутствии вообще. Следовательно, осаждения анионов на поверхности $Al(OH)_3$ не происходило, и, как результат, единственным продуктом оказался $Ni(OH)_2$, полученный еще на начальных стадиях синтеза.

Возможно, причиной является повышенная склонность двухвалентного никеля к образованию гексааква-комплексов. Основность среды не повлияла на процесс: значение pH было выше pH полного осаждения гидроксида с наибольшим показателем ($Mg(OH)_2$).

КАТИОНИЗАЦИЯ IN SITU И РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ MALDI-МАТРИЦЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИПИДНОГО СОСТАВА ТКАНЕЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА

Даничкина К.В.[1], Шамраева М.А.[1], Пеков С.И.[1,2], Попов И.А.[1]

[1]*Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская область, 141701, Россия*

[2]*Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар, 30, корп.1, Москва, 121205, Россия*

Липидный профиль опухолевой ткани значительно отличается от здоровой, поскольку жирные кислоты активно используются для образования новых клеток. Эффективным способом определения липидного состава является масс-спектрометрия с использованием матричной лазерной десорбции/ионизации (MALDI-MS). Данный метод позволяет проводить исследование непосредственно с поверхности среза ткани исследуемого образца. Получаемое масс-спектрометрическое изображение (mass spectrometry imaging, MSI) даёт информацию о распределении различных молекул в ткани. Подбор оптимальных условий исследования важен для верной идентификации биомаркеров заболеваний. Согласно опубликованным исследованиям, фосфатидилхолины преимущественно ионизируются в их катионизированных формах, что искажает масс-спектрометрические профили липидов тканей мозга. Доступные способы обессоливания in situ имеют недостатки в отношении чувствительности и воспроизводимости данных, а также могут приводить к повреждению образца. В связи с этим нами был использован метод профилирования, заключащийся в принудительной катионизации однотипными ионами. Исследованы результаты катионизации in situ солями лития и аммония, а также влияние времени рекристаллизации нанесенной на образец матрицы MALDI (2,5-дигидроксибензойной кислоты, DHB) на качество спектра.

Для уменьшения вклада различно-катионизированных форм липидов в масс-спектр проведены серии экспериментов. Срезы головного мозга крысы капельно промывали 1 мл деионизированной воды, а также растворами 1 мл ацетата аммония и трифторацетата лития в различных концентрациях (C_1 = 75 мМ; C_2 = 150 мМ; C_3 = 300 мМ; pH_1 = 6,73; pH_2 = 6,81; pH_3 = 6,837). Затем матрица (DHB) наносилась на срезы сублимационным напылением в вакуумной камере. Для включения матрицы в толщу образца применялся метод рекристаллизации, описанный ранее лишь для режима детектирования отрицательно-заряженных ионов. Рекристаллизация в парах воды проводилась при 60 ^{0}C в течение 60 с, 90 с или 120 с. В результате было подтверждено значительное увеличение абсолютной интенсивности пиков, а также отношения сигнал-шум (S/N) для режима образования положительно-заряженных ионов.

Таким образом, применение молекулярной деконволюции in situ срезов мозга крысы в сочетании с этапом рекристаллизации матрицы заметно улучшило чувствительность и отношение S/N. Варьирование времени способствовало выявлению оптимальных условий рекристаллизации. Разнообразие липидных аддуктов было сокращено, что позволило добиться однозначной интерпретации спектра.

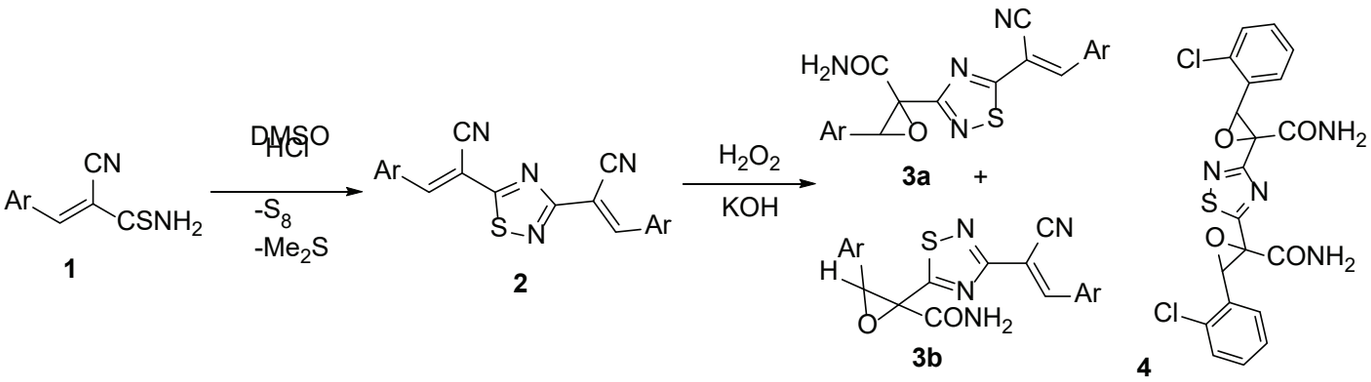
Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований № 18-29-01026.

2,2′-(1,2,4-ТИАДИАЗОЛ-3,5-ДИИЛ)БИС(3-(2-ХЛОРФЕНИЛ)ОКСИРАН-2-КАРБОКСАМИД) : СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ

Дахно П.Г.[1], Левченко А.Г.[1], Доценко В.В.[1]

[1]*Кубанский государственный университет*

Функциональные производные 1,2,4-тиадиазола **2** содержат высокореакционноспособные акрилонитрильные фрагменты и широко применяются для получения многих гетероциклических продуктов. Соединения **2** были окислены в условиях реакции Радзишевского (H_2O_2, KOH) с вовлечением одного из акрилонитрильных фрагментов и образованием эпоксиамидов **3a** и **3b** с умеренными выходами (до 50%). Установлено, что реакция протекает неселективно, и дает смесь продуктов региоизомерного окисления. Лишь в одном из случаев удалось выделить продукт двойного эпоксидирования **4**.



Для прогнозирования возможной биологической активности полученного соединения **4** был использован сервис Pass Online. Эпоксиамид **4** ожидаемо обнаруживает противоопухолевые свойства (51,8%) и в меньшей степени — противовирусные (37,1%) и антилейкемические (40,5%). К благоприятным свойствам данного соединения с большой вероятностью относят лечение фобических расстройств (67,9%). Однако, дополнительно возникают риски хореоатетоза (56,9%) и развития нейтрофильного дерматоза — синдрома Свита (56,3%), а также полиорганной недостаточности (52,4%). Молекулярный докинг с целью поиска протеиновых мишеней проводили с использованием сервиса GalaxyWeb Sagittarius. По результатам докинга, минимальное значение скоринговой функции для соединения **4** найдено для андрогенного рецептора (PDB ID 4OK1) (рис. 1).

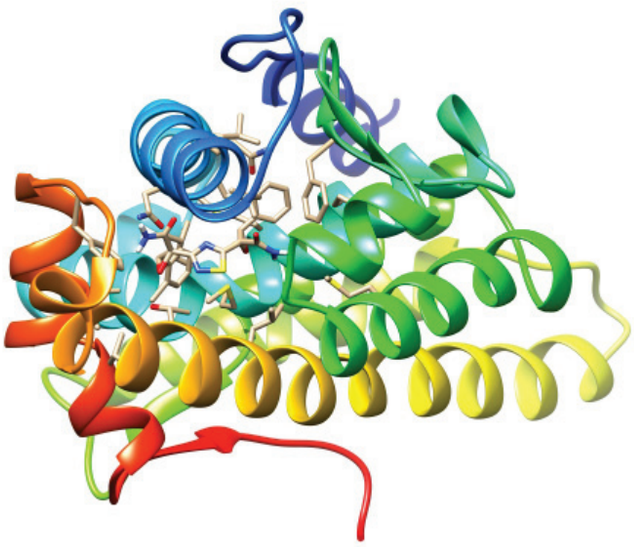


Рис. 1. Прогнозируемая структура протеин-лигандного комплекса для соединения **4** и андрогенного рецептора (PDB ID 4OK1).

ОЦЕНКА ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И БИОДЕГРАДАЦИИ ПОЛИЭФИРНЫХ СОПОЛИМЕРОВ IN VITRO В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БИОСОВМЕСТИМЫХ МАТЕРИАЛОВ

Деева В.В.[1,2], Жердева В.В.[1], Казачкина Н.И.[1], Богданов А.А.[1]

[1]ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Россия, vjerdeva@inbi.ras.ru
[2]Московский политехнический университет, Москва, Россия

Биорезорбируемые полимеры — важный компонент имплантируемых устройств, включая компоненты для трибоэлектрики. Миниатюризированные устройства на основе трибоэлектрических наногенераторов (ТЭНГ) способны преобразовывать энергию механической деформации тканей и силы трения, которые являются следствием процессов жизнедеятельности, в электрическую энергию. Ожидается, что ТЭНГ по истечении времени работы должны претерпевать биодеградацию, не требуя хирургического вмешательства.

В представленной работе было проведено тестирование in vitro на цитотоксичность четырех различных по составу сополимеров (полиэфирный сополимер общего состава: цитрат(a)-гександиол(b)-пропан-1,2-диол(c)-глутарат(d) (CHPG) различной степени кросс-сшивки (1-4 по увеличению). Жизнеспособность клеток была изучена с помощью колориметрического теста оценки метаболической активности клеток (МТТ-тест). Проведена оценка биодеградации путем инкубации образцов полимеров в растворе с ферментами и в буферном растворе.

Экспериментально установлено, что образцы полиэфирного сополимера, различающиеся степенью перекрестной сшивки, отличаются скоростью деградации в модельных условиях: CHPG-1 деградирует быстрее остальных. Данные по быстрой деградации полимера CHPG-1 согласуются с результатами, полученными на клеточных культурах. Полимеры CHPG 2-4 деградируют быстрее под действием гидролаз: на 15 день они полностью деградируют в растворе ферментов и частично растворяются в буфере. При этом вязкость растворов, в которых вели инкубацию образцов сополимеров, увеличивается. Более длительная деградация наблюдается для образца CHPG-4, который отличается наибольшей степенью кросс-сшивки, и обладает более высокой жесткостью структуры.

Определена степень цитотоксичности сополимеров на мышиных клетках различного происхождения (фибробластоподобные, миобластоподобные, опухолевые клетки). На все клеточные культуры токсическое воздействие сополимеров было неодинаковым, что связано с разным количеством клеток (увеличение количества клеток приводит к снижению цитотоксичности). В условиях 100% конфлюэнтности культур проявление цитотоксичных свойств сополимерами не подтверждается, за исключением полимера CHPG-1 в случае его полного растворения в среде и цитопатологического действия полимера CHPG-2 на миобластоподобные клетки. В общем случае, для полимера CHPG-4 цитотоксический эффект не обнаружен, наименьшей цитотоксичностью обладает полимер CHPG-3, в случае с полимерами CHPG-2 и CHPG-1 цитотоксическое действие увеличивалось.

Полученные данные позволяют сделать вывод, что изученные сополимеры являются подходящими материалами-кандидатами для создания на их основе имплантируемых ТЭНГ.

В работе использовалось оборудование ЦКП ФИЦ Биотехнологии РАН: планшетный ридер CLARIOstar Plus (BMG LABTECH, ФРГ).

Работа выполнена при поддержке гранта МОН № 13.2251.21.0009 (Соглашение № 075-15-2021-942)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТЕРЕОКОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЛАКТИДА И ОКСИДА ЭТИЛЕНА НА ИХ САМООРГАНИЗАЦИЮ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИЦЕЛЛ В РАЗБАВЛЕННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Десяцкова А.М., Разуваева Е.В., Пучкова Ю.А., Ястремский Е.В., Бакиров А.В., Чвалун С.Н.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Мицеллы на основе амфифильных блок-сополимеров лактида и оксида этилена, состоящие из гидрофобного поли(лактидного) (ПЛА) ядра, окружённого стабилизирующей гидрофильной поли(этиленоксидной) (ПЭО) короной, активно исследуют в биомедицине в качестве потенциальных средств адресной доставки различных биологически активных веществ (лекарственных препаратов, белков, гормонов, вакцин и пр.). Структуру и физико-химические свойства таких мицелл можно варьировать в широком диапазоне, изменяя строение исходного сополимера, соотношение длин гидрофобного и гидрофильного блоков в нём, а также стереорегулярность гидрофобного блока.

В данной работе в качестве объектов исследования были выбраны блок-сополимеры поли(L,L-лактид)-*б*-ПЭО (П(L,L)ЛА$_n$-*б*-ПЭО$_{113}$) (n = 15–97) и поли(D,D-лактид)-*б*-ПЭО (П(D,D)ЛА$_m$-*б*-ПЭО$_{113}$) (m = 18–101). Согласно данным флуоресцентной спектроскопии рост степени полимеризации n и m гидрофобного П(L,L)ЛА и П(D,D) ЛА блока соответственно приводит к снижению величины критической концентрации мицеллообразования от $(5{,}0\pm0{,}7)\cdot10^{-6}$ до $(3{,}2\pm0{,}9)\cdot10^{-8}$ моль/л в ряду П(L,L)ЛА$_n$-*б*-ПЭО$_{113}$ сополимеров и от $(4{,}5\pm0{,}3)\cdot10^{-6}$ до $(1{,}0\pm0{,}4)\cdot10^{-8}$ моль/л в ряду П(L,L)ЛА$_n$/П(D,D)ЛА$_m$-*б*-ПЭО$_{113}$.

Водные суспензии мицелл на основе П(L,L)ЛА$_n$-*б*-ПЭО$_{113}$ и эквимолярной смеси П(L,L)ЛА$_n$/П(D,D)ЛА$_m$-*б*-ПЭО$_{113}$ сополимеров получали диализом. Кристаллическую структуру П(L,L)ЛА ядра в П(L,L)ЛА$_n$-*б*-ПЭО$_{113}$ мицеллах, а также П(L,L)ЛА/П(D,D)ЛА ядра, представляющего собой стереокомплекс П(L,L)ЛА и П(D,D)ЛА цепей, в П(L,L)ЛА$_n$/П(D,D)ЛА$_m$-*б*-ПЭО$_{113}$ мицеллах исследовали методом широкоуглового рентгеновского рассеяния. Согласно данным динамического рассеяния света во всех исследуемых водных суспензиях индивидуальные мицеллы с гидродинамическим диаметром $D_h \approx 30$ нм сосуществуют с небольшим количеством крупных агрегатов ($D_h > 300$ нм). В рамках экспериментальной погрешности значения D_h П(L,L)ЛА$_n$/П(D,D)ЛА$_m$-*б*-ПЭО$_{113}$ и П(L,L)ЛА$_n$-*б*-ПЭО$_{113}$ индивидуальных мицелл совпадают и слабо зависят от длины гидрофобного ПЛА блока (c = 1 мг/мл). Электрокинетический потенциал мицелл оказался отрицательным, его величина варьировалась от –5 до –18 мВ. Методом просвечивающей электронной микроскопии обнаружено сосуществование индивидуальных сферических мицелл и протяжённых лентовидных структур для всех исследуемых образцов, кроме П(L,L)ЛА$_{46}$/П(D,D)ЛА$_{56}$-*б*-ПЭО$_{113}$. Для образца на основе П(L,L)ЛА$_{46}$/П(D,D)ЛА$_{56}$-*б*-ПЭО$_{113}$ наблюдали лишь частицы сферической формы с диаметром $D = 13 \pm 2$ нм. Показана возможность использования П(L,L)ЛА$_{46}$/П(D,D) ЛА$_{56}$-*б*-ПЭО$_{113}$ мицелл в качестве носителей для адресной доставки противоракового лекарственного препарата оксалиплатина. По данным масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой содержание загруженного в мицеллы препарата составило 1,26% (при исходной загрузке 5 вес.% по массе сополимера), а эффективность инкапсулирования — 25,2%.

Таким образом, стереокомплексообразование существенно влияет на кристаллическую структуру ядра мицелл, их размер и форму. Показано, что П(L,L)ЛА$_{46}$/П(D,D)ЛА$_{56}$-*б*-ПЭО$_{113}$ мицеллы могут быть использованы в качестве эффективных средств адресной доставки оксалиплатина.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект № 21-73-00071).

НЕЙРОННАЯ АКТИВНОСТЬ В БЛЕДНОМ ШАРЕ У ПАЦИЕНТОВ С DYT1

Джалагония И.З.[1], Усова С.В.[1], Гамалея А.А.[2], Томский А.А.[2], Седов А.С.[1]

[1] *Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук*
[2] *Национальный медицинский исследовательский центр нейрохирургии имени академика Н.Н.Бурденко*

Дистония — это двигательное расстройство, характеризующееся непроизвольными мышечными сокращениями, приводящими к патологической позе, и часто сопровождающееся дистоническим тремором. Патофизиологические механизмы, приводящие к подобной симптоматике, остаются неизвестны. У некоторых пациентов с дистонией обнаружена мутация в гене DYT1. DYT1 мутация приводит к дисфункции белка торзина А, в следствии чего снижается концентрация ацетилхолина и увеличивается активация нейронов стриатума, которые ингибируют бледный шар. При этом остается неизученной связь мутации с электрофизиологическими изменениями активности нейронов в системе базальных ганглиев.

Целью данного исследования был сравнительный анализ активности нейронов бледного шара у пациентов с DYT1 дистонией и идиопатической дистонией.

Данные были получены во время стереотаксических операций по вживлению электродов для глубинной стимуляции мозга (DBS). Во время операций мы получали запись активности одиночных нейронов во внешнем и внутреннем бледном шаре у 5 пациентов с DYT1 и у 5 пациентов без DYT1.

Всего была проанализирована активность 662 нейронов (365 нейронов у пациентов с мутацией и 297 нейронов у пациентов без мутации). Нейроны были разделены на 3 группы (паузные, тонические и пачечные) с помощью метода иерархической кластеризации с определением частоты разрядов, межпачечного интервала, индекса асимметрии, коэффициента вариации и др. Статистически значимые различия между группами пациентов были найдены в двух параметрах: частоты разрядов и межпачечного интервала. Мы показали, что в обоих сегментах бледного шара была обнаружена сниженная частота разрядов в пачечных и паузных нейронах. В тонических нейронах значимых различий не было обнаружено. Сниженная активность нейронов бледного шара обусловлена повышенной активностью нейронов стриатума. Данный эффект показан в статье Mariangela Scarduzio — Strength of cholinergic tone dictates the polarity of dopamine D2 receptor modulation of striatal cholinergic interneuron excitability in DYT1 dystonia, в которой проводилось исследование стриатума мышей in vivo и in vitro.

Наша гипотеза о снижении активности нейронов во внешнем и внутреннем бледном шаре подтвердилась. Мы считаем, что именно DYT1 мутация является причиной уменьшения частоты разрядов и увеличения межпачечного интервала.

Данная работа была поддержана грантом РНФ 18-15-00009 — получение и анализ электрофизиологических данных и грантом РФФИ 20–015-00438 — анализ клинических данных.

СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ В РАСТВОРЕ ФТАЛОЦИАНИНАТОВ ЛАНТАНИДОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Домарева Н.П., Ботнарь А.А., Бычкова А.Н., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Фталоцианины сэндвичевого типа в последние годы привлекают внимание ввиду возможности получения на их основе компонентов для биомедицинских систем, например, в области диагностике вирусных заболеваний. Перспективность фталоцианинатов сэндвичевой архитектуры, где макроциклические лиганды связанны между собой с помощью ионов лантанидов, заключается в возможности улучшения их фотофизических и фотохимических свойств путем варьирования природы металла и заместителей. Так, низкая растворимость незамещенных фталоцианинов приводит к ограничению их применения, кроме того, тенденция к агрегации ухудшает ряд свойств. Введение заместителей как в периферийные, так и в непериферийные позиции фталоцианинового макрокольца позволяет не только увеличивать растворимость комплексов в различных средах, но и придавать всевозможные практически полезные свойства. Это открывает новые возможности для применений их в качестве электрохимических биосенсоров, которые являются надежными и высокочувствительными системами.

В настоящей работе рассматривается поведение периферически и неперифирически замещенных двухпалубных фталоцианинатов лантанидов с феноксильными фрагментами, полученных путем темплатной конденсации замещенного фталонитрила и ацетата неодима в расплаве. Стоит отметить, что феноксизамещеные комплексы обладают повышенной растворимостью в органических растворителях. В работе изучено влияние размера иона лантанида в результате окислительно-восстановительных превращений. Для этого к приготовленному в толуоле раствору заданной концентрации комплекса был добавлен гидразин-гидрат, который инициировал redox-реакцию. Для процесса были получены кинетические кривые, для начального прямолинейного участка были построены зависимости $\ln(c_o/c)$ от времени τ, что позволило рассчитать эффективную константу процесса. Наибольшее значение $k_{эфф}$ принимает макроцикл с наибольшим ионным радиусом лантанида. Увеличение ионного радиуса лантанида приводит к возрастанию расстояния между фталоцианиновыми лигандами, что вероятно благоприятствует контакту реакционного центра макроцикла и восстановителя.

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В СИСТЕМЕ NI-NB ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Доронина М.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

Изучение конденсированных сред в определенных экстремальных условиях позволяет лучше понять механизмы микроскопических структурных превращений и разработать материалы с совершенно новыми механическими свойствами.

В настоящей работе изучены структура и кинетика кристаллизации объемного металлического стекла (ОМС) $Ni_{62}Nb_{38}$. Мы показываем, что этот ОМС быстро кристаллизуется под совместным действием сдвиговой деформации и сверхвысокого давления. Выявлено пороговое давление, необходимое для инициирования образования стабильной кристаллической фазы. Сдвиговая деформация и высокое давление приводят к фазовому разделению: образуются две неоднородные кристаллические структуры высокой плотности. Мы обнаружили, что кристаллизация этого ОМС происходит в две стадии из-за существенной разницы в скоростях роста кристаллических фаз Ni и Nb (см. рисунок 1).

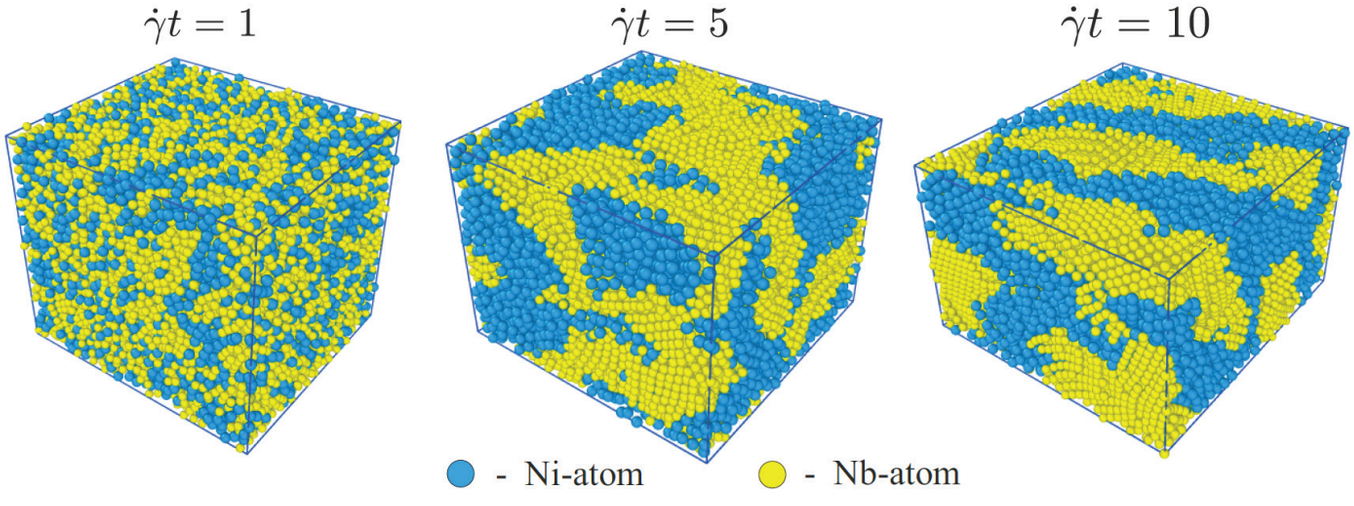


Рис. 1. Мгновенные снимки системы при различных степенях деформации и при давлении 600 GPa.

Из рисунка 1 видно, что фазовое расслоение отчетливо проявляется при высоких давлениях (более 400 ГПа) и при деформациях больше единицы. Рост каждой фракции происходит как за счет присоединения отдельных атомов Ni или Nb, так и за счет слияния мелких кристаллитов.

Слияние зародышей приводит к образованию неоднородной кристаллической структуры, характерной для фазового расслоения. Отметим, что подобное диффузионное перераспределение компонентов с изменением кристаллической структуры наблюдается во многих многокомпонентных сплавах, испытывающих фазовые превращения.

Например, распад спинодального типа и образование наноразмерной композитной структуры наблюдались ранее в сплавах Cu-Co и LiFePO4 при деформации кручением под высоким давлением.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

DFT- МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА И КИСЛОРОДА НА НАНОЧАСТИЦАХ БЛАГОРОДНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ, НАНЕСЕННЫХ НА ПОДЛОЖКУ ГРАФИТА

Дохликова Н.В., Гатин А.К., Сарвадий С.Ю., Руденко Е.И., Гришин М.В., Шуб Б.Р.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

С помощью квантово-химического моделирования в приближении теории функционала плотности (DFT) исследована адсорбция атомарного H на кластерах Au_{13}, Cu_{13}, Ni_{13} и Pt_{13} и O на кластерах Ni_{13} и Pt_{13} на подложках графита с различными дефектами. Целью данной работы было исследования зависимости адсорбционных свойств, а именно энергии связи и локальной плотности состояний, наноструктур на основе благородных и переходных металлов на подложке графита от положения адатома и дефектности подложки.

Моделирование адсорбции H и O на кластерах металлов, нанесенных на подложку графита, проводилось в программных пакетах QuantumEspresso 5.1.1 (QE) и OpenMX 3.8 (OMX). В QE использован ультрамягкий псевдопотенциал с LDA-функционалом с учетом релятивизма движения электронов. Наборы примитивных базисных функций в пакете OMX примерно соответствовали двойному набору слэттеровских функций. Исследование особенностей взаимодействия атомов H и O с кластерами металлов производилось путем расчета энергии связи при различном положении адсорбата на поверхности кластера относительно подложки графита, т.е. на различных сайтах адсорбции.

Влияние дефектности графитовой подложки рассматривалось на примере вакансии атома углерода, дефекта 5/7 и обрывов плоскости графена типа зигзаг и кресло. Для установления степени влияния подвижности атомов металла на адсорбцию расчеты энергии связи проводились как при фиксированном, так и при расслабленном положении атомов металла. Для адсорбции H и O рассчитывались соответствующие изменения локальной спроектированной плотности состояний системы, которые сопоставлялись с топографическими и спектроскопическими особенностями СТМ/СТС измерений.

Согласно проведенному исследованию энергия связи кластеров переходных металлов Ni_{13} и Pt_{13} больше, чем энергия связи кластеров благородных металлов Cu_{13} и Au_{13}, что, разумеется, оказывает влияние на адсорбционные свойства этих кластеров. Благодаря тому, что плотность состояний вблизи уровня Ферми кластеров переходных металлов в основном образована d-электронами и взаимодействие с подложкой сильное, сайты адсорбции адатомов на вершине и интерфейсе становятся равнозначными. Как известно, в переходных металлах основной вклад, определяющий величину энергии связи, вносит плотность d-состояний вблизи уровня Ферми, которая благодаря сильному взаимодействию с подложкой может варьироваться и вблизи интерфейса и на вершине кластера.

При слабом взаимодействии с подложкой (Cu и Au) адсорбция на сайтах вблизи интерфейса становится предпочтительней. Плотность состояний вблизи уровня Ферми для кластеров благородных металлов образована s-электронами, вклад которых в образование связи возрастает на интерфейсе, вследствие атомной трансформации кластера. При этом влияние подложки на сайты на вершине намного меньше. Степень проявления «эффекта интерфейса» для кластеров Au немного больше, чем для кластеров Cu, что может быть обусловлено в том числе и более заметной атомной трансформацией кластеров Au. Также в системах с относительно слабым взаимодействием кластера металла и подложки становится заметным влияние дефектов подложки. Результаты моделирования и СТМ-СТС экспериментов показали качественную корреляцию.

Все расчеты выполнены с использованием ресурсов МСЦ РАН.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСИПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА В ОРГАНИЧЕСКИХ ФОТОВОЛЬТАИКАХ

Дубинец Н.О.

Центр Фотохимии, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Эксиплексы в смесях донорных и акцепторных органических полупроводников встречаются достаточно часто. Их можно обнаружить по эксиплексной люминесценции, которая представляет собой сильно сдвинутую в красную область широкую бесструктурную полосу. Образование неизлучающих эксиплексов можно использовать в органических фотовольтаиках, основанных на смесях органических полупроводников с дырочным или электронным характером проводимости.

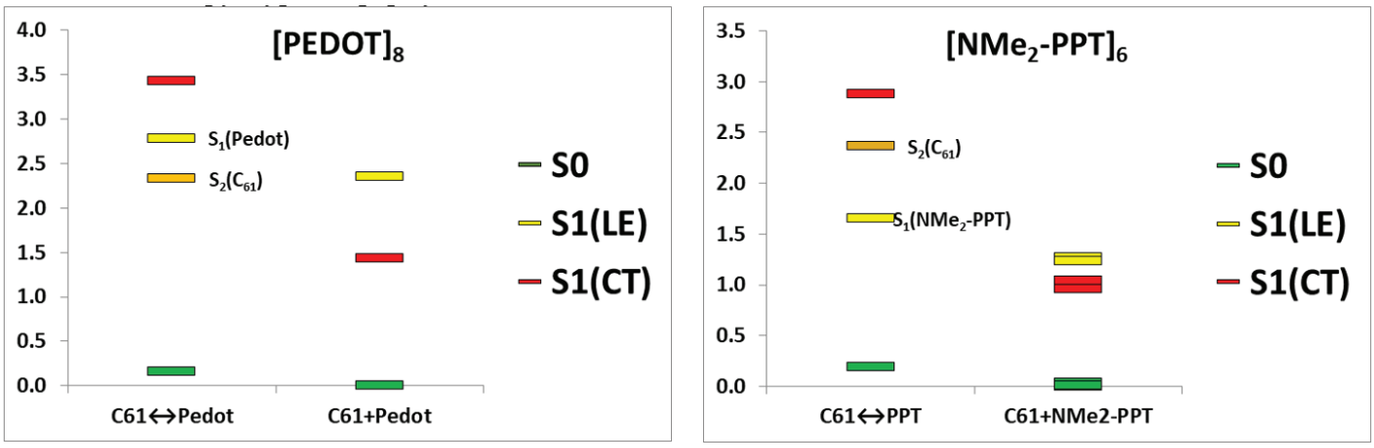
Одной из серьезных проблем органических фотовольтаиков является низкая эффективность генерации зарядов за счет рекомбинации. Образовавшиеся при фотовозбуждении электрон и дырка быстро рекомбинируют за счет излучательных и безизлучательных процессов.

Такие долгоживущие состояния с разделёнными зарядами могут быть в дальнейшем использованы для создания разности потенциалов на фотобатарее.

Значительная часть спектра солнечного света находится в ближнем ИК диапазоне, поэтому эффективность солнечных батарей определяется главным образом поглощением активного слоя батареи в ближней ИК области. Особенно это актуально в условиях пониженной инсоляции (облачности) или при работе солнечных батарей в помещении.

Задача данной работы состояла в подборе пары донор — акцептор с поглощением одного из полупроводников в ближней ИК области и образующей эксиплекс с переносом заряда. Типичной парой донор — акцептор в органических фотовольтаиках является PEDOT (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)) + PC61BM (фенил-C61-метилбутират). Мы исследовали возможность образования эксиплексов с переносом зарядов в этой паре и возможность модификации донора с целью увеличения вероятности образования таких эксиплексов, а также сдвига поглощения в ближнюю ИК область.

Расчёты проводились методом DFT с функционалом BH&HLYP в базисе 6-31+G(d,p).



а. PC61BM + PEDOT б. PC61BM + NME2-PPT

Рис. 1. Уровни возбуждения комплексов PC61BM + PEDOT и PC61BM + NME2-PPT.

В паре PEDOT + PC61BM эксиплексы с переносом заряда не образуются, зато при модификации донора (PEDOT) путём замены алифатического диоксанового кольца на ароматическое пиразиновое и введения аминогруппы, удалось получить пару (NME2-PPT + PC61BM) с поглощением в ближней ИК области, способной к образованию эксиплекса с переносом заряда.

Такую пару уже можно использовать в качестве активного слоя в фотобатарее, работающей в ближней ИК области.

РАЗРАБОТКА АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Духова Ю.С.[1], Евдокимова А.В.[2]

[1]*Ивановский государственный политехнический университет*
[2] *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН*

Применение наноразмерных материалов и структур, обычно в диапазоне от 1 до 100 нанометров (нм), представляет собой развивающуюся область нанонауки и нанотехнологий. Синтез наночастиц благородных металлов для применения в таких областях, как катализ, электроника, текстиль, защита окружающей среды и биотехнология, является областью постоянного интереса. В последнее время осознание необходимости общей санитарии, контактной передачи заболеваний и индивидуальной защиты привело к разработке антимикробного текстиля. Потребность в антимикробном текстиле идет рука об руку с ростом числа устойчивых штаммов микроорганизмов. Функциональный текстиль включает в себя все: от антимикробного готового текстиля до долговечных готовых изделий или одежды, готовой к постоянному прессованию, до текстиля с самоочищающимися свойствами и нанотехнологиями.

Нанообработка текстильных материалов наночастицами металла и оксида металла находится в центре внимания науки и текстильной промышленности почти два десятилетия. Появление устойчивости бактерий к наночастицам серебра из-за чрезмерного использования более дешевых солей-предшественников и отличной антимикробной активности недавно привлекло внимание ученых к наночастицам меди и оксида меди. Наночастицы оксида меди (CuO) обладают широким спектром применения. CuO используется для удаления красителей, изготовления наночастиц, газовых датчиков, полупроводников, органического катализа, преобразования солнечной энергии и многое другое. По сравнению с обычным порошком оксида меди, наночастицы оксида меди проявля-

ют превосходную каталитическую активность и селективность. Также они обладают отличной антимикробной активностью против широкого спектра микроорганизмов, включая грибки, грамположительные и грамотрицательные бактерии.

С учетом вышеизложенной информации настоящее исследование было проведено с целью разработки простого метода синтеза наноразмерного порошка оксида меди для антибактериальной отделки текстильных материалов. Также в данной работе был проведен комплексный анализ физико-химических, фотокаталитических, адсорбционных и антибактериальных свойств полученных наноматериалов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭТОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРИМЕРЕ ТЕСТА «ОТКРЫТОЕ ПОЛЕ» И «НОРКОВОГО ТЕСТА»

Евдокимов Н.Д., Порошин М.А., Белоедова Н.С., Сафандеев В.В.

Федеральное бюджетное учреждение науки «Федеральный научный центр гигиены им. Ф.Ф. Эрисмана» Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека

Для исследования безопасности химических веществ в современных токсикологических экспериментах широко используется оценка поведения животных. Визуальная оценка поведения животных затруднена и подвержена субъективному влиянию со стороны исследователя. В настоящее время известно несколько подходов объективной оценки поведения: использование видеотрекинга, источников лазерного и инфракрасного излучений (далее — ИКИ).

Целью данной работы являлась автоматизированная оценка этологических параметров подопытных животных на примере теста «Открытое поле» и «Норкового теста».

В аккредитованном испытательном лабораторном центре ФБУН «ФНЦГ им. Ф.Ф. Эрисмана» Роспотребнадзора научные сотрудники используют поведенческую камеру, снабженную датчиками «излучателя» и «детектора». Излучатели формируют ИКИ, которое регистрируется детекторами. При пересечении лучей объектом исследования (подопытным животным) сигнал от излучателя не попадает на детектор, что фиксируется программным обеспечением (далее — ПО). По окончанию поведенческого эксперимента в тесте «Открытое поле» и «Норковый тест» продолжительностью 15 минут происходит обработка ПО поступившей информации.

В результате проведенных нами токсикологических экспериментов с помощью данных тестов удалось оценить следующие показатели: моторную активность по пройденному пути (см) и средней скорости движения (см/сек), исследовательскую активность по количеству заглядываний в норки и вертикальной активности (стойки, полустойки), а так же тревожность по времени нахождения животных на разных участках поля. Более того, данные показатели помогли сформировать однородную по этологическим параметрам группу подопытных животных, что очень важно при тестировании небольшого их числа (менее 6).

Использование ИКИ в исследовании этологических параметров подопытных животных является необходимым подходом для объективной оценки поведения, которая, в свою очередь, является неотъемлемым компонентом при проведении токсикологических экспериментов. Поведенческая установка, в основе которой лежит использование ИКИ, позволяет сократить трудоемкость процесса и время исследования. Кроме того, использование автоматизированной установки в тесте «Открытое поле» и «Норковый тест» позволяет работать в соответствии с принципами надлежащей лабораторной практики (GLP), что отвечает требованиям ОЭСР.

СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ СТАБИЛЬНОЙ ДИСПЕРСИИ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА

Евдокимова А.В.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН

Магнитные НЧ обладают многими уникальными магнитными свойствами, такими как суперпарамагнитность, высокая коэрцитивность, низкая температура Кюри, высокая магнитная восприимчивость и др. Магнитные НЧ представляют большой интерес для исследователей из широкого спектра дисциплин, включая магнитные жидкости, хранение данных, катализ и биоаппликации. В частности, магнитные феррожидкости и хранение данных являются прикладными исследованиями, которые привели к интеграции магнитных НЧ в множество коммерческих применений.

Однако контролировать размер, форму, стабильность и диспергируемость НЧ в требуемых растворителях-технологическая задача. Магнитные наночастицы оксида железа имеют большое отношение поверхности к объему и поэтому обладают высокой поверхностной энергией. Следовательно, они имеют тенденцию агрегировать таким образом, чтобы минимизировать поверхностные энергии. Кроме того, обнаженные НЧ оксида железа обладают высокой химической активностью и легко окисляются на воздухе (особенно магнетит), что обычно

приводит к потере магнетизма и дисперсности. Поэтому обеспечение надлежащего покрытия поверхности и разработка некоторых эффективных стратегий защиты для сохранения стабильности магнитных наночастиц оксида железа очень важно. Эти стратегии включают прививку или покрытие органическими молекулами, включая небольшие органические молекулы или поверхностно-активные вещества, полимеры и биомолекулы, или покрытие неорганическим слоем.

В последние десятилетия было проведено много исследований в области синтеза НЧ оксида железа, и во многих докладах были описаны эффективные подходы к синтезу для получения контролируемых по форме, стабильных, биосовместимых и монодисперсных НЧ оксида железа. Наиболее распространенные методы, включая совместное осаждение, термическое разложение, гидротермальный синтез, микроэмульсию, сонохимический синтез и сонохимический синтетический путь, могут быть направлены на синтез высококачественных НЧ оксида железа. Кроме того, эти НЧ могут быть получены и другими методами, такими как электрохимический синтез, методы лазерного пиролиза.

В настоящей работе были использованы два метода получения магнетита: наночастицы магнетита получали методом химического соосаждения из смешанного раствора солей двух- и трехвалентного железа, а также оксид железа получали при использовании подводной импульсной плазмы, возбуждаемой в объеме жидкости между двумя металлическими электродами. Проведен комплексный анализ физико-химических, а также адсорбционных свойств полученных наноматериалов.

ФОТОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НОВОГО ФОТОИНИЦИАТОРА В ПРОЦЕССАХ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Егоров А.Е.[1], Костюков А.А.[1], Бурцев И.Д.[1], Щербаков Д.А.[2], Колымагин Д.А.[2], Чубич Д.А.[2], Гладких Е.В.[2,3], Усейнов А.С.[3], Чесноков С.А.[4], Витухновский А.Г.[2,5], Кузьмин В.А.[1]

[1] Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН (ИБХФ РАН)
[2] Московский физико-технический институт (МФТИ)
[3] Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов (ТИСНУМ)
[4] Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН (ИМХ РАН)
[5] Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН (ФИАН)

Разработка новых фоточувствительных композиций для процессов полимеризации является актуальной задачей в области двухфотонной лазерной литографии. В рамках данной работы была получена и охарактеризована новая молекулярная структура молекулы фотоинициатора (ФИ). Были получены спектрально-кинетические характеристики возбужденных синглетных и триплетных состояний ФИ в различных средах. Рассчитаны константы скорости гибели триплетных состояний (1.0×10^7 c^{-1} для ацетонитрила и 3.2×10^7 c^{-1} для толуола). Показан вклад процессов интеркомбинационной конверсии, цис-транс изомеризации как пути деактивации молекулы ФИ. Показаны процессы переноса энергии с участием триплетного состояния ФИ и молекулярным кислородом. Рассчитана константа скорости реакции отрыва протона от молекул мономера триплетным состоянием ФИ (1.1×10^6 M^{-1} c^{-1}). Полученные данные позволяют говорить о повышенной эффективности нового ФИ в процессах фотополимеризации.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ГИДРОТЕРМАЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ НА ФОРМИРОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЯ $BIAL_3(PO_4)_2(OH)_6$ СО СТРУКТУРОЙ ВЕЙЛЕНДИТА

Еловиков Д.П.[1,2]

[1]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
[2]Санкт-Петербургский технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

Исследование процессов синтеза висмутсодержащих фаз со структурой тригонального вейлендита $BiAl_3(PO_4)_2(OH)_6$, принадлежащих к минералогической надгруппе алунита, в реакционных системах с самоорганизующимися пространственными ограничениями, имеют большое научное значение в плане разработки научных основ получения сложных окидных (оксигидроксидных) фаз в виде нанокристаллов с контролируемыми размерными параметрами. Актуальность исследования таких процессов фазообразования в данном случае базируется не только на использовании объекта, как удобной модели, но и на ожидании перспективных функциональных свойств у получаемых наноматериалах. Анализ отечественной и зарубежной научной литературы показал, что информация о синтезе в лабораторных условиях висмутсодержащих фосфатов со структурой вейлендита на сегодняш-

ний день отсутствует, а известные свойства вейлендита изучались на базе его природного минерала, содержащего примеси, или являются результатами теоретических расчетов.

Микрокристаллические образцы вейлендита были впервые получены методом изотермической выдержки в гидротермальных условиях при 200°С и охарактеризованы методами рентгеновской дифрактометрии (рис.1), ИК — спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии и гелиевой пикнометрии.

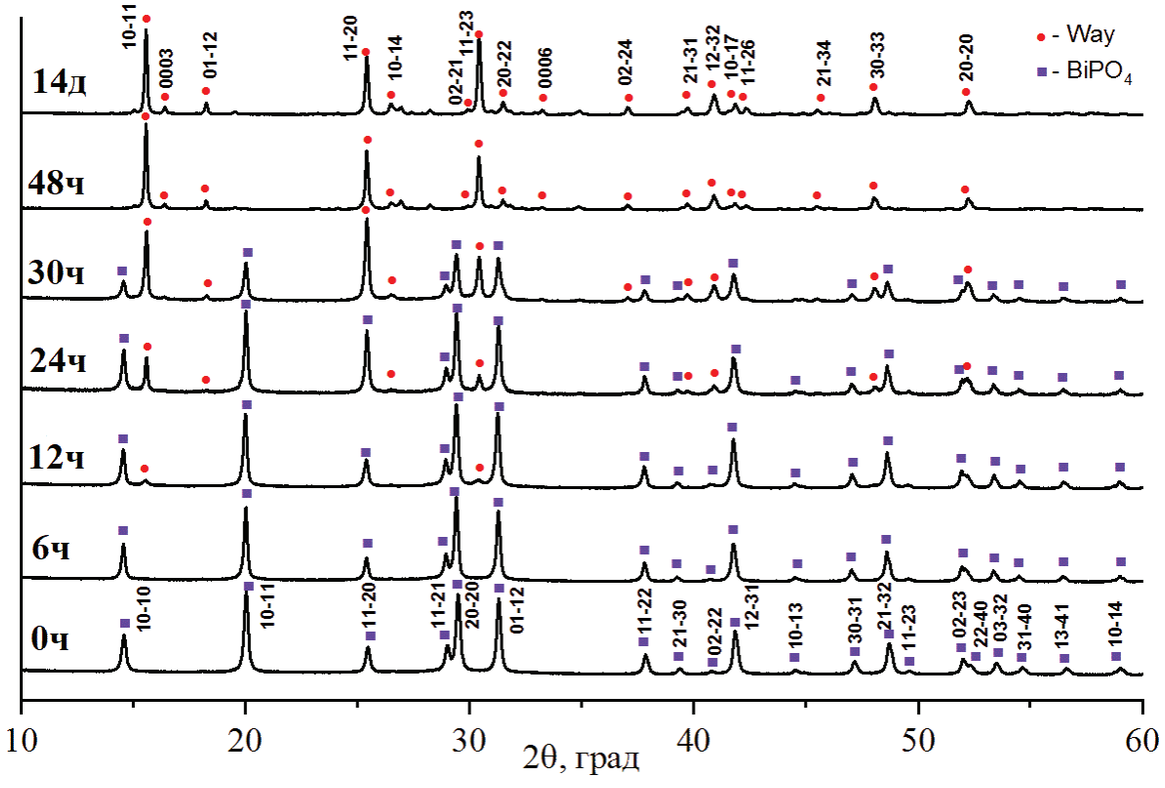


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы образцов с разной продолжительностью изотермической выдержки при pH 7. Круги — соединение со структурой вейлендита, квадраты — $BiPO_4$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 21-13-00260.

Автор выражает благодарность чл.-корр. РАН В.В.Гусарову и к.х.н. О.В.Проскуриной за проявленный интерес к работе и ценные замечания.

ЦИФРОВАЯ МОРФОМЕТРИЯ РАСТЕНИЙ НА ОСНОВЕ PYTHON ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Емекеева Д.Д.[1,2], Казакова Е.М.[1,2], Богословская О.А.[2], Тарасова И.А.[2]

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*
[2]*ИНЭПХФ им. В.Л. Тальрозе ФИЦ ХФ РАН*

Морфометрические измерения растений являются распространенным подходом для сравнения и классификации ботанических образцов, а также для оценки эффектов от применения удобрений, стимулирующих рост растений, например, на стадии прорастания зерна.

Морфометрические измерения включают в себя определение геометрических параметров листьев и корней, их число и массу. В целях оптимизации выполнения морфометрического анализа необходима автоматизация процесса определения значимых отличий в опытных и контрольных группах образцов с помощью программ на основе методов компьютерного зрения.

Для автоматизации морфометрического анализа был разработан программный код на языке Python с использованием библиотек OpenCV/scipy.stats для обработки и анализа изображений. Изображения были получены с помощью цифровых камер, встроенных в мобильные устройства (12-16 МПикс, Android 11/iOS 15.3.1, Samsung/Apple).

Программа была протестирована с использованием пяти-, шести- и семидневных проростков пшеницы, выращенных на целлюлозе рулонным способом в лабораторных условиях (Рис. 1), каждая группа состояла из 130-140 растений.

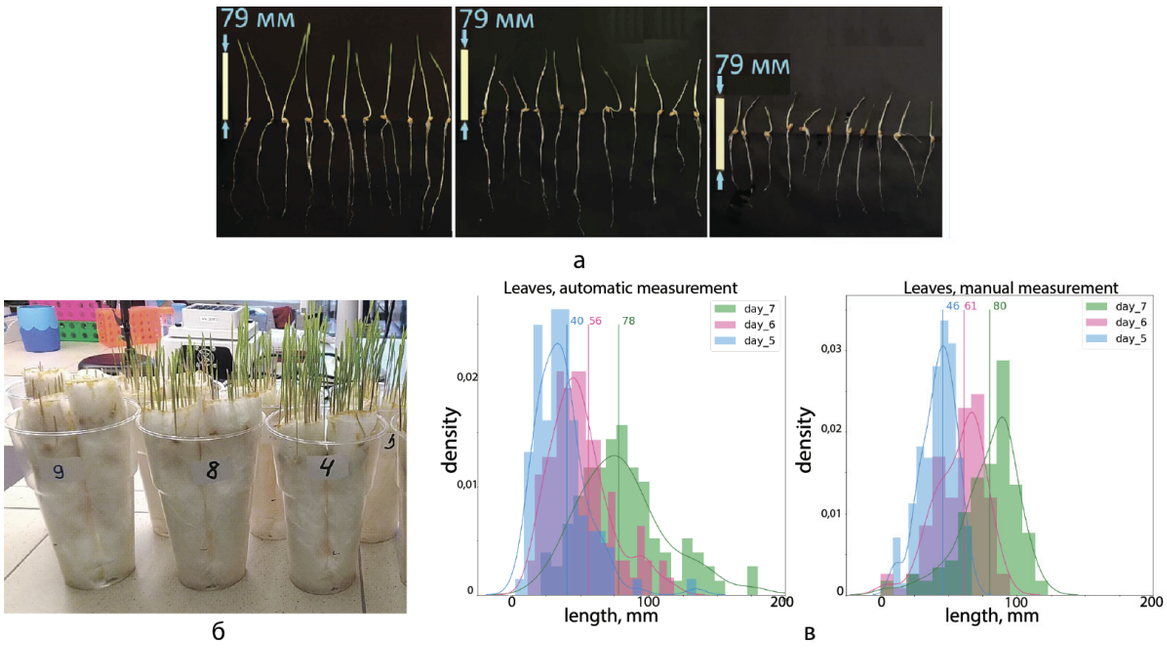


Рис. 1. Проростки пшеницы, выращенные рулонным способом (б) на 7-й, 6-й и 5-й день прорастания (а, слева направо) с результатами автоматических и ручных измерений (в).

Сравнение с результатами измерений, выполненных вручную показали, что программа корректно определяет число растений на изображении, распознает листовую и корневую части, вычисляет их длину, а также определяет значимые морфометрические отличия в выборках. В дальнейшем предполагается оптимизировать программный код и увеличить скорость его работы, чтобы использовать программу для оперативного определения влияния обработки зерна биопрепаратами на основе наночастиц и солей железа на прорастание пшеницы *Triticum aestivum L.*

СИНТЕЗ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОРОШКА $LA_{0.9}Y_{0.1}PO_4$ СО СТРУКТУРОЙ МОНАЦИТА И ИХ ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ

Еникеева М.О.[1,2]

[1]*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

Изучение механизмов образования и устойчивости фаз ортофосфатов редкоземельных элементов (РЗЭ) важно для расширения области их потенциального применения в современной технологии. Высокодисперсные материалы на основе ортофосфатов РЗЭ благодаря своим физико-химическим свойствам представляют интерес, в частности, как перспективные высокотемпературные теплоизоляторы.

В данном исследовании были получены материалы на основе твердого раствора фосфата лантана-иттрия $La_{0.9}Y_{0.1}PO_4$ со структурой монацита. Синтез предкерамического порошка проводили гидротермальным методом при T=230°C продолжительностью 110-120 минут, в результате которого был получен порошок со структурой монацита с размерами кристаллитов около 14 нм. Затем данный порошок компактировался в таблетки с общей пористостью около 50% и спекался в режиме «отжиг-закалка» в течение 20 минут при 1000-1400°C.

В результате получены компактные материалы, пористость которых не превышает 27%, размер зерна в зависимости от температуры спекания увеличивается с ~20 нм до ~100 нм. Показано, что активация процессов спекания нанопорошка и роста кристаллитов происходит в области температур 1200-1300°C, коррелирующей с температурой плавления поверхностной неавтономной фазы. Для полученных материалов определены теплофизические и механические характеристики: максимальное значение микротвёрдости H_v=17±0.5 ГПа получено для материала с пористостью 27%, значения температуропроводности для этого же материала монотонно убывают с увеличением температуры от a(T=25°C)=0.70±0.02 мм^2/с до a(T=825°C)=0.30±0.02 мм^2/с. Значения удельной теплоемкости спеченных образцов рассчитаны с использованием эмпирической зависимости Майера-Келли. Теплопроводность материалов λ(T=25°C) варьируется в зависимости от пористости в широких пределах — от 0.12±0.08 Вт·м$^{-1}$·К$^{-1}$ при P≈52% до 1.35±0.08 Вт·м$^{-1}$·К$^{-1}$ при P≈27%.

Выражаю благодарность за интерес к работе чл.-корр. В.В. Гусарову и к.х.н. О.В. Проскуриной. Данная работа поддержана грантом РНФ 21-13-00260.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ФТАЛОНИТРИЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ АЗОФЕНОКСИЛЬНЫЕ ГРУППЫ И КОМПЛЕКСЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Еремеев И.Е., Бычкова А.Н., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

В настоящее время наблюдается интенсивное изучение фталоцианинов и их комплексных соединений. Это связано с уникальностью строения данных молекул, а также с их фотохимическими и электронными свойствами. Любое изменение периферии фталоцианинового кольца может привести к изменению физико-химических свойств, в том числе и к увеличению диапазона светопоглощения. Таким образом введение на периферию остатков феноксиазокрасителей можно расширить данный диапазон. Это создает возможность использовать фталоцианины в биомедицине и фармацевтике в качестве фотосенсибилизаторов и фотоактивных веществ.

На первом этапе данной работы был синтезирован 2-фенилазо-4-бромфенол реакцией диазотирования анилина. Полученная соль диазония сразу использовалась в реакции азосочетания с 4-бромфенолом. На втором этапе путем нуклеофильного замещения нитрогруппы в 4-нитрофталонитриле на остаток 2-фенилазо-4-бромфенола был получен 4-(2'-фенилазо-4'- бромфенокси)фталонитрил. Синтезированный фталонитрил темплатной конденсацией с ацетатом магния в присутствии ДБУ при 190 °С был получен соответствующий комплекс магния (Рис. 1). Деметаллированием комплекса магния соляной кислотой был выделен соответствующий лиганд.

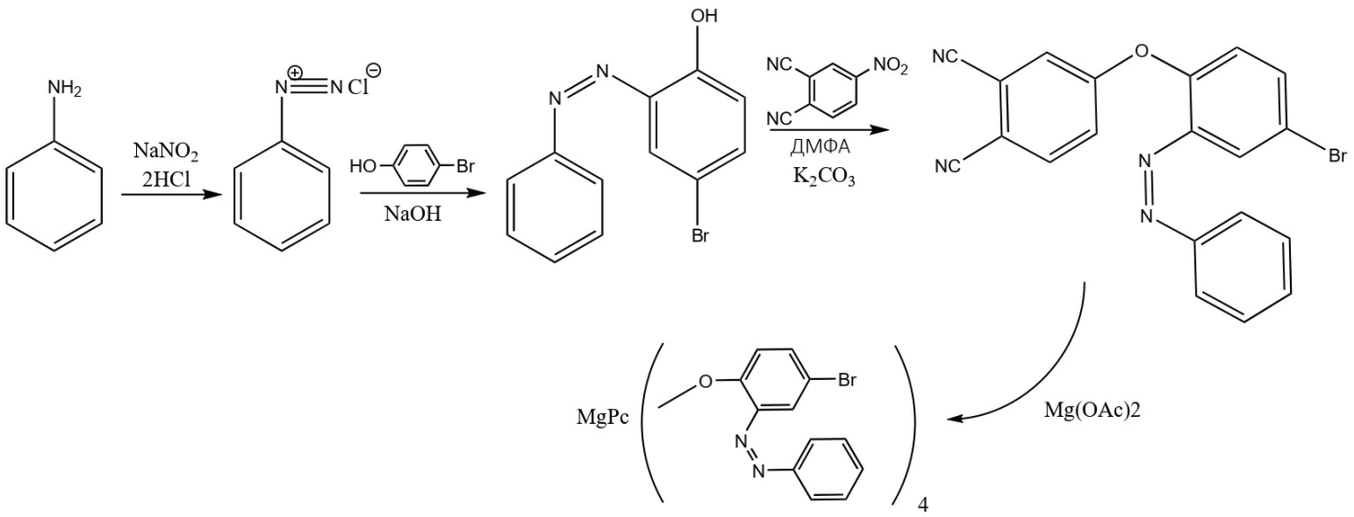


Рис. 1. Схема синтеза.

Идентификация полученных продуктов осуществляли методами электронной, ИК — спектроскопии, а также методом MALDI-TOF- спектрометрии. Изучены спектральные свойства синтезированных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонд (соглашение 22-23-00831) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНГИБИРОВАНИЯ ПЕНИЦИЛЛИН-СВЯЗЫВАЮЩЕГО БЕЛКА 2 ШТАММА 35/02 *NEISSERIA GONORRHOEAE* АНТИБИОТИКОМ ЦЕФТРИАКСОНОМ

Еремина М.Ю.[1], Кривицкая А.В.[2], Хренова М.Г.[1,2]

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия*

В последние годы отмечается быстрый рост резистентности бактерий к широко применяемым антибиотикам, что вызывает обеспокоенность в сфере здравоохранения. В частности, в клинической практике за последнее десятилетие неоднократно выявлялись устойчивые штаммы возбудителя гонореи *Neisseria gonorrhoeae* к цефалоспоринам расширенного спектра. Последние исследования устанавливают связь между резистентностью к антибиотику цефтриаксону и мутациями в гене penA, кодирующем пенициллин-связывающий белок 2 (PBP2) *N. gonorrhoeae*. Известно, что замены Ala501 на в PBP2 играют ключевую роль в формировании устойчивости. Механизмом, с помощью которого мутации придают устойчивость к цефалоспоринам расширенного спектра, предположительно связан с изменением подвижности β_3-β_4 петли PBP2. Однако в литературе по мутантам Ala501 известны только константы скорости ацилирования второго порядка (k_2/K_s). Что именно влияет на резистент-

ность: скорость ацилирования, аффинность или и то, и другое, на данный момент неизвестно. Прояснить этот вопрос можно с помощью расчетов энергетических профилей реакции ацилирования и связывания.

Целью данного исследования явилось определение механизма устойчивости фермента PBP2 штамма 35/02 *N. gonorrhoeae* к антибиотику цефтриаксону и установление факторов, влияющих на возникновение резистентности, методами молекулярного моделирования.

Методом молекулярной динамики с квантово-механическими/молекулярно-механическими потенциалами (КМ/ММ МД) проведен расчет механизма ацилирования PBP2 из штамма 35/02 цефтриаксоном, а также первая стадия реакции для четырех мутантов данного белка по Ala501. Были выбраны мутанты Ala501Val, Ala501Thr, Ala501Arg, Ala501Pro. Рассмотрено строение фермент-субстратных комплексов всех соединений. Оценены геометрические факторы, определяющие активацию цефтриаксона белком, а также выявлено наличие реакционных структур по классификации карт Лапласиана электронной плотности. Эти данные рассматривались вдоль траекторий КМ/ММ МД длиной в 5 пс. Построены энергетические профили связывания цефтриаксона с рассматриваемыми ферментами. Все профили реакций строились с помощью метода зонтичной выборки. Дополнительно были проведены расчеты классической молекулярной динамики, с длиной траектории 200 нс. Эти расчеты позволили оценить влияние мутаций на подвижность петли β_3-β_4, — наблюдается корреляция между константами скорости ацилирования второго порядка и тем, насколько далеко отодвинута петля от белка. А также сделаны выводы о влиянии подвижности петли β_3-β_4 на связывание цефтриаксона с белками и на реакцию ацилирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 18-74-10056).

МИНЕРАЛОГОРМОНАЛЬНЫЙ ПРОФИЛЬ НОВОРОЖДЕННЫХ ТЕЛЯТ С ВНУТРИУТРОБНОЙ ЗАДЕРЖКОЙ РАЗВИТИЯ

Ермилова Т.С.

Астраханский государственный университет

Внутриутробная задержка развития эмбриона и плода (ВЗРП), определяемая как несоответствие размеров формирующихся эмбрионов и плодов срокам гестации, по данным литературы регистрируется у 34,4-37,6% коров. ВЗРП оказывает негативное влияние на постнатальную адаптацию и здоровье новорожденных. Такие телята характеризуются дистопией, гипогликемией, гипоксемией, повышенной чувствительностью к переохлаждению вследствие нарушения механизмов терморегуляции и низких энергетических запасов организма. Альдостерон, являясь основным минералокортикоидным гормоном коры надпочечников у крупного рогатого скота, играет важную роль в обеспечении адаптационно-компенсаторных механизмов новорожденного.

Цель работы — сравнительное исследование концентраций альдостерона и основных электролитов (натрия, калия, магния и кальция) в сыворотке крови у телят, полученных от матерей с физиологически протекающей беременностью и ВЗРП. Обследовано 20 новорожденных симментальской породы: 10 — с ВЗРП в анамнезе и 10 с физиологическим течением беременности у матерей. Кровь у животных получали через 24 часа после рождения, утром, натощак, путем пункции яремной вены. Концентрацию альдостерона в сыворотке крови определяли методом твердофазного иммуноферментного анализа на анализаторе Униплан АИФР-01 (Россия) с использованием коммерческих наборов производства «Diagnostic Biochem Canada Inc.» (Канада), содержание натрия и калия исследовали с помощью ионоселективных электродов на анализаторе Olympus-400 («Beckman Coulter», США), кальция и магния — на атомно-адсорбционном спектрофотометре модель 703 («Perkin Elmer», США). Для оценки электролитного баланса рассчитывали натрий-калиевое, кальций-магниевое и калий-магниевое соотношения в сыворотке крови. Достоверность различий между медианами выборок определяли с помощью U-теста Манна-Уитни, взаимосвязи между показателями — по критериям Спирмена и тау-Кендалла.

У новорожденных с ВЗРП установлено пониженное содержание в сыворотке крови альдостерона (63,4±7,4 против 75,8±13,7 нмоль/л, p=0,014) и кальций-магниевого соотношения (2,91±0,26: 1 против 3,20±0,31: 1, p=0,006), повышенная концентрация натрия (184,6±12,4 против 171,0±11,7 ммоль/л, p=0,008), тенденция к гипермагниемии (1,00±0,09 против 0,92±0,11 ммоль/л, p=0,06). Однако достоверных связей между концентрацией натрия, натрий-калиевым соотношением (равно как и другими исследованными показателями водно-электролитного обмена) и уровнем альдостерона в сыворотке крови у телят мы не обнаружили. Вероятно, ренин-ангиотензин-альдостероновая система у новорожденных принимает основное участие в регуляции артериального давления и объема крови, но мало влияет на вазопрессин-зависимый водный обмен при регуляции концентрации натрия и натрий-калиевого соотношения в крови, а наблюдаемая в эксперименте гипернатриемия у новорожденных с ВЗРП носит компенсаторный характер. Пониженный уровень альдостерона у телят с ВЗРП в дальнейшем может приводить к потере натрия в почках, особенно при повышении концентрации вазопрессина и сокращении объема циркулирующей крови, что необходимо учитывать при разработке лечебно-профилактических мероприятий.

ЗАВИСИМОСТЬ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ПИТАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В РАСТИТЕЛЬНО-МИКРОБНОМ ТОПЛИВНОМ ЭЛЕМЕНТЕ

Желначева П.В.[1,2], Волкова Е.Н.[2], Кулешова Т.Э.[2]

[1]*Высшая школа технологии и энергетики*
[2]*Агрофизический научно-исследовательский институт*

В настоящее время перспективным и актуальным направлением развития «зеленой» энергетики является разработка биоэлектрохимических устройств — растительно-микробных топливных элементов (РМТЭ), которые используют в качестве энергоресурса способность бактерий окислять выделяемые растениями ризодепозиты. Теоретически рассчитанная максимальная удельная мощность таких элементов составляет 3,2 Вт/м^2, на данный момент уже удалось достичь 679 Вт/м^2 при 10-минутной поляризации и долговременного получения Вт/м^2 в течение двух недель.

Предположительно, в основе электрогенных процессов в корнеобитаемой среде наряду с работой электрохимически активных бактерий могут лежать возникающие в результате транспорта ионов концентрационные эффекты, потенциалобразующая роль которых ранее не рассматривалась. При этом компоненты питательной среды растений и их концентрации (по-видимому, также как и свойства электролита в гальваническом элементе) имеют решающую роль в выходных электрических характеристиках биоэлектрохимической системы, основанной на новой концепции использования в качестве энергоресурса электроактивных ризосферных процессов. Целью данной работы было исследование влияния состава питательного раствора на генерацию напряжения в системе корнеобитаемая среда-растения в регулируемых условиях выращивания.

Растения выращивали по технологии панопоники в условиях интенсивной светокультуры, в качестве фитотест-объекта выбран салат (*Lactuca sativa* L.) сорта Тайфун. Были исследованы следующие варианты питательного раствора Кнопа, отличающиеся увеличенной концентрацией следующих веществ: 1 — хлорида калия, 2 — дигидроортофосфата калия, 3 — сульфата магния. Полученные результаты по показателям роста и продуктивности растений салата при различных вариантах питательного раствора представлены в таблице 1.

Таблица 1. Показатели продуктивности растений салата и электрических свойств РМТЭ при различных вариантах питательного раствора ячеек РМТЭ

№	Вещество с измененной концентрацией в питательном растворе	Масса листьев, г	Высота растений, см	Масса корней, г	Среднее значение электропроводности, мСм	Среднее значение напряжения, мВ
1	хлорид калия	14,1	12	4,3	2,9	177
2	дигидроортофосфат калия	13,3	13	8,7	3,2	115
3	сульфат магния	36,5	17	12,8	3,3	250

Оптимальным по величине и стабильности из исследованных вариантов питательного раствора для создания биоэлектрохимической системы на основе электрогенных процессов в системе корнеобитаемая среда-растения был раствор Кнопа с увеличенным содержанием сульфата магния, что может указывать на его потенциалобразующую роль в РМТЭ.

СВОЙСТВА СЛОЕВ В ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ BFO/STO/AL_2O_3 ПО ДАННЫМ СПЕКТРОЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Жидель К.М.[1], Павленко А.В.[1,2]

[1]*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета*
[2]*Южный научный центр Российской академии наук*

$BiFeO_3$ (BFO) и материалы на его основе обладают E_g от 1.5 до 2.4 eV. Такие физические свойства позволяют применять их в оптоэлектронных устройствах, фотокатализаторах и фотогальванике. Показано влияние морфологии наноструктур на свойства тонких пленок BFO. Анализ морфологии поверхности и структурных параметров полученных пленок BFO необходим для установления сложности поверхности и ее практического применения. В данной работе представлены результаты исследований структуры и оптических свойств гетероструктуры $BiFeO_3/SrTiO_3/Al_2O_3$ (0001).

Предварительные исследования оптических свойств пленок и их толщин выполнялось методами спектрофотомерии и одноволновой эллипсометрии. Полученные данные были использованы как опорные для расчета дис-

персионных зависимостей показателя преломления $n(\lambda)$ эпитаксиальных слоев гетероструктуры и уточнения оптической геометрии структуры с помощью спектральной эллипсометрии. Поскольку BFO является ромбоэдрическим, его тонкие пленки можно рассматривать как изотропные из-за их смешанной доменной структуры. Нами рассматривалась следующая оптическая геометрия структуры: воздушная среда — нарушенный слой — прозрачная пленка BFO — слой STO — поглощающая подложка. Исследуемые пленки практически не имеют поглощения в спектральном диапазоне длин волн (550–900 nm), поэтому нам удалось осуществить хорошую подгонку спектральных зависимостей эллипсометрических углов $\Psi(\lambda)$ и $\Delta(\lambda)$, описывая дисперсию каждого слоя.

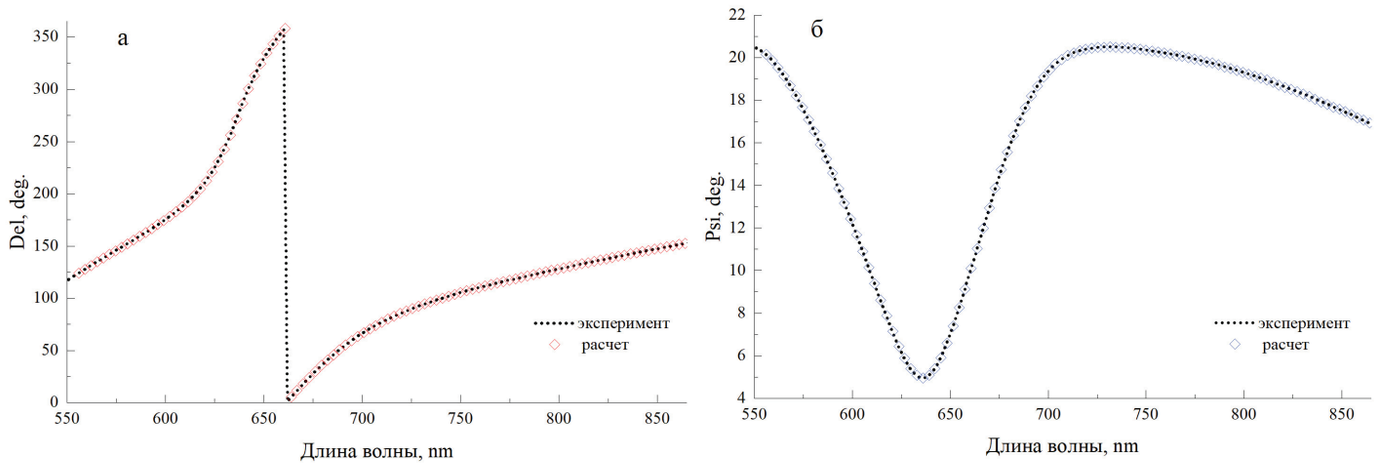


Рис. 1. Спектральные зависимости эллипсометрических углов:
а — $\Delta(\lambda)$, б — $\Psi(\lambda)$ для гетероструктуры BFO/STO/Al_2O_3.

Определены толщины и показатели преломления слоев гетероструктуры: шероховатость (18.93 nm) — пленка BFO (327 nm) — слой STO (37 nm). Представленные значения показателя преломления BFO согласуются с данными для объемного материала; $n(\lambda)$ для STO отличается от таковой для монокристалла. Предполагается, что это вызвано деформациями и искажением кристаллической структуры слоев гетероструктуры.

Использовано оборудование ЦКП «Объединенный центр научно-технологического оборудования ЮНЦ РАН (исследование, разработка, апробация)».

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БАЗ0110/20-3-07ИФ)).

ЛИПОФИЛЬНОСТЬ НОВЫХ БИОАКТИВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТИАДИАЗОЛА

Жирова Е.Д.[1], Шарапова А.В.[2]

[1] *Ивановский государственный химико-технологический университет*
[2] *Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской академии наук*

Быстрый темп развития патологий нервной системы заставляет ученых проводить поиск новых эффективных терапевтических агентов для лечения нейродегенеративных заболеваний. В качестве объектов исследования в данной работе были использованы 5 новых производных 5-амино-3-(2-аминопропил)-1,2,4-тиадиазола, обладающие нейропротекторым действием (Рис. 1.).

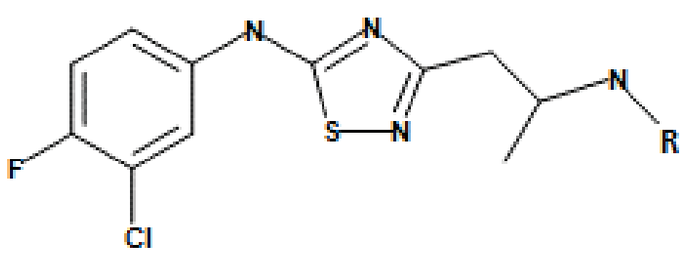


Рис. 1. Структурная формула исследованных производных 5-амино-3-(2-аминопропил)-1,2,4-тиадиазолов I — V (R: метил- (I); циклогексил- (II); циклогептил- (III); метоксифенил- (IV) и тетраметил-4-пиперидин (V)).

Ключевым физико-химическим параметром для отбора соединений-лидеров для дорогостоящих *in vivo* тестов на стадии *in vitro* является липофильность, определяющая фармакокинетическое поведение и токсилогический профиль вещества. Критерием липофильности является процесс распределения соединения в системах несмешивающихся растворителей. Данная работа посвящена изучению процессов распределения этих соединений в двухфазных системах октанол/буфер pH 7.4 и гексан/буфер pH 7.4, моделирующих липидные мембраны и гематоэнцефалический барьер.

Классическим методом изотермического насыщения получены температурные зависимости коэффициента распределения изученных веществ в системах 1-октанол/буфер pH 7.4 и гексан/буфер pH 7.4, моделирующих фосфолипидные мембраны и гематоэнцефалический барьер организма человека, соответственно. Установлено, что для производных 5-амино-3-(2-аминопропил)-1,2,4-тиадиазола в системе октанол/буфер pH 7.4 величины $\log K_{o/b}$ веществ при температуре 298 K изменяются от 1.26 до 2.70.

Согласно фармакопейным стандартам, для соединений с такими величинами коэффициентов распределения существует хороший баланс растворимости и мембранной проницаемости. Замена 1-октанола на гексан в двухфазной системе приводит к отрицательным значениям коэффициентов распределения в интервале от -0.64 до -0.10. Полученный результат объясняется тем, что в отличие от октанола гексан способен только к Ван-дер-Ваальсовым межмолекулярным взаимодействиям, что понижает растворимость веществ в этом растворителе.

ВЛИЯНИЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ НА БИОЦИДНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПРОПИЛЕНА

Жуков А.М.[1], Солодилов В.И.[1,2], Юрков Г.Ю.[2]

[1] ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия, 119991

[2] ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана (национальный исследовательский университет)», 2-я Бауманская ул., 5, стр. 1, Москва, Россия, 105005

В настоящее время, материал на основе полипропиленовых волокон востребован во многих отраслях. В частности, полипропиленовые волокна находят применение в медицинской сфере для покрытий в различных учреждениях и для производства одноразовой одежды и белья. В связи с этим, к изделиям на основе этих волокон предъявляется всё больший комплекс требований. Перспективным направлением для полипропиленовых волокон является их модификация для улучшения эксплуатационных характеристик и придания новых свойств (например, ингибирование жизнедеятельности патогенных микроорганизмов).

Одним из путей модифицирования термопластичных волокон представляется иммобилизация в волокнистом материале модифицирующих веществ, в частности, ряда металлов и их оксидов, посредством введения их в расплав волокнообразующего полимера при интенсивном перемешивании для равномерного распределения в нем наполнителя. Известно, что марганецсодержащие наночастицы обладают антимикробной активностью, но вопрос о том, сохраняется ли их способность подавлять активность патогенных микроорганизмов после того, как они введены в полимерную матрицу, оставался открытым. В таблице 1 представлены данные, показывающие способность полипропиленовых моноволокон, наполненных марганецсодержащими композитами на основе полиэтилена низкой плотности, подавлять жизнедеятельность болезнетворных микроорганизмов.

Таблица 1. Влияние концентрации марганецсодержащих наночастиц на ингибирование жизнедеятельности микроорганизмов композиционными полипропиленовыми моноволокнами

Концентрация марганецсодержащих наночастиц, мас. %	Ингибирование жизнедеятельности микроорганизмов, баллы/%		
	Escherichia coli	*Staphylococcus aurous*	*Candida albicans*
0	2/39	2/46	2/41
0,35	2/51	5/96	4/91
0,5	2/49	5/96	4/92
0,6	2/51	5/97	4/94

Результаты ингибирования жизнедеятельности микроорганизмов (табл. 1) демонстрируют, что наполненные марганецсодержащими наночастицами полипропиленовые волокна селективно воздействуют на разные патогены.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА СО СВЕРХМАЛЫМ СОДЕРЖАНИЕМ НАПОЛНИТЕЛЯ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ

Заболотнов А.С., Новокшонова Л.А.
ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН

Методом полимеризационного наполнения (полимеризации in-situ) получены композиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена с двумя различными типами анизотропных наполнителей, использующихся в промышленности в качестве сухих смазочных материалов: дисульфида молибдена и графена. Размер частиц основной фракции MoS_2 составлял 2-5 мкм, частиц графена 500 нм. Были исследованы и сопоставлены комплексы физико-механических, трибологических и износостойких свойств синтезированных композиционных материалов. Исследования производились в сравнении с коммерческим СВМПЭ, уже используемым в эндопротезах в качестве прокладки между его трущимися контрчастями.

Исследования коэффициента трения производилось по схеме шарик-диск. Движение металлического шарика было возвратно поступательным. Скорость движения и нагрузка были подобраны идентично характеристикам, которые возникают в суставе человека при его хождении со скоростью 5 км. в час. Результаты представлены на Рис.1.

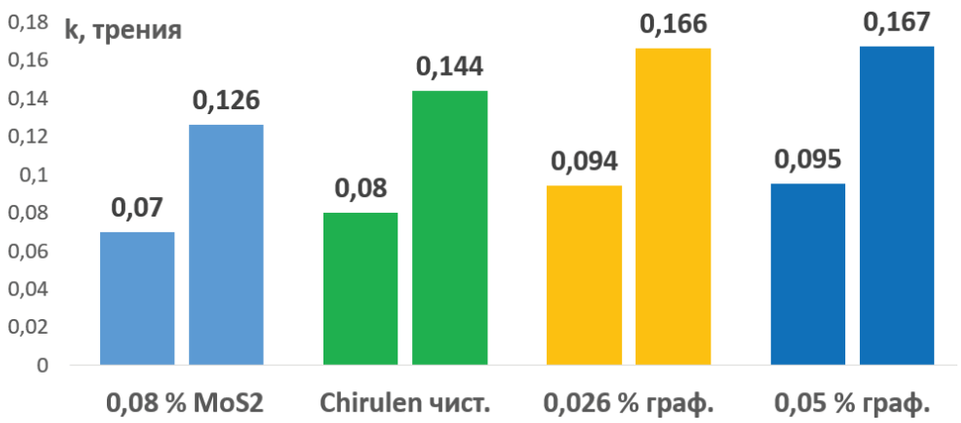


Рис. 1. Минимальное и максимальное значение коэффициента трения у исследуемых композитов. Сила 5Н, скорость 1980 мм/мин., амплитуда испытаний 10 мм., материал шарика SS440.

Наилучший результат по снижению коэффициента трения показал композит с 0,08 масс. % дисульфида молибдена. У композиционных материалов на основе графена коэффициенты трения идентичные (результат лежит в пределах погрешности), хотя содержание наполнителя в композитах различается практически в два раза.

Коэффициент трения у исследуемых композиционных материалов максимально близок к коммерческой марке СВМПЭ, а в случае с дисульфидом молибдена и превосходит его. Все синтезированные композиты были исследованы на коэффициент трения без добавления термостабилизаторов и витамина Е, чистый СВМПЭ марки Chirulen был термостабилизирован альфа-токоферолом.

Работа выполнена при поддержке компании ООО «Инженерные полимеры».
Сайт компании: UHMWPE.pro

ГИДРАЗОН ВИТАМИНА B_6 И 2-МЕТИЛ-3-ФУРОИЛКАРБОГИДРАЗИДА: СИНТЕЗ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ ZN^{2+} В РАСТВОРЕ

Завалишин М.Н., Медведева А.С., Гамов Г.А.
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Ионы Zn^{2+} играют важную роль во многих физиологических процессах. Zn^{2+} входит в состав ферментов, катализирующих образование анаболических гормонов, полимеризацию ДНК и РНК, гидролиз белков и сложных эфиров. Помимо физиологической роли, цинк широко применяется в производстве сплавов и аккумуляторных элементов, оцинковке поверхностей, полиграфии аффинаже драгоценных металлов. Соединения Zn^{2+} входят в состав готовых лекарственных форм (глазных капель, мазей, таблеток). Повышенное содержание ионов Zn^{2+} в организме и водоемах оказывает опасное воздействие на здоровье человека и окружающую среду. Поэтому разработка хемосенсоров, способных обнаруживать ионы Zn^{2+} в сточных водах и биологических образцах, представляет значительный интерес. Целью настоящей работы является синтез и определение сенсорных свойств на ионы Zn^{2+} гидразона пиридоксаль-5-фосфата и 2-метил-3-фуроилкарбогидразона (**PLP-2M3FH**).

Синтез гидразона был осуществлен в водном растворе. Идентификация полученного соединения была проведена методами ^{1}H, ^{13}C ЯМР, ИК-спектроскопии и MALDI TOF масс-спектрометрии. Гидразон **PLP-2M3FH** селективно усиливает флуоресценцию в присутствии ионов Zn^{2+} (**рис.1**) в растворе ДМСО/Tris-HCl, pH 7.4 (90:10 об. %).

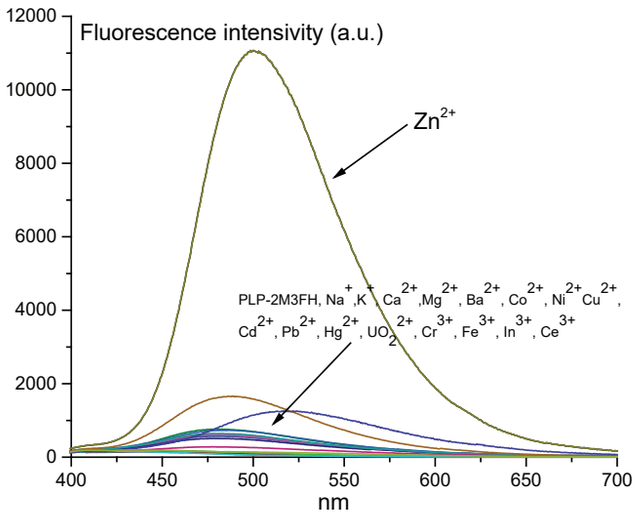


Рис. 1. Флуоресцентные спектры гидразона **PLP-2M3FH** (20 μM) с различными катионами металлов (20 μM) в растворе ДМСО/Tris-HCl, pH 7.4 (90:10 об. %).

Установлено, что ионы Ni^{2+}, Co^{2+}, Fe^{3+}, Ce^{3+} являются интерферирующими катионами для качественного определения ионов Zn^{2+} при эквимолярном содержании в образце. Предел обнаружения ионов Zn^{2+} в растворе составляет 0.018 μM. Сенсор успешно протестирован на определение ионов цинка в водных растворах и в лекарственном препарате «Цинктерал — Тева».

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FZZW-2020-0009) и совета по грантам Президента РФ (проект № СП-1556.2021.4). Использовано оборудование центра коллективного пользования ИГХТУ (при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект 075-15-2021-671).

ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ШТОБЕРА НА ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Замятина Е.А.[1], Попова Н.Р.[1], Аникина В.А.[1], Шевелёва М.П.[2]

[1]ФГБУН Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН
[2]ФГБУН Институт биологического приборостроения с опытным производством РАН

Пористые наночастицы диоксида кремния (НДК) зарекомендовали себя как перспективные и наиболее широко используемые наноносители для систем доставки терапевтических агентов. Благодаря своим физико-химическим свойствам НДК обладают рядом преимуществ в сравнении с другими типами наночастиц, такими как большая площадь поверхности, регулируемый однородный размер пор, высокая биосовместимость. Одним из наиболее оптимальных методов синтеза НДК для получения однородных монодисперсных золей наночастиц является метод Штобера. Данный метод основан на золь-гель процессе, при котором гидролиз тетраэтоксисилана (ТЭОС) происходит в присутствии катализатора аммиака (NH_3), воды и низкомолекулярных спиртов, таких как этанол, с последующей конденсацией. Данный метод синтеза дает возможности варьировать физико-химические характеристики получаемых наночастиц, что является важным критерием при их использовании в системах адресной доставки лекарств. Таким образом, актуальной задачей биомедицины представляется анализ влияния изменения параметров синтеза методом Штобера на физико-химические характеристики синтезированных НДК.

В данной работе был проведен синтез НДК с изменением параметров концентрации ТЭОС, NH_3 и температуры золя. Исследования гидродинамического радиуса и индекса полидисперсности проводили методом динамического рассеяния света с помощью системы для характеризации наночастиц Zetasizer Nano ZS (Malvern Panalytical, Великобритания).

В диапазоне концентраций ТЭОС от 0,2М до 1,2М происходило значительное увеличение размера НДК в диапазоне от 30 до 800 нм. Это может быть связано с тем, что при увеличении концентрации ТЭОС происходит повышение количества гидролизованных мономеров кремниевой кислоты, что в конечном счете влияет на увеличение размеров наночастиц. При этом при концентрациях ТЭОС, близким к 1,2М, происходит увеличение полидисперсности наночастиц.

В диапазоне концентраций NH_3 от 0,2 до 1,2М также происходило увеличение размера наночастиц, от 120 нм до 425 нм. При более высоких концентрациях NH3 образуются частично или полностью гидролизованные силанольные мономеры, что повышает степень полимеризации и увеличивает размеры наночастиц соответственно.

При повышении температуры системы от 25 до 65°С происходило увеличение скорости синтеза наночастиц. С повышением температуры происходит быстрое образование мономеров кремниевой кислоты, которое сразу достигает критических уровней насыщения, необходимого для образования затравок наночастиц. Из этого следует, что за более короткий промежуток времени образуется большое количество монодисперсных частиц малого размера. Соответственно, при контроле температурных условий время синтеза наночастиц может варьироваться от 3 до 12 часов.

Таким образом, поскольку метод Штобера дает возможность синтезировать НДК с различными физико-химическими характеристиками, необходимо планировать и контролировать параметры синтеза для достижения оптимальных параметров размера и полидисперсности наносистем.

ГЕЛЕПОДОБНЫЕ КОЛЛОИДНЫЕ ВОДНЫЕ СУСПЕНЗИИ ЧАСТИЦ ГЛИНЫ СОВМЕСТНО С ЧЕРВЕОБРАЗНЫМИ МИЦЕЛЛАМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ (ПАВ)

Захаров А.С., Молчанов В.С., Филиппова О.Е.

Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова

Гели на основе коллоидных частиц глины и вязкоупругие растворы червеобразных мицелл поверхностно-активных веществ (ПАВ) привлекают внимание исследователей благодаря способности к восстановлению свойств и структуры после разрушения и специфическим реологическим свойствам.

В промышленности подобные системы используются как загустители, которые могут повысить вязкость системы на 3-7 порядков выше вязкости воды, как и придать системе свойства упругого тела при кратковременных воздействиях или невысоких механических напряжений. Суспензии глины, например, используют в косметической и нефтедобывающей. Мицеллярные растворы также используются в косметической, лако-красочной и нефтедобывающей промышленности.

Мицеллярные цепи, образуя трехмерную пространственную сетку, придают водным растворам ПАВ вязкоупругие свойства. Вязкоупругие растворы ПАВ могут обладать вязкостью на 4-7 порядков выше вязкости воды и проявляют свойства вязкоупругого тела при кратковременных воздействиях. Поэтому особый интерес представляют длинные цилиндрические мицеллы, которые называют червеобразными мицеллами. В последние годы в литературе появились статьи, в которых показано, что мицеллярные цепи могут образовывать совместную сетку с такими частицами.

В качестве исследуемых частиц подходят наночастицы глины, которые при относительно больших концентрациях могут образовывать структуру, называемую «карточным домиком». В работе было предложено модифицировать суспензии глины добавлением мицелл ПАВ. Свойства таких сеток легко контролировать, варьируя длину и количество мицеллярных цепей.

В настоящей работе были разработаны и исследованы гелеподобные коллоидные суспензии частиц глины совместно с мицеллярными цепями. Водные суспензии глины без добавления ПАВ при концентрациях выше концентрации образования структуры «карточный домик» (из нашего исследования 1 об.%) образуют вязкоупругую суспензию с пределом текучести.

При добавлении ПАВ обнаружены условия перехода из состояния вязкоупругой жидкости в коллоидный гель. Изучены зависимости реологических параметров от концентрации ПАВ, также как и влияние экранирования в системе (зависимость от концентраций соли). Полученные гели обладают высокими модулями упругости за счет взаимодействия мицелл и глины, а также обратимо восстанавливаются после разрушения. Подобные системы ранее не были исследованы в литературе.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект 21-73-30013)

ОСОБЕННОСТИ НЕЙРОННОЙ АКТИВНОСТИ В ОБЛАСТЯХ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА, ВЫБРАННЫХ ДЛЯ УСТАНОВКИ DBS-ЭЛЕКТРОДА У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА

Захаров Н.И.[1], Белова Е.М. [1], Томский А.А.[2], Седов А.С.[1]

[1] *Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, г.Москва, Россия, icp@chph.ras.ru*

[2] *Национальный медицинский исследовательский центр нейрохирургии имени академика Н.Н. Бурденко, г. Москва, Россия*

Болезнь Паркинсона — хроническое прогрессирующее заболевание головного мозга, поражающее дофаминергические нейроны черной субстанции базальных ганглиев. Проявлениями болезни Паркинсона могут в разной степени являться следующие двигательные нарушения: тремор, гипокинезия, мышечная ригидность, постуральная неустойчивость. Поражение дофаминергических нейронов парализует передачу нейрональной информации о движении из коры головного мозга через базальные ганглии в таламус по прямому пути и активизирует вовлечение в данный процесс непрямого пути, в который включено субталамическое ядро.

На сегодняшний день одним из наиболее перспективных и успешных методов лечения болезни Паркинсона является глубокая стимуляция мозга (Deep Brain Stimulation, DBS). Результат хирургической имплантации DBS-электрода зависит от правильной его локализации. Для этого необходимо определить типы нейронов, находящиеся в области, где достигается наиболее эффективная стимуляция.

Целью данной работы является изучение активности одиночных нейронов субталамического ядра пациентов с болезнью Паркинсона для определения паттернов активности, свойственных достижению наилучшего клинического эффекта.

Исследуемые данные получены в процессе проведения операций по установке DBS-электрода пациентам с болезнью Паркинсона в субталамическом ядре. Для определения точной локализации данной структуры используют микроэлектродную регистрацию (МЭР), позволяющую исследовать активность одиночных нейронов. В процессе анализа использовались данные об активности нейронов, локализованных вдоль нескольких потенциальных траекторий проведения стимуляции, одна из которых в последствии была выбрана для установки DBS-электрода. Далее для каждого нейрона были рассчитаны параметры спайковой активности, ранее определенные коллегами из лаборатории клеточной нейрофизиологии человека ФИЦ ХФ РАН.

Сравнительный анализ нейронной активности по разным траекториям показал статистически значимое различие ($p < 0,05$) 12 из 29 параметров, среди которых число разрядов, коэффициент вариации, пачечность и пр. В рамках данного исследования показан более паузно-пачечный паттерн активности нейронов по траекториям, выбранным для стимуляции. Данный результат может в дальнейшем быть использован для выбора хирургической мишени по данным МЭР в рамках операции.

Параметры, выделенные в рамках данной работы, являются интерпретируемыми и могут быть использованы для описания особенностей функционирования субталамического ядра и уточнения моделей функционирования базальных ганглиев. Дальнейшие исследования будут уточнять и дополнять текущие результаты.

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНАЯ ФИКСАЦИЯ АЗОТА В ЛИТИЙ-АЗОТНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ

Захарченко Т.К.[1], Дернов Г.В.[2]

[1] *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова, Москва, Россия*

[2] *Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва*

Фиксация азота из атмосферы — один из актуальных вопросов химической промышленности. 90% производимого в мире аммиака получают в ходе процесса Габера- Боша из N_2 и H_2 при высоком давлении и температуре. Однако, данный процесс не отвечает современным экологическим требованиям. В настоящее время ведется поиск альтернативных способов получения аммиака и его производных из молекулярного азота. Одним из перспективных направлений является электрохимическое восстановление азота.

Наибольшее внимание на данный момент уделяется исследованию реакции восстановления азота (РВА) в водном электролите, однако из-за близости равновесных потенциалов восстановления азота и выделения водорода из воды, а также низкой растворимости азота в воде кулоновская эффективность этого процесса редко превышает 10% даже в присутствии катализатора. Использование апротонных электролитов позволяет существенно повысить кулоновскую эффективность РВА, а при использовании в качестве отрицательного электрода активного металла РВА протекает самопроизвольно, т.е. такая электрохимическая ячейка -ХИТ. За последние несколько лет в литературе были продемонстрированы такие ХИТ на основе Li, Na, Al. Их кулоновская эф-

фективность восстановления азота составила 59, 26, 51%, соответственно. Основным продуктов разряда таких ХИТ являются нитриды соответствующих металлов. Однако представленные выше результаты основываются на единичных экспериментах, а систематическое исследование влияния состава электролита на процесс РВА в апротонных растворителях отсутствует.

В рамках данной работы были протестированы литий-азотные ячейки с электролитом на основе $LiClO_4$ и трифлата лития в ряде апротонных растворителей — димтеилсульфоксиде, пропиленкарбонате, моноглиме, диглиме, тетраглиме. В качестве положительного электрода использовались углеродные бумаги марок TGP-H-90 (Toray) и #4412 (SIGRACET), а также никелевая пена.

Было обнаружено, что в отличии от литературных данных в схожих с ними условиях разрядная емкость модельных ячеек в атмосфере аргона и азота ни в одной из вышеперечисленных систем растворитель-соль-электрод не отличается. На положительном электроде после разряда продукты восстановления азота обнаружены не были. Введение катализатора реакции восстановления азота α-MnO_2, который показал свою эффективность в работе Na-N_2 ячейки, а также катализатора на основе наноструктурированного железа не привел к отличиям в электрохимическом отклике ячейки в атмосфере аргона и азота. Таким образом, было установлено, что в стандартных литийсодержащих электролитах РВА не протекает и, по-видимому, требуется создавать дополнительные условия для эффективной фиксации азота такие как высокоактивный катализатор или высокое давление молекулярного азота.

Также была исследована реакционная способность предполагаемого продукта разряда — Li_3N с растворителями электролита методами ИК-Фурье спектроскопии и рентгеновской дифракции. Было обнаружено, что глимы с различной длиной цепи химически устойчивы к нитриду лития.

Работа выполнена при поддержке Гранта президента РФ для молодых кандидатов наук (МК-3153.2021.1.3)

ВЛИЯНИЕ РН И ИОННОГО СОСТАВА СРЕДЫ НА РЕАКЦИИ ПРИРОДНЫХ ТИОЛОВ

Зинатуллина К.М.[1], Орехова А.В.[1], Касаикина О.Т.[1],
Храмеева Н.П.[2], Потапова Н.В.[1], Плащина И.Г.[2]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия*

Для гомеостаза крайне важно поддержание относительного постоянства объема, состава и pH жидких сред организма. В регуляции кислотно-щелочного баланса в организме играют важную роль биогенные ионы Na^+ и K^+. Они также участвуют в комплексообразовании с биомолекулами, тем самым влияя на их конформацию или функции. Окислительно-восстановительные характеристики внутриклеточной среды зависят от наличия эндогенного тиола глутатиона (GSH), который присутствует во всех тканях и биологических жидкостях в миллимольной концентрации. Для повышения уровня GSH в организме в качестве лекарственного препарата используют синтетический тиол *N*-ацетилцистеин (ASH).

Редокс пара GSH / GSSG и H_2O_2 занимают центральное место в определении окислительно-восстановительного гомеостаза и передаче внутриклеточных сигналов. Непосредственное взаимодействие GSH и H_2O_2 протекает стехиометрически по брутто-уравнению: 2 GSH + H_2O_2 → GSSG + 2 H_2O. Обычно эту реакцию исследуют в буферных средах, в условиях приближенных к природным процессам. Реакция GSH с H_2O_2 в деионизированной воде протекает через стадии образования комплексов и радикалов, скорость образования которых невелика, ~ 1% от скорости расходования GSH (W_{GSH}), а образующиеся тиильные радикалы инициируют тиол-ен реакции с ненасыщенными соединениями.

В данной работе исследовано влияние pH среды и отдельных катионов (Na^+, K^+ и ацетилхолина (ACh^+)) на кинетические характеристики реакции GSH и ASH с H_2O_2, а также на тиол-ен реакцию GSH с ресвератролом (RVT) в присутствии H_2O_2. В деионизированной воде RVT в этой реакции расходуется по радикально-цепному механизму со скоростью, соответствующей уравнению: $W_{RVT} = W_i + a[RVT]W_i^{0,5}$. При pH > 7 в реакции GSH с H_2O_2 радикалы не образуются и, следовательно, не инициируют тиол-ен реакцию GSH с RVT. В диапазоне физиологических pH 6,8–7,4 скорость реакции тиолов (TSH) с H_2O_2 описывается экспоненциальной зависимостью $\lg W_{TSH} = \text{const} + \text{pH}$.

Биогенные катионы увеличивают скорость инициирования радикалов (W_i) в реакции GSH с H_2O_2 в ряду: K^+ < вода < Na^+ < ACh^+. Нейромедиатор ацетилхолин хлорид образует комплексы с GSH в воде, что, вероятно, увеличивает скорость расходования GSH и выход радикалов в реакции с H_2O_2. Обнаружено, что катионы K^+ и Na^+ по-разному влияют на редокс-пары GSH–H_2O_2 и ASH–H_2O_2 в фосфатных буферных растворах (pH 7,35): при окислении глутатиона скорость реакции в К-фосфатном буфере в 2,5 раза выше, чем в Na-фосфатном буфере, тогда как в случае ASH скорости окисления ниже и различия менее выражены.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №20-03-00753.

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОГО САМОСОБИРАЮЩЕГОСЯ ПЕПТИДА, НЕСУЩИХ АНТИГЕНЫ ВИРУСА ГРИППА А

Зыкова А.А., Блохина Е.А., Куприянов В.В., Равин Н.В.

Институт биоинженерии, ФИЦ Биотехнологии РАН

Рекомбинантные вакцины основаны на использовании отдельных белков патогенов, что требует правильного выбора антигена-мишени. Для вируса гриппа перспективными антигенными белками-мишенями могут быть консервативный внеклеточный домен трансмембранного белка M2 (M2e пептид), участок второй субъединицы гемагглютинина (HA2) и фрагменты нуклеопротеина (NP). Консервативные пептиды этих антигенов слабо иммуногенны, поэтому для их использования в качестве основы вакцины необходимо стимулирование их иммуногенности. Эту проблему могут решить разные способы представления антигена. Одним из них является создание «нановакцин» на основе самособирающихся в наноразмерные частицы пептидов. Такие пептиды являются удобными строительными блоками для создания широкого спектра симметричных структур. Их повторяющаяся структура позволяет представить на поверхности частицы множество копий антигена, что приводит к его эффективному распознаванию клетками иммунной системы.

В качестве самособирающегося пептида (SAP) мы использовали последовательность двух спиральных доменов: N-концевой пентамерный спиральный домен и C-концевой тримерный спиральный домен. Эти два домена олигомеризации были соединены линкером, состоящим из двух остатков глицина. Последовательность SAP содержит цистеины, которые образуют внутримолекулярные дисульфидные мостики для оптимизации контактов спиралей. Поскольку предполагается, что как N-, так и C-концевые области пептида экспонируются на поверхности образованных им наночастиц, SAP хорошо подходит для представления эпитопов, слитых с их концами. На C-конец SAP была присоединена последовательность аминокислот жесткого спирального линкера Sp, которая способствовала пространственному отделению SAP от целевых антигенов и, помимо этого, формированию более однородных по размеру частиц.

Мы получили в бактериальной системе экспрессии и охарактеризовали рекомбинантные мозаичные белки, содержащие разные антигены вируса гриппа, слитые с SAP пептидом. Были подобраны условия для сборки наночастиц в результате рефолдинга. С помощью атомно-силовой и электронной микроскопии, а также методом динамического светорассеяния (анализатор Zetasizer NanoS90, Malvern) было показано, что включение SAP пептида в гибридные белки обеспечило их сборку *in vitro* в сферические частицы размером 30-50 нм. Полученные самособирающиеся наночастицы могут быть использованы для разработки противогриппозной вакцины с широким спектром действия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 21-34-70038.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЛАКТИДА И ЭТИЛЕНОКСИДА — ПЕРСПЕКТИВНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ

Иваненко А.Д.[1,2], Пучкова Ю.А.[2], Седуш Н.Г.[2]

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*
[2]*НИЦ «Курчатовский институт»*

Линейные амфифильные блок-сополимеры способны к самоорганизации в водной среде в частицы различной морфологии, состоящие из гидрофобного ядра, в которое возможна солюбилизация гидрофобного лекарства, и гидрофильной оболочки, которая экранирует лекарственное средство от воздействия белков крови и препятствует агрегации частиц. Контроль размера, строения и состава частиц-носителей позволяет снизить нежелательные реакции организма на медикаментозное воздействие и добиться желаемой схемы высвобождения.

Основным способом получения полилактида и его сополимеров является полимеризация с раскрытием цикла с использованием катализатора 2-этилгексаноата олова. Однако примесь олова в сополимерах ограничивает их использование в области доставки лекарств. Полимеризация лактида в присутствии органического катализатора 1,8-диазабицикло[5.4.0]ундец-7-ена (DBU) является альтернативой металлоорганическому катализу. Использование DBU обеспечивает проведение контролируемого синтеза в мягких условиях с получением монодисперсных полимеров заданного строения. Экономичность, экологичность и возможность проведения контролируемого синтеза делает DBU перспективным катализатором полимеризации сложных циклических эфиров в сочетании с различными спиртовыми инициаторами, что расширяет его использование до получения полимеров с заданными молекулярными массами, архитектурой и с низким значением индекса полидисперсности, предназначенных для применения в наномедицине. Целью работы является получение двойных и тройных

блок-сополимеров D,L-лактида и этиленоксида ($mPEG_{5K}$-$P(D,L)LA_n$, $P(L)LA_n$-$PEO_{4.6K}$-$P(D,L)LA_n$), отличающихся длиной полилактидного блока, и изучение их самоорганизации в водной среде.

Органокаталитической полимеризацией с раскрытием цикла лактида были синтезированы амфифильные блок-сополимеры $mPEG_{5K}$-$P(D,L)LA_n$ и $P(D,L)LA_n$-$PEO_{4.6K}$-$P(D,L)LA_n$ с длиной P(D,L)LA-блока 15, 30 и 70 звеньев. Молекулярно-массовые характеристики полученных сополимеров были определены методом ГПХ, индексы полидисперсности не превышали 1.2. Методом ЯМР-спектроскопии была подтверждена блочная структура сополимеров и определена средняя степень полимеризации блока P(D,L)LA. Показано, что критическая концентрация агрегации снижается с увеличением длины гидрофобного P(D,L)LA блока. Методом замены растворителя были получены водные суспензии наночастиц на основе двойных и тройных блок-сополимеров. Установлено, что они являются монодисперсными и стабильными, обладают средним размером 20-30 нм и дзета-потенциалом -15±5 мВ. С помощью методов микроскопии установлено, что частицы характеризуются сферической морфологией. Такие физико-химические свойства делают их перспективными для создания наносомальных лекарственных форм адресного действия для диагностики и/или лечения различных заболеваний, прежде всего онкологических.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 18-73-10079-П).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОЗДАНИЯ НИКЕЛЕВО-ПАЛЛАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА МЕТОДОМ РЕПЛИК

Иванов В.Р., Тихонова А.А., Рябков Е.Д, Крапивко А.Л.

МИРЭА — Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва

Наноструктурированные материалы обладают уникальными химическими и физическими свойствами, благодаря чему зарекомендовали себя как хорошие катализаторы. На данный момент известно большое число методов наноструктурирования, однако в основе нашей работы лежит метод, описанный А. П. Антроповым и др. Суть электрохимического метода наноструктуририрования заключается в следующем: на алюминиевую матрицу, полученную с помощью анодирования, путем электролиза осаждается слой никеля из раствора. Затем матрица удаляется в растворе щёлочи и получается никелевая реплика, которая обладает высокой каталитической активностью. В своей работе мы дополнительно модифицировали нановорсинки никеля частичками палладия при помощи электрохимической обработки. Такой метод можно использовать для увеличения каталитической активности наноструктурированного материала.

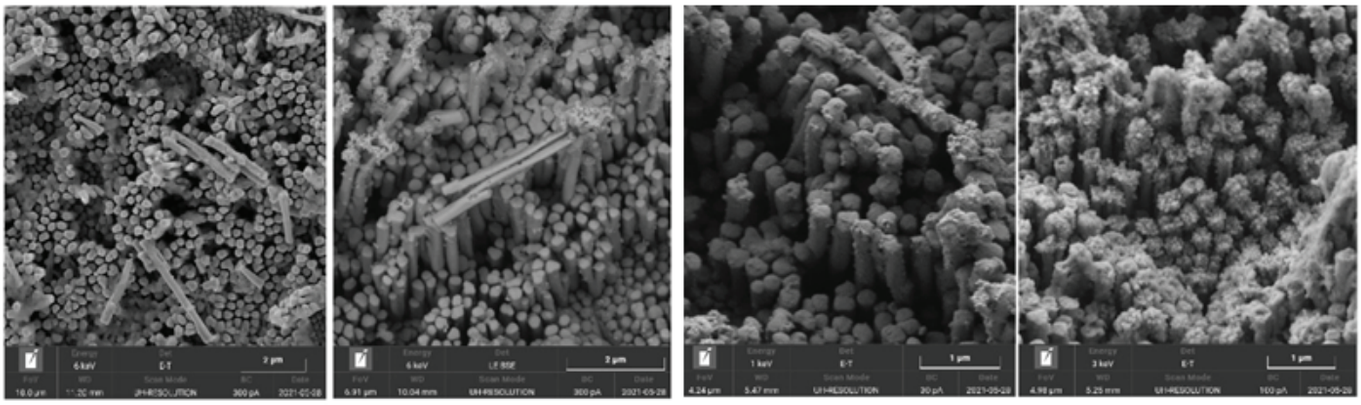


Рис. 1. Никелевые наноструктуры, модифицированные наночастицами Pd^0 в разных условиях.

В процессе выращивания на поверхности никелевых наноструктур наночастиц палладия была выявлена проблема, связанная с необходимостью создания параметрической модели. С помощью, которой стало бы возможно получить оптимально модифицированный наноструктурированный материал для дальнейших исследований его каталитических и электрокаталитических свойств.

В данной работе представлена часть параметрической модели процесса формирования наночастиц палладия на поверхности никелевых наноструктур, которая касается влияния подаваемого напряжения в электрохимическую ячейку.

МНОГОЯДЕРНЫЙ КОМПЛЕКС БРОМИДА МЕДИ(II) С АЦЕТАМИДОМ: СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА

Рукк Н.С.[1], **Иванова Т.В.[1],** Бузанов Г.А.[2], Кузьмина Л.Г.[2], Давыдова Г.А.[3], Белусь С.К.[4], Кожухова Е.И.[4]

[1]РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Россия, Москва;
[2]Институт Общей и Неорганической Химии им. Н.С. Курнакова РАН, Россия, Москва;
[3]Институт Теоретической и Экспериментальной Биофизики РАН, Россия, Московская обл., г. Пущино;
[4] Федеральное государственное унитарное предприятие «Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»» (НИЦ — «Курчатовский институт» — ИРЭА), Москва, Российская Федерация

Комплексные соединения меди(II) находят широкое применение в различных областях науки и техники во многом благодаря разнообразию их строения и формы координационных полиэдров. Интересные магнитные свойства проявляют многоядерные комплексы меди. Подобные соединения, содержащие галогенидные мостики, рассматриваются как перспективные катализаторы. Биологически активный ацетамид (АМ) и его производные используются в медицине и химическом синтезе. Известны проявляющие противоопухолевую активность комплексы ацетата меди(II) и платины(II) с ацетамидом. Описан (*Kerridge D.H., Chem Soc Rev, 1988, 17, 181-227*) синтез $CuBr_2 \cdot 4AM \cdot 2H_2O$ при взаимодействии $CuBr_2$ с ацетамидом в спиртовом растворе, однако его строение не было определено. При попытке повторить синтез для изучения структурных особенностей такого соединения, а также его биологической активности, был получен комплекс иного состава (Рис. 1). Синтез проводили в растворе при взаимодействии исходных веществ, взятых в мольном соотношении $CuBr_2$:AM = 1:2.

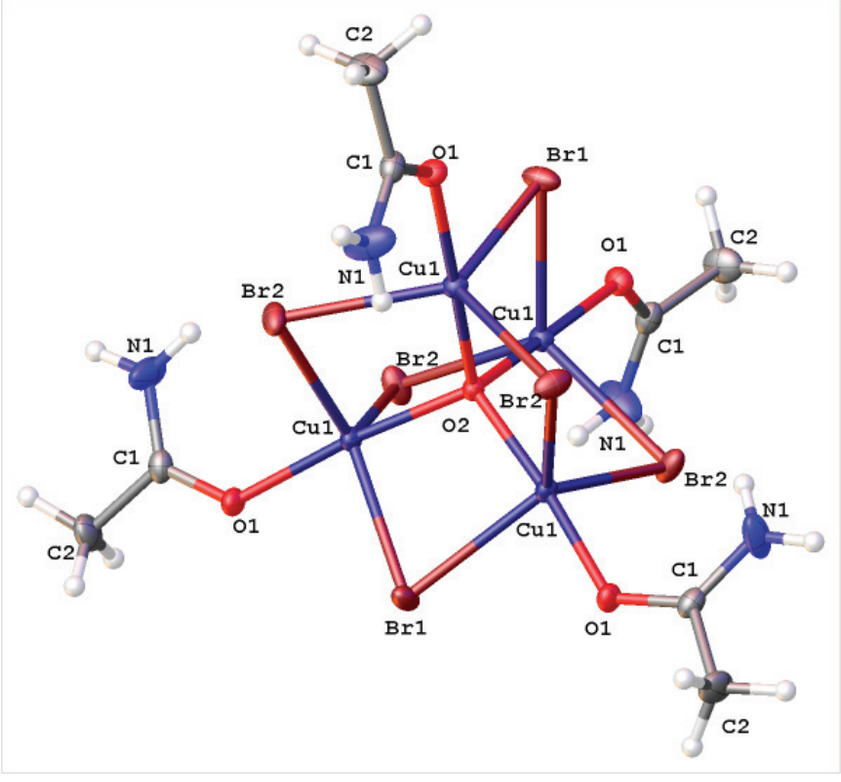


Рис. 1. Строение комплекса $[Cu_4(\mu_4\text{-}O)(\mu_2\text{-}Br)_6(AM)_4]$ (AM = ацетамид)

Для предотвращения гидролиза раствор бромида меди(II) был предварительно подкислен несколькими каплями HBr. Элементный и рентгенофазовый анализы подтвердили индивидуальность полученного соединения. На основании данных ИК-спектроскопии (смещение полосы поглощения, отвечающей валентным колебаниям ν(C=O), с 1674 $см^{-1}$ у лиганда до 1642 $см^{-1}$ у комплекса) и ESI-масс-спектрометрии была доказана координация лиганда через донорный атом кислорода и определены составы структурных фрагментов. По данным РСА, $[Cu_4(\mu_4\text{-}O)(\mu_2\text{-}Br)_6(AM)_4]$ представляет собой искаженный тетраэдр, в вершинах которого находятся атомы меди, объединенные μ_4-мостиковым атомом кислорода и μ_2-мостиковыми бромид-ионами. Каждый атом меди координирует одну молекулу лиганда через атом кислорода карбонильной группы. Результаты масс-спектрометрии свидетельствуют об образовании ряда комплексных частиц вида $[Cu(AM)_n]^+$ и согласуются с литературными данными.

НАНОЧАСТИЦЫ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ СТРУКТУР В СВЕРХВЫСОКОМ РАЗРЕШЕНИИ

Иванова А.В.[1], Абакумов М.А.[1, 2]

[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[2]Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия

Единственным методом, позволяющим получать информацию о биологических объектах и структурах на субмолекулярном уровне с нанометровым разрешением является просвечивающая электронная микроскопия. Просвечивающий электронный микроскоп в тандеме, с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией позволяют проводить элементный анализ, и рассматривать просвечивающий электронный микроскоп, как еще более информативное средство для исследования биологических объектов и структур. Цель данного проекта — разработка нового метода визуализации клеточных структур сверхвысокого разрешения путем создания высокоспецифичных зондов на основе наночастиц оксида железа с применением просвечивающей электронной микроскопии с энергодисперсионным рентгеновским анализом.

В результате проведенного исследования были получены высокоспецифичные зонды на основе наночастиц сложных оксидов железа (Fe_3O_4, $CoFe_2O_4$, $MnFe_2O_4$, $ZnFe_2O_4$). Наночастицы были получены методом термического разложения в высококипящем растворителе дибензиловом эфире, в присутствии поверхностно активных веществ — олеиновой кислоты и олеиламина. Морфологические исследования наночастиц были проведены методом просвечивающей электронной микроскопии. Методом рентгенофазового анализа была определена доменность синтезированных наночастиц. Методом атомно-эмиссионной спектроскопии (АЭС) было проведено исследование по определению количественного элементного состава синтезированных наночастиц. Помимо этого в ходе многочисленных экспериментов было установлено, что наиболее подходящими молекулами для гидрофилизации наночастиц является

3,4-дигидроксифенилуксусная кислота Дополнительное функционализация полученных наночастиц молекулами полиэтиленгликоля позволила повысить их стабильность и агрегативную устойчивость при изменении ионной силы раствора, что в свою очередь, позволило провести закрепление моноклональных антител на отдельных наночастицах без образования их агрегатов. Иммунофлуоресцентный анализ для синтезированных конъюгатов на клетках SC1 и клетках 4T1 мыши для тубулиновых микротрубочек показал, что полученный высокоспецифичный зонд специфически связывается с белком который исследуется.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-13-00438

СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ СТРУКТУР

Иванова Е.В.[1], Иванова А.В.[1], Абакумов М.А.[1, 2]

[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[2]Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия

Иммуномечение с использованием наночастиц золота (ЗНЧ) является широко используемым методом окрашивания в электронной микроскопии. Данный метод является эквивалентом метода непрямого иммунофлуоресцентного анализа, который проводится с использованием конфокального микроскопа. Поверхность частиц коллоидного золота чаще всего функционализируют вторичными антителами, которые, в свою очередь, специфичны к первичным антителам, предназначенным для связывания специфического антигена в клетке. Существенным недостатком использования ЗНЧ в качестве высокоспецифичных зондов является невозможность их применения для более чем двух сайтов связывания одновременно ввиду того, что единственным отличием будет размерный фактор. Мы предлагаем не только расширить количество сайтов связывания, которые можно детектировать единовременно, но и упростить задачу их визуализации путем использования наночастиц сложных оксидов железа (Fe_3O_4, $CoFe_2O_4$, $MnFe_2O_4$, $ZnFe_2O_4$) при проведении просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с использованием приставки с энергодисперсионным рентгеновским анализом, которая позволит получить карту распределения элементов. Благодаря полученной карте можно будет сделать вывод о распределении высокоспецифичных зондов, в составе которых присутствуют наночастицы сложных оксидов железа, на различных сайтах связывания.

Наночастицы магнетита (НЧ) были получены методом термического разложения в высококипящем растворителе дибензиловом эфире в присутствии поверхностно-активных веществ (олеиновой кислоты и олеиламина). Методом ПЭМ определен размер магнитного ядра, равный 6±1 нм. Полученные методом

термического разложения НЧ проявляют агрегативную неустойчивость в полярных растворителях. Для дальнейших исследований необходимо, чтобы НЧ были устойчивы в полярных растворителях, поэтому была осуществлена модификация НЧ 3,4-дигидроксофенилуксусной кислотой (ДОПАК). Исследования стабильности НЧ-ДОПАК методом динамического рассеяния света (ДРС) показали, что данные НЧ склонны к агрегации в натрий-фосфатном буфере, в результате была введена стадия функционализации НЧ-ДОПАК поли(этилен гликоль)2-аминоэтиловым эфиром уксусной кислоты (ПЭГ). Исследования гидродинамического размера НЧ методом ДРС проводили на каждой стадии синтеза. Ввиду высокой стабильности НЧ-ДОПАК-ПЭГ в натрий-фосфатном буфере была проведена конъюгация НЧ с флуоресцентно мечеными моноклональными антителами (МАТ) по карбодиимидному методу. Наличие МАТ в конъюгате определяли методом иммуноцитохимического анализа. Чтобы доказать наличие МАТ в составе высокоспецифичного зонда на основе НЧ, был осуществлен двойной иммунофлуоресцентный анализ, для этого была проведена предварительная конъюгация НЧ с флуоресцентным красителем Cy5.

В ходе многочисленных экспериментов был разработан высокоспецифичный зонд, в состав которого входят НЧ Fe_3O_4, модифицированные органической оболочкой (ДОПАК, ПЭГ) и функционализированные моноклональными антителами. Далее будут проведены пробоподготовка образцов и их исследование методом ПЭМ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-13-00438.

ВЛИЯНИЕ ЦИНКА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА $ZN_xCO_{3-x}O_4$

Ильин А.С.[1], Козловская К.Е.[1], Платонов В.Б.[2],
Королева А.В.[1], Мартышов М.Н.[1], Константинова Е.А.[1]

[1] *Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова*
[2] *Химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова*

Наноструктуры на основе оксида кобальта находят применение в качестве чувствительных материалов для газовых сенсоров, так как они характеризуются высокой концентрацией хемосорбированного кислорода и каталитической активностью в реакциях окисления. Одним из существенных недостатков Co_3O_4, характерным для всех оксидов металлов p-типа проводимости, является низкая проводимость материала. Для увеличения проводимости оксида необходимо легирование. В данной работе исследовались электрические свойства и дефекты $Zn_xCo_{3-x}O_4$.

В работе исследовались образцы $Zn_xCo_{3-x}O_4$, полученные методом химического осаждения оксалатов с последующим термическим разложением и методом электроспиннинга. Структурные свойства полученных оксидов $Zn_xCo_{3-x}O_4$ определяли методом сканирующей электронной микроскопии на микроскопе Carl Zeiss SUPRA 40 FE-SEM и методом рентгеновской дифракции (XRD) на дифрактометре DRON-4-07 с использованием излучения Cu Kα (λ=1.54051 Å). Удельную площадь поверхности измеряли методом низкотемпературной адсорбции азота, расчеты проводили по модели BET. Измерения проводили в одноточечном режиме на приборе Chemisorb 2750 (Micromeritics), снабженном детектором по теплопроводности. Для измерения проводимости использовался пикоамперметр Keithley 6487. Измерения проводились в гелиевом криостате замкнутого цикла ARS DE-204SE. Перед измерениями образцы отжигались при температуре T = 380 K в вакууме в течение 1,5 часов для стабилизации свойств. Измерения проводимости были выполнены в диапазоне температур 180-380 K при давлении p = 10 мбар.

Методом химического осаждения были получены нанокристаллические образцы, а методом электроспиннинга — нанонити, что было исследовано с помощью метода сканирующей микроскопии. Данные порошковой рентгеновской дифракции свидетельствуют о наличии в каждом образце единственной кристаллической фазы. ИК спектры подтвердили структуру шпинели образцов.

Проанализированы их электрические и фотоэлектрические свойства. Показано, что введение цинка сильно меняет состояние спиновых центров и электрические характеристики оксида кобальта. Проводимость материала увеличивается более чем на 5 порядков по сравнению с исходным образцом Co_3O_4. При этом на температурных зависимостях проводимости наблюдается два участка с различными энергиями активации, что может быть связано с образованием двух локализованных уровней в запрещенной зоне оксида, которые увеличивают концентрацию дырок в полупроводнике. Это может быть связано с замещением атомами цинка, являющихся двухвалентными, трехвалентных атомов кобальта. Для подтверждения данного эффекта планируется применение метода ЭПР, способного определить изменение концентрации парамагнитных атомов кобальта. Полученные результаты могут быть использованы для создания оксидов $Zn_xCo_{3-x}O_4$ с заданными электронными свойствами.

КИНЕТИКА РЕАКЦИИ РЕДОКС-МЕДИТОРА И Li_2O_2 В Li–O_2 АККУМУЛЯТОРАХ

Исаев В.В.

ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова, Москва, Россия
Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Литий-кислородные аккумуляторы (ЛКА) являются одними из наиболее перспективных химических источников тока, способных превзойти по характеристикам литий-ионные системы. Основной продукт разряда ЛКА — пероксид лития — является диэлектриком и, образуется в виде крупных частиц как на поверхности электрода, так и в объёме электролита. При заряде происходит окисление Li_2O_2, однако данный процесс сильно затруднен и приводит к большому перенапряжению и побочным реакциям. Для решения данной проблемы можно использовать редокс-медиаторы (РМ) — растворимые катализаторы процесса окисления. Такие вещества окисляются на электроде, диффундируют к поверхности Li_2O_2 и окисляют его путем химической реакции. Лимитирующей стадией данного процесса является взаимодействие окисленной формы медиатора с пероксидом лития, кинетика данной реакции определяет максимальную скорость заряда ЛКА. В связи с этим важно исследовать кинетику реакции РМ с Li_2O_2.

В качестве модельного РМ был выбран дешевый и доступный ферроцен, желтый раствор которого в ацетонитриле при окислении становится голубым. По изменению поглощения в УФ-видимом диапазоне, можно изучать кинетику желаемой реакции. Для исследования кинетики порошок Li_2O_2 был спрессован в таблетку диаметром 8 мм, данная таблетка была помещена в кварцевую кювету, в кювету залили раствор Fc^+, после чего через определенные промежутки времени регистрировались спектры поглощения, чтобы отслеживать соотношение Fc^+:Fc. На рис. 1 представлены некоторые кривые, а также спектры исходных Fc и Fc^+ (пунктиром). Видно, что со временем падает интенсивность пиков, отвечающих Fc^+ при (600 нм и 350 нм) и растет интенсивность пика Fc (450 нм). Данный факт свидетельствует о восстановлении Fc^+, предположительно, по реакции $2\ Fc^+ + Li_2O_2 = 2\ Fc + 2\ Li^+ + O_2$.

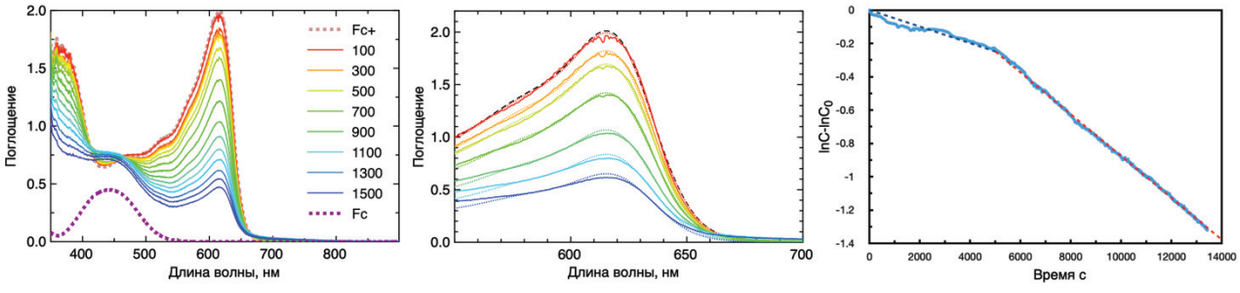


Рис. 1. а) Спектры поглощения р-ра Fc^+ над таблеткой Li_2O_2.
Точками отмечены спектры р-ров Fc и Fc^+. б) Некоторые спектры поглощения (сплошные линии) и соответствующие расчетные кривые (пунктирные линии) в) кинетическая кривая в логарифмических координатах

Некоторые спектры поглощения в области аппроксимации, а также соответствующие им расчетные кривые (пунктиром) продемонстрированы на рис. 1 б. Видно, что расчетные кривые довольно хорошо согласуются с экспериментальными данными. На рис 1 в представлена кинетическая кривая, видно два участка: более пологий в начале эксперимента и с большим наклоном — на более поздних временах. Согласно симуляции наклон второго участка зависит от константы скорости данной реакции, при этом наклон экспериментальной кривой отвечает константе около $1 \bullet 10^{-3}$ $М \bullet с^{-1} \bullet см^{-2}$.

КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПЕРХЛОРАТА МЕДИ(II) С АНТИПИРИНОМ И НИКОТИНАМИДОМ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ

Рукк Н.С.[1], **Каберник Н.С.[1],** Бузанов Г.А.[2], Кузьмина Л.Г.[2], Давыдова Г.А.[3], Фомичев И.А.[3,4], Белусь С.К.[5], Кожухова Е.И.[5]

[1] Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова МИРЭА — Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация.
[2] Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Российская Федерация
[3] Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Московская область, Российская Федерация
[4] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова биотехнологический факультет, Москва, Российская Федерация
[5] Федеральное государственное унитарное предприятие «Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»» (НИЦ — «Курчатовский институт» — ИРЭА), Москва, Российская Федерация

Целью настоящей работы является синтез и исследование комплексных соединений перхлората меди(II) с различными биологически активными лигандами как возможной альтернативы уже применяемым противоопухолевым препаратам на основе платины, которые проявляют, тем не менее, ряд побочных эффектов.

Комплексные соединения $[Cu(AP)_4(H_2O)](ClO_4)_2$ **(1)**, $[Cu(AP)_5](ClO_4)_2$ **(2)** и $[Cu(Nia)_2(H_2O)_2](ClO_4)_2 \cdot 2H_2O$ **(3)** были получены из водных растворов путем взаимодействия гексагидрата перхлората меди(II), антипирина или никотинамида, взятых в мольных соотношениях $Cu(ClO_4)_2$:L = 1:2 для **(1)** и **(3)**, 1:4 для **(1)**, 1:5 для **(2)**.

Полученные соединения идентифицированы с помощью ряда физико-химических методов анализа. В комплексных катионах **(1)** и **(2)** атом меди расположен в центре несколько искаженной квадратной пирамиды, образованной атомами кислорода четырех молекул антипирина и одной молекулы воды, находящейся в аксиальном положении для **(1)** и атомами кислорода пяти молекул антипирина для **(2).** В плоскоквадратном комплексном катионе **(3)** атомы азота пиридиновых фрагментов лиганда занимают *транс*-положение.

Цитотоксическую активность полученных соединений изучали методом МТТ на постнатальных стволовых клетках пульпы зуба человека (DPSC) и клеточной линии рака молочной железы MCF-7. Антипролиферативную активность изучали на 10 линиях раковых клеток: C6, Panc-1, U-251, IMR32, HS 578-T, BT474, HEK293, Hep-2, MNNG-HOS и SH-SY5Y, при концентрации $1 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

Цитотоксичность соединений демонстрирует дозозависимый характер для обоих типов клеток. Было обнаружено, что при концентрации $5 \cdot 10^{-5}$ моль/л цитотоксичность **(1)** несколько выше таковой для **(2)** и **(3)** (выживаемость, % от контроля: 60,72±5,65, 77,22±7,35 и 72,65±4,77, соответственно) по отношению к линии клеток MCF-7, при этом **(2)** не является токсичным по отношению к стволовым клеткам Антипролиферативная активность наиболее выражена для клеток IMR32, HS 578-T, BT474 для соединения **(1)** и C6, Panc-1, IMR32 для **(2)**, при этом соединение **(3)** практически не проявляет такой активности. Таким образом, наибольшей биологической активностью обладают комплексные соединения, имеющие объемную структуру.

ВЛИЯНИЕ БЕЛКОВОГО ОКРУЖЕНИЯ РЕТИНАЛЯ НА СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ МИКРОБИАЛЬНОГО РОДОПСИНА KR2

Казанцев С.А., Кусочек П.А., Боченкова А.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Родопсины — светочувствительные трансмембранные белки, играющие важную роль в зрительном восприятии позвоночных животных, а также в катализе фотохимических реакций в бактериальных процессах. Они включают в себя белковую часть (опсин) и протонированное основание Шиффа ретиналя. Биологическая функция родопсинов заключается во взаимодействии с электромагнитным излучением, его поглощении и инициировании фотохимических реакций. Микробиальные родопсины, способные к пассивному или активному транспорту ионов через мембрану, являются перспективными для оптогенетики. Путем встраивания в мембрану изучаемых клеток они способны вызывать деполяризацию или гиперполяризацию клеточной мембраны, что приводит к возбуждению или, наоборот, выключению рассматриваемой клетки, таким образом, позволяя контролировать активность определенных типов клеток с высоким временным и пространственным разрешением. Данное направление наиболее перспективно при использовании родопсинов, поглощающих в длинноволновом диапазоне, совпадающем с окном оптической прозрачности биологических тканей (750-1000 нм). Целью данной работы является поиск мутантных форм микробиальных родопсинов со смещенными в длинноволновую область максимумами поглощения.

В работе с помощью методов молекулярной динамики и комбинированных методов квантовой химии и молекулярной механики (КМ/ММ) проведено исследование фотофизических свойств и спектральных характеристик мутантных форм микробиального родопсина KR2 (PDB ID 6YC3), в которых проведены замены пролинового и серинового остатков P219 и S254 на треонин и аланин соответственно. Молекулярная динамика исходной структуры проводилась для физиологически активной пентамерной формы белка в липидном бислое. Дальнейшие КМ/ММ расчеты проводились для выбранного мономера. Описание квантовой подсистемы проводилось с помощью теории функционала электронной плотности в варианте PBE0/(aug)-cc-pVDZ. Классическая подсистема описывалась с использованием параметров поля AMBER. Расчет энергий вертикального возбуждения проводился в рамках расширенного варианта многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений XMCQDPT2 в сочетании с методом потенциалов эффективных фрагментов (EFP).

В работе проведен анализ конформационной подвижности боковых цепей мутированных остатков и их влияния на спектры однофотонного поглощения. Показано, что полярность аминокислотных остатков вблизи хромофорной группы родопсинов значительно влияет на положение максимума в их спектрах поглощения. Введение точечных мутаций, которые увеличивают гидрофильность и полярность окружения около β-иононового кольца и/или уменьшают эти параметры у окружения рядом с атомом азота протонированного основания Шиф-

фа ретиналя, приводит к сдвигу максимума поглощения в красную сторону. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-13-00126.

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОГЕКСИЛФЕНОКСИФТАЛОЦИАНИНОВ

Казарян К.Ю., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Производные фталоцианина (Pc) являются интересными объектами для создания новых материалов. Благодаря гибкости подходов к синтезу, физико-химические свойства фталоцианина могут быть легко модифицированы путем изменения природы металла-комплексообразователя в макроциклической полости его молекулы или введения различных периферийных заместителей. Наличие в молекуле фталоцианина объемных арилоксильных заместителей обеспечивает им хорошую растворимость в органических растворителях, тем самым облегчая процесс выделения и очистки целевых продуктов. Присутствие таких групп приводит к снижению агрегации, проявлению сенсорных, флуоресцентных и других полезных свойств, что позволяет расширить области применения данных соединений.

В данной работе представлены данные по синтезу и спектральным свойствам металлокомплексов с d и f- металлами, содержащими циклогексилфеноксигруппы.

Синтез металлокомплексов с d — металлом (Zn) проводили темплатной конденсацией из соответствующих замещенных фталонитрилов с ацетатом цинка методом сплавления при температуре 190 оС. Получение металлокомплексов с f-металлами (Nd) осуществляли также темплатной конденсацией с ацетатом неодима, но процесс проводили в растворе (изо-амиловый спирт) при температуре кипения спирта в присутствии ДБУ.

Все полученные комплексы были очищены с привлечением хроматографии. Строение полученных соединений подтверждали MALDI-TOF масс-спектрометрией, ИК, ЯМР и электронной спектроскопией.

Полученные фталоцианины — порошкообразные вещества сине-зеленого цвета, обладающие хорошей растворимостью в органических растворителях (ацетон, хлороформ, ДМФА).

Изучены спектральные свойства синтезированных комплексов в различных растворителях. Показано влияние места заместителя и растворителя на положение основной полосы и характер спектра. Для сэндвичевых комплексом зафиксированы электронные спектры поглощения для нейтрально-радикальной и восстановленной форм, определены условия для перехода комплекса в ту или иную форму.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант №17-73-20017) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ КЛАССИЧЕСКОГО ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАСТВОРИМОСТИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ФЛЮИДЕ

Каликин Н.Н.[1], Будков Ю.А.[1,2], Колесников А.Л.[3],
Ивлев Д.В.[1], Крестьянинов М.А.[1], Опарин Р.Д.[1], Киселев М.Г.[1]

[1]*Институт Химии Растворов РАН им. Г.А. Крестова, Россия*
[2]*Московский Институт Электроники и Математики им. А.Н. Тихонова, Национальный Исследовательский Университет Высшая Школа Экономики, Россия*
[3]*Institut für Nichtklassische Chemie e.V., Германия*

Основываясь на статистических методах теории жидкости был разработан подход для расчета свободной энергии сольватации молекул лекарственных соединений в сверхкритическом флюиде. Было обнаружено, что фазовое поведение сверхкритического диоксида углерода с достаточной для инженерных приложений точностью описывается предложенной моделью, в основе которой лежит применение теории классического функционала плотности к базисной модели твердых сфер в рамках теории Я. Розенфельда (FMT) с использованием подхода Викса-Чандлера-Андерсона для разделения Леннард-Джонсовского потенциала межчастичных парных взаимодействий. Входными параметрами модели являются параметры потенциала Леннард-Джонса, определяемые фитированием критических точек растворителя и растворяемого соедине-

ния. На основе полученного согласия был сделан вывод о разумности использования подобного «грубоструктурного» подхода в качестве альтернативы полноатомным компьютерным экспериментам и использованию уравнений состояния для расчета растворимости соединений в сверхкритическом флюиде, используя вычисленные значения свободной энергии сольватации. Проведенные для ряда лекарственных соединений расчеты предложенным методом в области параметров состояния, используемых при проведении экспериментов по сверхкритическим сокристаллизации и микронизации, продемонстрировали хорошее согласие с имеющимися в литературе экспериментальными данными по растворимости. Помимо этого, при проведении расчетов при помощи разработанной модели была выявлена отличная от принятой в литературе закономерность поведения области, на границе которой меняется знак производной растворимости от температуры при фиксированном давлении.

СОЛЬВАТОХРОМНЫЙ ЭФФЕКТ В РАСТВОРАХ АНТОЦИАНОВ: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ АНТОЦИАНА И СВОЙСТВ РАСТВОРИТЕЛЯ

Калиникин Д.А.

НФГАОУ ВО НИУ «БелГУ», г. Белгород, Россия

Антоцианы — это флавоноиды, содержащиеся в большинстве растений, имеющих красную, синюю или оранжевую окраски. В растениях антоцианы выполняют защитную функцию — предотвращают повреждение фотолабильных молекул избыточным светом.

Антоцианы являются сильными антиоксидантами, способствующими снижению свободных радикалов в организме человека, которые, в свою очередь, ускоряют процесс старения. Этим свойством и вызван высокий интерес к антоцианам.

Для выделения антоцианов из растений традиционно используют метод мацерации в слое экстрагента: соляная кислота, метанол. Наиболее благоприятным условием экстракции антоцианов является низкое значение pH, в этом случае агликоновая антоцианидиновая часть антоциана существует в форме флавилиевой соли.

В данной работе были исследованы экстракты капусты с соляной кислотой, ацетоном и этиленгликолем. Экстракция проводилась при двух разных температурах: 13 и 23 °C. Были определены энергии активаций, скорости и порядки реакций разложения антоцианов.

Экстракт в соляной кислоте при комнатной температуре показал хорошую сохранность во времени, нежели чем этот же экстракт при температуре 13 °C. Реакция протекает по пути псевдонулевого порядка.

Превращения антоцианов в ацетоне интересны тем, что при комнатной температуре в растворе протекает реакция псевдопервого порядка, а при 13 °C протекает реакция псевдовторого порядка.Экстракт в ацетоне показал высокую степень распада антоцианов. Ацетон не следует применять на практике для экстракции антоцианов.

В этиленгликоле антоцианы ведут себя аналогично по отношению к соляной кислоте несмотря на то, что pH экстракта с этиленгликолем близок к 7, а pH экстракта с соляной кислотой равен приблизительно 2. Реакция идёт по пути псевдонулевого порядка. Экстракт в этиленгликоле при комнатной температуре может хорошо сохраняться долгое время несмотря на нейтральную реакцию среды, что делает его потенциально возможным экстрагентом антоцианов на практике. Этот же экстракт со временем постепенно разрушается.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ЛАКТИДА МЕТОДОМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ

Калинин К.Т.[1,2], Седуш Н.Г.[1,2], Чвалун С.Н.[1,2]

[1]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*
[2]*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН*

Одним из наиболее активных и широко используемых катализаторов для синтеза полилактида является октоат олова. Однако примеси олова в материале биомедицинского назначения могут вызвать токсический эффект. Поэтому актуальной задачей является поиск новых высокоактивных биосовместимых катализаторов и инициаторов. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии исследовали кинетические закономерности полимеризации D,L-лактида под действием ацетилацетоната циркония в изотермическом режиме в интервале температур 160 — 220 °C и концентрации инициатора 250 — 1000 ppm. Построили кинетические кривые (рис. 1а) полимеризации и определили влияние условий синтеза на молекулярно-массовые характеристики синтезируемого полимера. Снижение концентрации катализатора с 1000 до 250 ppm приводит к увеличению средневесовой молекулярной массы полимера от 30 до 190 кДа.

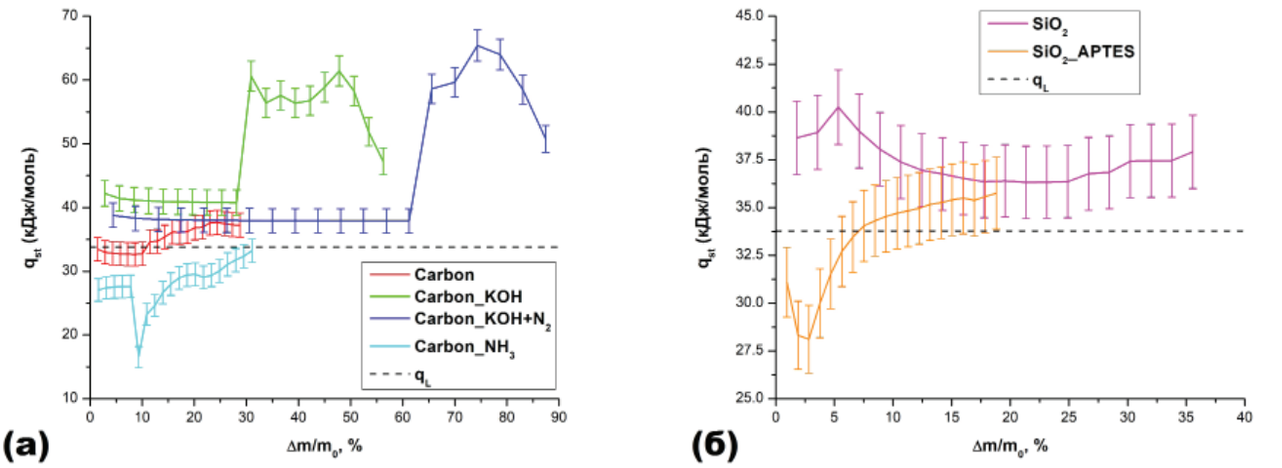


Рис.1. Кривые ДСК полимеризации лактида под действием ацетилацетоната циркония в изотермическом (а) и динамическом (б) режимах.

В динамическом режиме получили термограммы полимеризации и D,L-лактида (рис. 1б) в интервале температур от 30 до 240 °С со скоростью нагрева от 2 до 40 °С/мин. Энтальпию полимеризации для 100% конверсии ($\Delta H_{\alpha=100}$ = 16.0 ± 0.5 кДж/моль для полимеризации и D,L-лактида) определили интегрированием теплового эффекта реакции.

С применением метода Kissenger'a определили значения энергии активации и предэкспоненциального члена: E_a = 67 ± 3 кДж/моль, ln*A*= 17,4 ± 0,7 для полимеризации D,L-лактида. Значение энергии активации рассчитали с применением изоконверсионного метода Ozawa-Flynn-Wall, построив зависимости в спрямляющих координатах с шагом конверсии 10 % которое составило для полимеризации D,L-лактида E_a = 71 ± 1 кДж/моль. Таким образом, ацетилацетонат циркония позволяет синтезировать высокомолекулярный полимер за короткое время и является перспективной заменой октоату олова.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации, в рамках проектной части государственного задания (тема № FFSM-2022-0001).

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА ДВУХСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ

Каплун М.В., Аникина Е.В.

Южно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, Россия

В настоящее время водородная энергетика актуальная и широко исследуемая тема, ведь водород является экологически чистым источником энергии. Актуальность обсуждения данной темы исходит из проблем использования такого источника энергии, в частности транспортировка и хранение водорода. Существуют несколько видов водородных хранилищ, основанных на разных подходах в хранении водорода, одним из них является сорбция водорода различными материалами, в том числе углеродными наноматериалами.

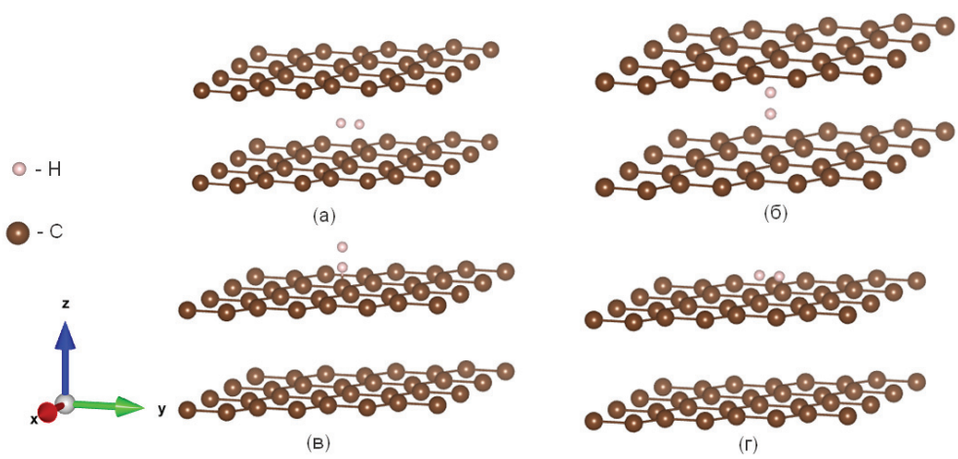


Рис. 1. Исследуемая система с молекулой водорода расположенной между слоями графена и ориентированной параллельно и перпендикулярно их плоскости — (а) и (б), соответственно; (в) и (г) — система с молекулой водорода расположенной на поверхности двухслойного графена и ориентированной перпендикулярно и параллельно его плоскости, соответственно.

В данной работе исследовалась способность сорбции водорода двухслойным графеном (BLG). Расчеты проводились на основе теории функционала плотности с использованием программного пакета SIESTA, базисный набор которого реализован в качестве псевдоатомных орбиталей. Система состояла из двух слоев углерода (по 32 атома на каждый слой) и молекулы водорода. Рассматривались две структуры двухслойного графена: AA- и AB-структура, а также исследовалось положение молекулы водорода как между слоями графена, так и на поверхности BLG. Для каждого положения изучалось параллельное и перпендикулярное расположение молекулы водорода относительно плоскости слоев графена (Рис. 1).

В ходе исследования для каждого типа системы отслеживалась длина связи молекулы водорода и полная энергия систем, а также рассчитывалась энергия связи с учетом поправок Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора.

Исследование поддержано грантом «Поддержка молодой науки — 2021» и с использованием вычислительных ресурсов Южно-Уральского государственного университета.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОЗОЛЕЙ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ГИДРОПОНИКИ МИКРОЗЕЛЕНИ

Катаев В.С., Федотов М.А., Алпатов А.А.

Институт металлургии и материаловедения имени А.А.Байкова РАН, г.Москва

Получение наночастиц методом лазерной абляции является перспективным физическим методом, позволяющим получать химически чистые продукты без примесей, варьировать размеры получаемых частиц за счет длительности излучения, получать агрегаты и кластеры из наночастиц.

Лазерная абляция широко используется для получения коллоидных растворов на основе наночастиц облучаемого материала.

В результате воздействия лазерного импульса с поверхностью облучаемой мишени, находящейся в жидкой среде (дистиллированная или деионизированная вода) происходит микровзрыв с образованием кратера на поверхности облучаемого образца и последующим выбросом наночастиц. Получаемые таким образом гидрозоли находят широкое применение, как питательная биодобавка (микроэлемент) для растений, позволяющая стимулировать дальнейший рост и развитие выращиваемой агрокультуры.

В настоящий момент идет активное исследование возможности создания и использования комплекса гидрозолей оксидов металлов Fe, Cu, Zn, Mn, Co, Ag для получения универсального питательного раствора, который будет содержать все необходимые микро- и макроэлементы для использования в гидропонных установках, позволяющих выращивать растения в экстремальных условиях и без использования почвы.

Промежуточные результаты исследования влияния гидрозолей оксидов металлов на 50 семян пшеницы «Витграсс» представлены в таблице 1.

Таблица 1. Выращивание семян пшеницы Витграсс с использованием коллоидных растворов Fe, Zn, Cu, Ag

Хим.элемент	Концентрация раствора, мг/л	Всхожесть семян, %	Масса проростков, г	Масса корней, г	Средняя длина ростков, см
Fe	1	84	1,93	3,1	7,5
Zn	10	76	2,13	3,61	8,4
Cu	1	82	2,53	2,75	9,1
Ag	0,1	78	1,76	2,53	7,9
H_2O	-	80	0,79	2,35	4,1

На основе метода лазерной абляции были получены коллоидные растворы металлов Fe, Zn, Ag, Cu. Была исследована стабильность и распределение по размерам агрегатов частиц методами электрофоретического рассеяния света.

Проведен рентгенофазовый анализ на основе, которого было определено, что в результате абляции в жидкости образуются оксиды металлов и получены микроснимки, показывающие морфологические особенности образовавшихся наночастиц и их кластеров. Полученные коллоидные растворы были использованы в качестве источников микроэлементов в разработанном жидком питательном NPK-удобрении, который позволил увеличить прирост зеленой массы на 80%.

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ И ВНЕШНИХ ВОЗМУЩЕНИЙ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ. DFT РАСЧЕТЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ

Квашнин Д.Г.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

Область низкоразмерных наноматериалов — новый раздел современного материаловедения. Успешный синтез графена привел к возможности создания широкого спектра двумерных материалов различного состава с огромным разнообразием уникальных свойств. Большой интерес вызывает формирование новых двумерных материалов со структурой и свойствами, не имеющими аналогов в 3D, таких как силицен (двумерный кремний), борофен (монослой атомов бора), CuO, Fe, FeO , CoC с уникальной двумерной кристаллической структурой и др. Теоретическое материаловедение низкоразмерных наноструктур представляется весьма актуальной и востребованной из-за общемировой тенденции к миниатюризации электронных устройств и их составных компонентов. Важно, что снижение размерности материалов неизбежно приведет к изменению их физико-химических свойств, что может значительно расширить области потенциального применения двумерных материалов известных составов и открыть новые классы ранее неизученных двумерных материалов с уникальной кристаллической структурой и свойствами. Помимо двумерных наноматериалов, огромным интересом пользуются исследование одномерных наноструктур, таких как нанопровода и нанотрубки. Благодаря особенностям атомной структуре такие нанообъекты способны демонстрировать уникальные электронные и оптические свойства в совокупности с превосходными механическими характеристиками. Так, был показан высокий коэффициент электро-опто механического отклика нанопроводов состава CdS, ZnS, а также гибридных нанопроводов типа «ядро-оболочка» состава Ge-Si. Представленный набор физико-химических свойств делает такие объекты перспективным материалов для создания элементов гибкой и нательной электроники с высоким коэффициентом чувствительности. Кроме нанопроводов было проведено исследование возможности создания перехода металл-полупроводник-металл посредством изменения атомной структуры одностенной углеродной нанотрубки посредством нагрева и приложения механического напряжения к концам трубки, что приводило к испарению углеродных димеров, образованию дефектов, и, как следствие, локальному изменению диаметра нанотрубки. На базе получившейся гибридной структуры был сконструирован транзистор. С помощью методов компьютерного моделирования был предсказан эффект квантовой интерференции внутри более узкого перешейка. Полученные результаты открывают новый путь получения более мощных транзисторов нового поколения на одной углеродной нанотрубке. Результаты исследования были опубликованы в журнале Science в 2021 году.

В данном докладе будут представлены результаты комплексного исследования изменения электронных, оптических и структурных свойств низкоразмерных наноматериалов посредством внедрения точечных дефектов, примесных атомов, а также внешних воздействий, таких как температура и механические деформации.

ФОРМИРОВАНИЕ ИМИТИРУЮЩЕГО УРАН-ПЛУТОНИЕВОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТАБИЛЬНОГО ЦЕРИЯ ДЛЯ ОТРАБОТКИ МЕТОДОВ ЛАЗЕРНОЙ ДЕЗАКТИВАЦИИ

Ким С.Д.[1, 2], Пеганов Е.А.[1,2], Щербаков К.А.[1], Шитова Е.С.[1]

[1]*АО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», г. Москва*

[2]*НИТУ МИСиС, г. Москва*

Одним из важнейших этапов при выводе из эксплуатации ядерно- и радиационно опасных объектов является выполнение операций по дезактивации поверхностей с радиоактивным загрязнением. Лазерная дезактивация благодаря своей универсальности, управляемости и эффективности является одним из самых перспективных и широко развивающихся методов, вследствие чего на сегодняшний день использованию лазерных систем в атомной отрасли для проведения работ по поверхностной дезактивации уделяется все большее внимание.

Отработка методов лазерной дезактивации предполагает использование дорогостоящего лабораторного оборудования, которое в процессе исследований может быть подвержено радиоактивному загрязнению. С целью предотвращения загрязнения оборудования возникает необходимость в поиске альтернативных способов исследования метода, одним из которых является создание модельных образцов со стабильными имитаторами загрязнения.

Цель настоящей работы состоит в отработке методики приготовления металлических образцов-имитаторов U-Pu загрязнения с применением стабильного Ce на поверхности нержавеющей стали.

Подготовка образцов проводилась в три этапа: подготовка поверхности, выдержка в растворе солей соответствующих имитаторов или нанесение тонкого слоя данных растворов с последующей сушкой и термическая

обработка. Полученные образцы были исследованы методами оптической и электронной микроскопии, химический состав поверхности определялся методом рентгенофлуоресцентного анализа. В работе проведено сравнение рассматриваемых методов подготовки с целью формирования наиболее подходящих для дальнейших исследований модельных образцов. Также в работе представлены некоторые результаты лазерной очистки данных образцов с использованием лабораторных лазерных стендов.

ПОЛИПРОПИЛЕНОВЫЕ НИТИ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

Кириллов В.Е.

ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия, 119991

Представленная работа посвящена получению и изучению полипропиленовых моноволокон, модифицированных марганецсодержащими нанокомпозитами на основе полиэтилена низкой плотности (ПЭНП) и полиэтилена высокой плотности (ПЭВП), анализу причин различного воздействия на свойства полипропиленовой нити добавок малых количеств ПЭНП и ПЭВП, а также изучению структуры марганецсодержащих наночастиц. Определено влияние малых количеств полиэтилена низкой плотности, полиэтилена высокой плотности и инкапсулированных наночастиц оксида марганца на механические свойства и структуру полипропиленовых моноволокон. Показано, что введение в полипропилен малых количеств полиэтилена низкой плотности способствует повышению степени кристалличности полимерной смеси и снижению размера кристаллитов. Продемонстрировано, что прочность и равномерность структуры моноволокон, сформованных из смеси полиолефинов, не ухудшаются. Разработана технология создания комплексных нитей на основе полипропилена с введенным в нее в качестве наполнителя композиционного материала на основе полиэтилена низкой плотности и марганецсодержащих наночастиц. Проведены комплексные исследования структуры и свойств марганецсодержащих наночастиц, локализованных в объеме полиэтилена низкой плотности. Установлено, что полипропиленовые нити, наполненные марганецсодержащими нанокомпозитами на основе полиэтилена низкой плотности, обладают набором улучшенных характеристик: возрастает прочность при растяжении, снижается поверхностное электрическое сопротивление.



Рис. 1. Внешний вид ПП филамента (а), и филамента наполненного марганецсодержащим нанокомпозитом:
б) метод оптической микроскопии (увеличение 400 раз);
в) метод сканирующей электронной микроскопии (увеличение 370 раз).

ФТАЛОЦИАНИН ПАЛЛАДИЯ, ИММОБИЛИЗОВАННЫЙ НА СИЛИКАГЕЛЕ: ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ

Кириллова В.А., Платонова Я.Б.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Области практического применения фталоцианиновых комплексов многочисленны и разнообразны. Благодаря своим уникальным свойствам фталоцианины нашли широкое применение в качестве химических и биохимических сенсоров, катализаторов различных процессов, компонентов полупроводников, солнечных батарей и жидких кристаллов, в молекулярной электронике и фотодинамической терапии рака (ФДТ). Хотя фталоцианины и являются достаточно термически и химически устойчивыми, они подвержены фотодеградации, а проведение каталитических процессов в гомогенной среде приводит к трудоёмкому процессу очистки целевых продуктов реакции. Эти проблемы можно решить с помощью иммобилизации фталоцианиновых металлокомплексов без потери их первоначальной активности.

В данной работе нами проведена иммобилизация *трет*-бутил-замещенного фталоцианина палладия(II) методом адсорбции на диоксид кремния, а также изучены физико-химические свойства полученного материала различными методами: рентгенофлуоресцентный анализ, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, элементный анализ, сканирующая электронная микроскопия.

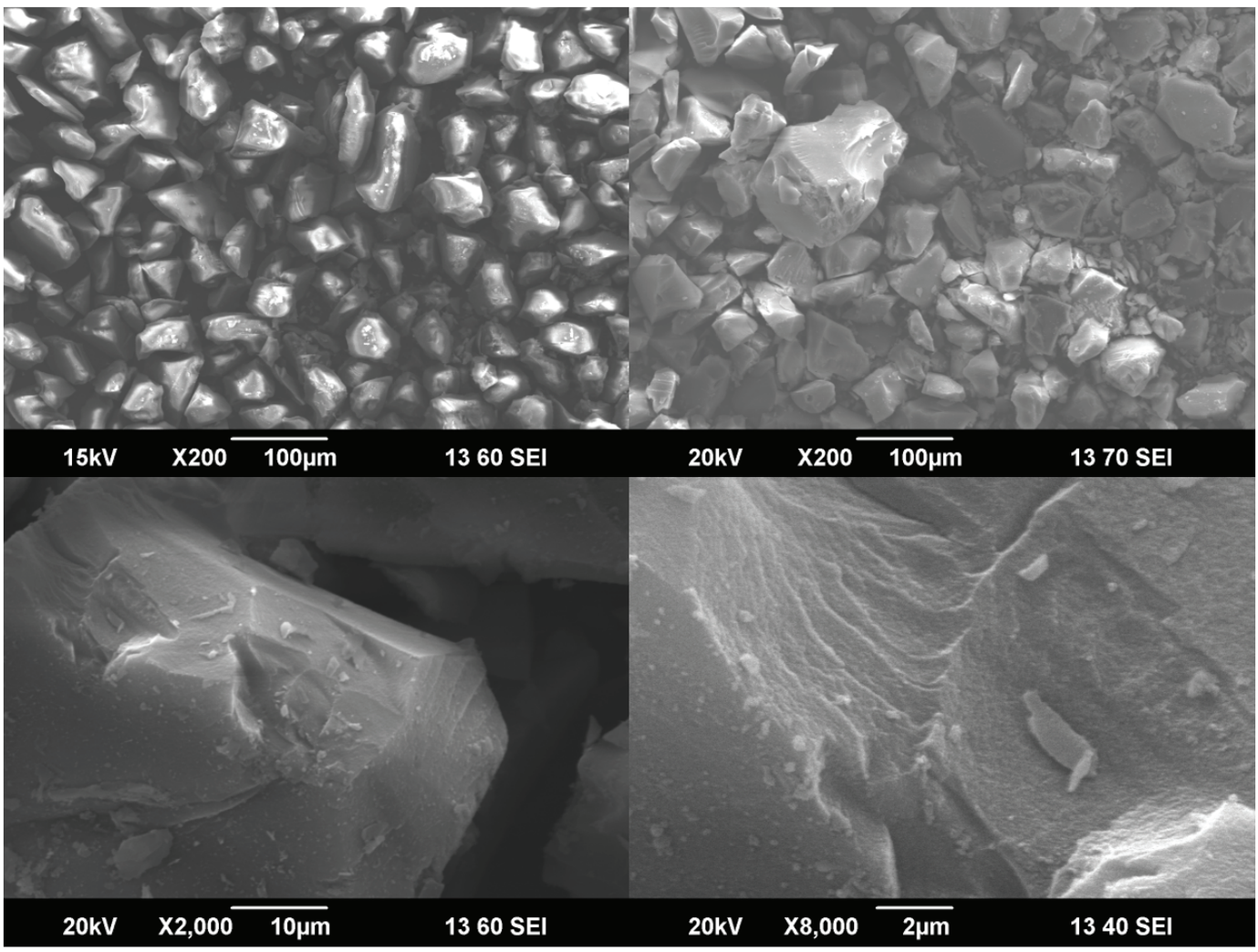


Рис. 1. Изображения СЭМ *трет*-бутил-замещенного фталоцианина палладия (II), адсорбированного на диоксиде кремния.

Работа выполнена в рамках госзадания «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ» (АААА-А21-121011990019-4).

ВЛИЯНИЕ НЕКОТОРЫХ МЕТИЛКСАНТИНОВ НА ПСИХОФИЗИОЛОГИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ОРГАНИЗМА

Клименко Д.И., Егорова А.А., Парфенова Д.А., Безумова Д.В., Маракасова А.А., Савина А.С.
ФГБОУ ВО СЗГМУ им. И.И. Мечникова Минздрава России, Санкт-Петербург

В последние годы приобрела актуальность проблема, касающаяся потребления различных тонизирующих напитков, в состав которых входит в кофеин—1,3,7-триметилксантин. Научный всплеск интереса к проблеме связан с неоднозначное влиянием кофеина на различные системы организма человека. Целью данной работы является исследование влияния кофеина (1,3,7-триметилксантин) на физиологические процессы организма, связанные с тревожно-депрессивным состоянием.

В данном исследовании приняло участие 102 студента: 71 девушка и 31 юноша. Для определения депрессии и тревоги использовались: Шкала Цунга для самооценки депрессии, шкала самооценки тревоги (ZARS), а также авторская анкета для определения побочных эффектов влияния на организм кофеина. Сравнение двух групп по количественному показателю, выполнялось с помощью U-критерия Манна-Уитни.

Из группы опрашиваемых только 56 респондентов полностью знают в состав каких пищевых продуктов входит кофеин. Среди испытуемой группы 82 респондента ответили, что они употребляют кофе и тонизирующие напитки и соответственно 20 респондентов ответили, что не употребляют данные напитки. Рассматривая частоту потребления кофе можно выделить несколько групп: несколько раз в день — 17 чел., один раз в день — 15 чел., несколько раз в неделю — 24 чел., несколько раз в месяц—35 чел., не употребляют 10 чел. По частоте потребления энергетических напитков студенты разделились на несколько групп: употребляющие кофеин и кофеин содержащие напитки несколько раз в день— 5 чел., один раз в день — 2 чел., несколько раз в неделю—10 чел., несколько раз в месяц — 42 чел., не употребляют кофеин — 43 чел. Среди опрашиваемых 24 человека уверенны, что кофеин не оказывает положительное влияние на организм, а 51 респондента считают, что кофеин полезен и 27 опрошенных затрудняются ответить на вопрос о пользе кофеина.

Также было выявлено, что повышение частоты потребления энергетических напитков статистически значимо приводит к появлению функциональных нарушений ритма сердца ($p < 0,001$). Избыточное потребление кофе приводит к уменьшению длительности сна и повышению уровня депрессии Me=49 ($p = 0,043$). Частое потребление энергетических напитков приводит к формированию дозозависимости и привыканию к стимулирующим компонентам ($p < 0,001$);

Избыточное потребление кофеина приводит появлению нарушений ритма сердца, нарушениям сна, развитию депрессии, а также зависимости от кофеина.

Разнонаправленное действие кофеина нарушает работу различных систем органов, и изменяет фармакологическую чувствительность к кофеину. Механизм нарушения чувствительности конца не изучен, но есть предположения, что эффект связан с увеличением аденозиновых рецепторов на мембране клеток. Полученные нами данные требуют углубленного исследования проблемы действия кофеина на организм.

ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СУСПЕНЗИЙ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЧАСТИЦ ВЫСОКОПОРИСТОГО ХИТОЗАНА, ДОПИРОВАННОГО НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА, В ПОЛИДИМЕТИЛСИЛОКСАНЕ

Ковалева В.В.[1], Кузнецов Н.М.[1], Загоскин Ю.Д.[1], Волков Д.А.[1], Вдовиченко А.Ю.[1, 2], Григорьев Т.Е.[1], Чвалун С.Н.[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт», Москва
[2]ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва

В последнее время множество исследований направлено на создание «умных» материалов, способных контролируемо изменять механические или физико-химические свойства под действием различных внешних стимулов (температуры, давления, pH, электрического или магнитного полей и др.). Интересным примером среди таких материалов являются электрореологические жидкости (ЭРЖ) — суспензии легко поляризуемых микро- или наночастиц в непроводящей жидкости, способные при приложении электрического поля обратимо изменять свое реологическое поведение с вязкого на упругое. Природа ЭР эффекта состоит в поляризации частиц дисперсной фазы (наполнителя) и формировании из них цепочек и колончатых структур под действием электрического поля.

Особое место среди наполнителей для ЭРЖ занимают полимерные и композитные частицы. Применение частиц биополимеров (целлюлозы, хитина и хитозана) в качестве наполнителей позволяет создавать экологически безопасные низкоконцентрированные ЭРЖ с высокими эксплуатационными характеристиками. Недавно была показана высокая ЭР активность пористых частиц хитозана в полидиметилсилоксане (ПДМС) и оливковом масле при чрезвычайно низкой концентрации менее 1 масс.% (0.62 об.%). Одним из способов регулирования ЭР активности наполнителя является создание композиционных частиц, что позволяет контролировать электрофизические характеристики частиц. Поэтому целью данной работы является изучение ЭР активности нового наполнителя — композиционных высокопористых частиц хитозана, допированных наночастицами серебра.

В работе методом сублимационной сушки получены композиционные частицы хитозан/серебро с различным соотношением компонентов по массе: 10/1, 5/1, 2/1, 1/1. Все образцы были исследованы методами электронной микроскопии и ИК-спектроскопии. Для приготовления ЭРЖ полученные композитные частицы диспергировали в ПДМС, при этом концентрация составляла 1 масс.%. Обнаружено, что все суспензии проявляют ЭР эффект. На кривых течения наблюдается рост значений предела текучести с увеличением напряженности электрического поля и концентрации серебра в составе наполнителя. Частотные зависимости элекрофизических характеристик (проводимости, истиной и мнимой составляющих диэлектрической проницаемости) получены методом широкополосной диэлектрической спектроскопии. Показано, что с ростом концентрации серебра в составе наполнителя диэлектрическая проницаемость и проводимость увеличиваются. Также в работе исследована седиментационная устойчивость суспензий. Обнаружено, что с увеличением концентрации серебра в композиционных пористых частицах увеличивается стабильность суспензий. При этом седиментационное отношение (отношение высоты коллоидной фазы к высоте всей жидкости) составляет 56, 61, 65, 71 % для 1 масс.% суспензий частиц состава 10/1, 5/1, 2/1, 1/1, соответственно. В докладе обсуждаются возможности создания ЭРЖ с заранее заданными, контролируемыми свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-73-00205).

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ВАНИЛИН-ЗАМЕЩЕННОГО КОМПЛЕКСА BODIPY

Кокурина Т.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

В настоящее время борфторидные комплексы дипиррометена представляют особый интерес из-за возможности их практического применения в различных сферах. Так, например, BODIPY можно использовать для пометки белков, определения pH среды, в качестве сенсора на ионы тяжёлых металлов или ртути Hg^{2}+, а также в качестве молекулярные роторы. Стоит отметить, что BODIPY отличаются простотой модификации молекул, что позволяет создавать разнообразные сенсоры на их основе и вводить в остов комплекса различные заместители.

В данной работе был проведен синтез комплекса BODIPY с заместителем в мезо-положении. Синтез проводился в течении нескольких суток с применением линии Шленка, вещество очищалось после каждой стадии методами колоночной и флэш-хроматографии. Структура борфторидного комплекса была подтверждена методами инфракрасной спектроскопии и масс-спектрометрии. Для синтезированного соединения были сняты электронные спектры поглощения и флуоресценции в растворителях различной природы. Комплекс имеет перспективы для дальнейшего изучения его свойств в качестве флуоресцентного сенсора.

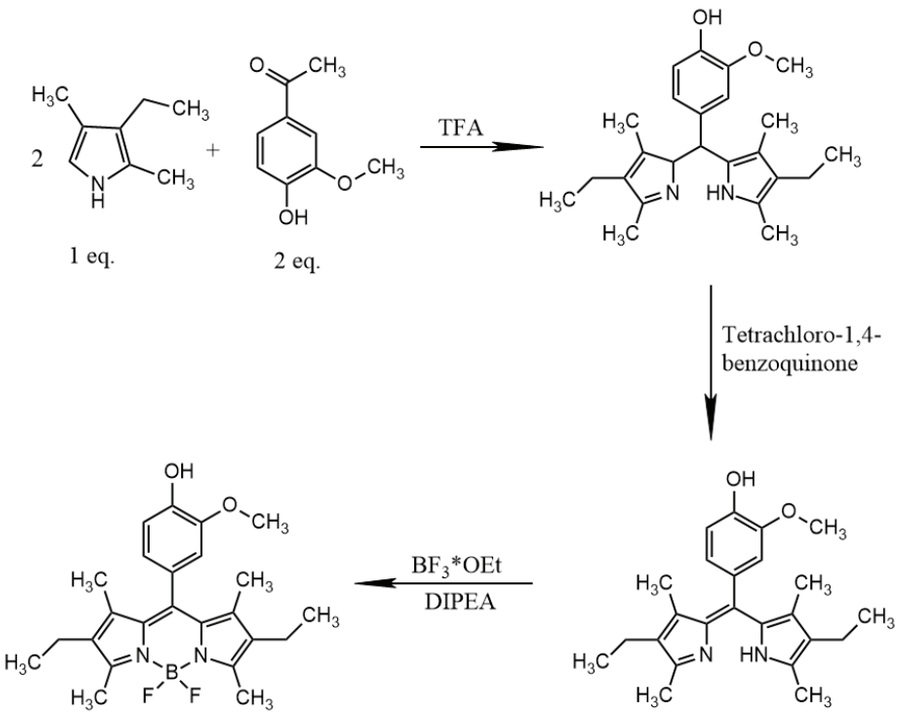


Рис. 1. Схема синтеза мезо-замещенного комплекса BODIPY на основе ванилина

В настоящее время проводятся спектральные исследования отклика образца на полярность среды и ее pH, изучается зависимость интенсивности и положения пиков от природы растворителя.

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕНОПАУЗАЛЬНОЙ ФИТОТЕРАПИИ

Коломиец Е.В.

ФГБОУ ВО Тюменский ГМУ Минздрава России

Важная задача современной гинекологии — продление хорошего качества жизни и активного здорового долголетия женщин в постменопаузальном периоде. Менопауза — это естественный процесс, который происходит по мере старения яичников и выработки меньшего количества эстрадиола. В преддверии окончания репродуктивного периода (45 лет) наступают гормональные изменения перименопаузы, которые часто длятся от четырех до десяти лет. В течение этого времени у женщин могут наблюдаться удлинение менструального цикла, приливы жара, ночная потливость, проблемы со сном, сухость влагалища, увеличение веса, изменения настроения или депрессия. Патогенетически обоснована в современной гинекологии менопаузальная гормональная терапия эстрогенными препаратами или комплексными лекарственными средствами, содержащими прогести-

ны и эсторогены. В клинической практике существует большой спектр противопоказаний для гормонотерапии, поэтому с целью улучшения качества жизни женщин с проявлениями дефицита эстрогенов применяют альтернативные средства растительного происхождения. В арсенале врачей акушеров-гинекологов появилась новая фармацевтическая форма: растворимые во рту таблетки, разработанные с использованием технологии сублингвальной нанотаблетной технологии, (sublingual nanotablet technology) содержащие транс-ресвератрол из Polygonum cuspidatum, витамин Е и витамин D3. Транс-Ресвератрол обладает более широким спектром действия в отличие от других фитоэстрогенов, поскольку действует как на альфа-, так и на бета-эстрогенные рецепторы. Противопоказания: индивидуальная непереносимость компонентов, беременность, кормление грудью. Сублингвальная рецептура обеспечивает высокую биодоступность транс-ресвератрола, поскольку он обходит печеночный метаболизм первого прохода, входя непосредственно в системное кровообращение. В клиническом исследовании препарат ресвератрола демонстрирует тенденцию к улучшению общей когнитивной функции и областей вербальной и семантической памяти, что указывает на потенциал ресвератрола для улучшения всех функций памяти и поддерживает добавление ресвератрола в качестве потенциальной стратегии ослабления преждевременного когнитивного снижения у женщин в постменопаузе. Авторы также наблюдали незначительные улучшения в состояниях настроения, что указывало на возможность дополнительных преимуществ для качества жизни в годы после менопаузы. Еще один компонент сублингвальной таблетки феминатабс — витамин Д. Современные научные данные свидетельствуют о том, что уровень витамина D обратно связан с раком молочной железы и частотой сердечно-сосудистой патологии. Кроме того, некоторые исследования показали, что добавки витамина D эффективны при падении и уменьшении переломов бедра у женщин в постменопаузе. Витамин Е, содержащийся в комплексном препарате ресвератрола, снижает частоту приливов жара благодаря своему влиянию на уровень эндогенных опиоидов. Анальгетический эффект α-токоферола обусловлен ингибицией выработки простагландинов и стимулирует секрецию морфиноподобных веществ в нервной системе. Кроме того, витамин Е ингибирует превращение арахидоновой кислоты в простагландин через действие на ферменты фосфолипазу А2 и циклооксигеназу. Доказан омолаживающий эффект, позволяющий правильно использовать организмом линолевую кислоту. Витамин Е усиливает антиоксидантный эффект ресвератрола за счет синергического эффекта. Таким образом, растворимые во рту таблетки, разработанные с использованием инновационной технологии, содержащие транс-ресвератрол (10мг), витамин Е (12 мг) и витамин D3 (10 мкг = 400 МЕ), показаны для пациенток в перименопаузальном периоде.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ ХИТОЗАНОВЫЕ ПАТЧИ С ЭСТРАДИОЛОМ, ПОЛУЧЕННЫЕ В ЭКОЛОГИЧНЫХ СРЕДАХ, СОДЕРЖАЩИХ CO_2 ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Комягина А.А.[1], Пигалёва М.А.[1], Пестрикова А.А.[2]

[1]МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический Факультет, Кафедра физики полимеров и кристаллов;
[2]ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, ЛФХП №311

Сегодня одной из важных и актуальных задач, стоящих перед человечеством, является забота об окружающей среде. Поэтому существенный аспект современных разработок — это их экологическая безопасность. Особенно большую роль она играет для материалов, используемых в пищевой и медицинской отраслях промышленности. Примером такого материала может служить хитозан — биосовместимый, нетоксичный полимер, обладающий антимикробной и гемостатической активностью. На его основе можно создавать покрытия, защищающие продукты, каркасы для тканевой инженерии и биосовсместимые матрицы с инкапсулированными лекарственными препаратами. В представленной работе мы предлагаем технологию получения хитозановых патчей для трансдермальной доставки лекарств, в которой в качестве растворителя для хитозана используется раствор угольной кислоты под высоким давлением CO_2. Эта среда самонейтрализуется при снятии давления, и потому полностью биосовместима, а также обладает бактерицидными свойствами. В качестве сшивающего агента выбран природный сшиватель — генипин, также отвечающий всем требованиям биосовместимости.

В данной работе мы исследовали влияние молекулярной массы хитозана и химического сшивания полимерных цепей на механико-прочностные свойства губок, их внутреннюю структуру, а также на загрузку и высвобождение лекарственных средств из таких матриц.

Сравнительный анализ кривых растяжения для всех полученных губок показал, что патчи из более высокомолекулярного хитозана обладают большей устойчивостью к силе деформации, однако обладают меньшей растяжимостью, а также при добавлении большего количества генипина губка рвётся при меньшей силе воздействия, но при этом становится более устойчивой к растяжению. Также с помощью сканирующей электронной микроскопии были оценены микроструктура и пористость патчей и была обнаружена тенденция к появлению более крупных пор с увеличением процентного содержания сшивающего агента в губках. Методом осаждения из сверхкритического флюида в полученные губки был введен эстрадиол. Было показано, что при уменьшении количества сшивателя увеличивается эффективность загрузки препарата в матрицу. При этом увеличение количества генипина в губке приводит к более медленному высвобождению лекарственного средства.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРАУНСОДЕРЖАЩИХ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ И ОСОБЕННОСТЕЙ ИХ ФОТОРЕАКЦИЙ

Кондратенко А.Д.[1], Лобова Н.А.[2]

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*
[2]*Центр фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

Фотохимические реакции вносят существенный вклад в реакции образования углерод-углеродных связей. С их помощью можно получать исключительные молекулярные структуры, которые не могут образовываться обычным путем. Реакция [2+2]-фотоциклоприсоединения — одна из важнейших реакций в фотохимии: в результате нее можно получить производные циклобутана, которые иными способами получить практически невозможно или очень сложно. Стириловые красители — класс органических фоточувствительных соединений, находящих различное применение в науке, технике, медицине. Стириловые красители, содержащие краунэфирный фрагмент — перспективные лиганды для создания новых функциональных материалов, сенсорных устройств, флуоресцентных маркеров и т.д.

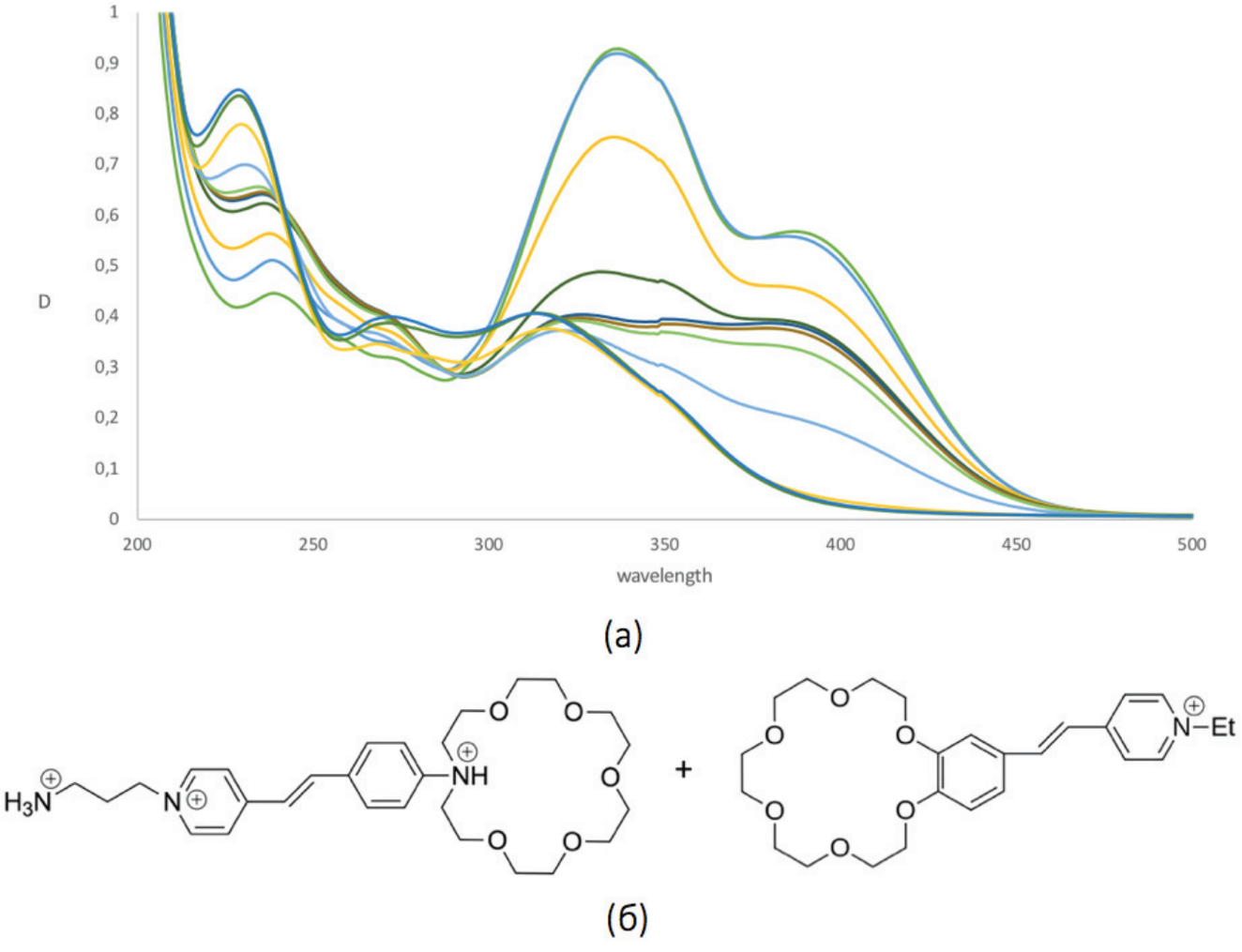


Рис. 1. Спектр поглощения (а) комплекса (б) с добавлением серной кислоты (конц.) при освещении УФ-лампой в диапазоне длин волн 320-420 нм.

В данной работе рассматриваются ионофорные аналоги стириловых красителей и исследуется их способность к образованию гомо- и гетеросодержащих димерных структур по типу «голова-к-хвосту», а также способность данных структур вступать в реакции [2+2]- фотоциклоприсоединения, исследуется способность стириловых красителей, содержащих краун-эфирный фрагмент и катион пиридиния, образовывать устойчивые комплексы с кукурбит[8]урилом в воде, а также вступать в реакции E/Z-фотоизомеризации и стереоселективного [2+2]-фотоциклоприсоединения.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА В ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ ЛИТИЯ

Кондратьева Е., Сергеев А.В.

ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

Морфология электроосажденного лития тесно связана со свойствами поверхности литиевого электрода. Данные, полученные ранее экспериментально, свидетельствуют о том, что при осаждении лития наблюдается не просто последовательное формирование новых зёрен на поверхности, но и накопление механического напряжения, вероятно, вызванное внедрением лития в межзёренные границы. Таким образом, на механизм роста влияет диффузия по поверхности и границам зёрен. Понимание процессов, происходящих при электроосаждении лития и приводящих к росту негладких осадков, провоцирующих быструю деградацию устройства, может дать ключ к разрешению этих проблем.

Экспериментальное изучение лития является сложной задачей, поэтому учеными предлагаются различные методы моделирования, например, метод молекулярной динамики (МД). МД широко используется для исследования кристаллических дефектов в различных металлах, в частности для ОЦК металлов W, Mo, Fe и т. д. Однако литий ещё не являлся объектом подобных исследований. Кроме того, его низкая температура плавления 454 K, лишь 1.5 раза превышает комнатную, что выделяет Li из ряда ранее моделированных металлов. Поэтому целью данной работы являлась оценка применимости различных силовых полей для моделирования металлического лития.

Новым перспективным направлением в МД являются силовые поля на основе машинного обучения (MLIP), достоинством которых является автоматизированная процедура параметризации на основе результатов расчётов методом теории функционала плотности (DFT). В таблице 1 на примере некоторых характеристик металлического лития, включая параметры фазового перехода твердое тело — жидкость, показано преимущество силового поля MLIP перед традиционными потенциалами, основанными на модели погруженного атома (EAM): Belashenko 2013, Nichol 2016 — EAM-потенциалы; Kim 2012, Ko 2017 — 2NN-MEAM-потенциалы.

Таблица 1. Сравнение свойств твердого лития, полученных экспериментально и рассчитанных методами МД (с разными силовыми полями) и DFT. a — постоянная решетки, E_{ins} _ энергия внедрения междоузельного атома, E_{vac} _ энергия образования вакансии, T_{melt} _ температура плавления, ΔH_{melt} — энтальпия плавления, ΔV_{melt} _ изменение объема при плавлении, E_{ins}^{300K} и E_{vac}^{300K} — энергии внедрения междоузельного атома и образования вакансии при 300 K соответственно.

	Exp.	DFT	MLIP	Kim12	Ko17	Belash13	Nichol16
a, Å	3.510	3.441	3.442	3.488	3.408	3.441	3.510
E_{ins}, eV	-	0.58	0.56	0.66	0.48	1.28	0.65
E_{vac}, eV	0.34	0.51	0.49	0.40	0.50	0.80	0.48
T_{melt}, K	454	-	452±2	418	443	487±2	660±2
ΔH_{melt}, kJ/mol	2.93	-	2.92	2.92	2.80	4.42	4.80
ΔV_{melt}, %	1.65	-	1.51	2.56	1.55	5.73	1.75
E_{ins}^{300K}, eV	-	-	0.44	0.65	0.44	0.78	0.68
E_{vac}^{300K}, eV	-	-	0.45	0.45	0.46	0.59	0.47

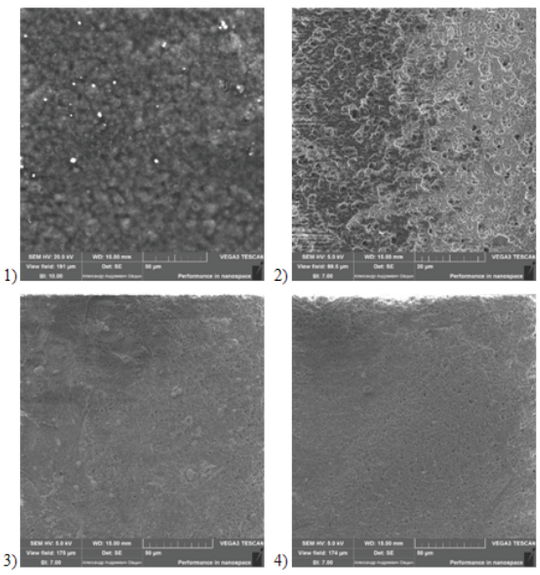
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЬМАТАЦИИ КАПИЛЛЯРНО-ПОРИСТОГО ТЕЛА

Коновалова В.С., Нармания Б.Е., Осыко А.В.

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный политехнический университет»

Экспериментальные исследования процессов массопереноса и образования продуктов коррозии в капиллярно-пористом теле проводились на образце, изготовленном из 30 слоев фторопластовых мембран МФФК-5. Мембраны были предварительно пропитаны раствором $Ca(OH)_2$ (концентрация 1,29 г/л), а затем помещены в ячейку с 2 %-ым раствором $MgCl_2$. По истечении года образец был извлечен из ячейки и разобран на слои. После высушивания проведены исследования элементного состава поверхности каждого слоя мембран.

На рис. 1 видно, что на верхнем слое в порах мембраны осадился продукт реакции $Ca(OH)_2 + MgCl_2 = Mg(OH)_2 + CaCl_2$, но уже на втором слое следов кольматанта в порах мембраны не обнаружено, как и на остальных слоях мембраны.



Определение элементного состава поверхности каждой мембраны показало, что по толщине образца концентрация хлорид-ионов уменьшается, а концентрация катионов кальция наоборот увеличивается.

На поверхности первого слоя концентрация катионов кальция минимальна (0,44 %), поскольку весь кальций, находящийся в порах мембраны, прореагировал с хлорид-ионами из раствора $MgCl_2$.

Минимальное содержание катионов кальция сохраняется до 5 слоя мембран, затем она постепенно повышается, поскольку вследствие кольматации пор продуктами коррозии проникновение хлорид-ионов по толщине образца замедляется. На поверхности последнего 30-го слоя образца концентрация катионов кальция составила 27,59 %, а концентрация хлорид ионов — 1,06 %.

Рис. 1. Снимки поверхности мембран после проведения испытания на проницаемость.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СВИНЦОВО ГАЛОГЕНИДНОГО ПЕРОВСКИТА $CH_3NH_3PBBR_3$

Константинова К.М.[1], Мелихова Д.О.[1], Иштеев А.Р.[1], Диденко С.И.[2]

[1] НИТУ «МИСИС», Лаборатория перспективной солнечной энергетики

[2] НИТУ «МИСИС», Кафедра полупроводниковой электроники и физики полупроводников

Галогенидные перовскиты — это новое семейство полупроводников для оптоэлектронных технологий. Ранее сообщалось о высокой радиационной стойкости при рентгеновском облучении и потоке протонов для солнечных элементов с поглотителями на основе галогенидных перовскитов.

Перовскитная композиция $CH_3NH_3PbBr_3$ ($MAPbBr_3$) с широкой запрещенной зоной на уровне 2,2 эВ вызывает большой интерес для применения в области детекторов ионизирующего излучения, поскольку она отвечает общим требованиям (высокая интенсивность фотолюминесценции, стабильность материала, большой Стоксов сдвиг), предъявляемым к полупроводниковым детекторам ионизирующего излучения.

В работе предлагается синтез и изучение оптических и фотоэлектронных свойств монокристаллов металлорганических перовскитов. Кристаллы синтезировали из раствора солей CH_3NH_3Br:$PbBr_2$ в диметилформамиде. Рост осуществлялся путем реверсивной кристаллизации из раствора. Продуктом синтеза является монокристалл $MAPbBr_3$ с внутренней кубической формой и размерами 6×6×3 миллиметра. Для подготовки к измерениям необходимо обеспечить компланарность поверхностей. Предлагается двухстадийная механическая обработка. Первоначально поверхность была сформирована путем шлифования фиксированным абразивом. После формирования плоскости была выполнена полировка введением абразивных частиц в жидком носителе. Результаты финальной шероховатости подтверждены с помощью атомно-силовой микроскопии. Среднее значение шероховатости составило R_a=42 нм

Для определения оптических свойств полированных перовскитных монокристаллов, проводилось измерение спектров поглощение и фотолюминесценции. Наблюдалась видимая поверхностная фотолюминесценция зеленого цвета 551 нм при ультрафиолетовом возбуждении 350 нм.

Определен фазовый состав синтезированных образцов MAPbBr3 методом рентгеноструктурного анализа. Рентгенфазовый анализ идентифицирует продукты синтеза как кубический монокристалл $CH_3NH_3PbBr_3$ с пространственной группой Pm-3m.

ДЕЙСТВИЕ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА С ТИОСУЛЬФАТНЫМИ И ТИОМОЧЕВИННЫМИ ЛИГАНДАМИ НА АКТИВНОСТЬ ФОСФОДИЭСТЕРАЗЫ ЦИКЛИЧЕСКОГО ГУАНОЗИНМОНОФОСФАТА

Кормухина А.Ю.[1], Татьяненко Л.В.[2], Покидова О.В.[2], Санина Н.А.[1,2,3]

[1]Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова

[2]Институт проблем химической физики РАН

[3]Научно-образовательный центр «Медицинская химия» Московского государственного областного университета

Как известно, ферменты катализируют несколько тысяч различных биохимических реакций, протекание которых обеспечивает нормальную работу организма. Установлено, что процесс расслабления гладкой мускулатуры кровеносных сосудов происходит при комплексном действии нескольких ферментативных систем: гуанилат-

циклазы (ГЦ) и фосфодиэстеразы (ФДЭ). Монооксид азота NO реагирует с гемом фермента ГЦ, который катализирует выработку циклического гуанозинмонофосфата (цГМФ). Последний запускает каскад биологических реакций, приводящий к вазодилатации. В свою очередь, ФДЭ расщепляет фосфоэфирную связь в циклических нуклеотидах (цГМФ), переводя их в неактивную нециклическую форму. С этой точки зрения, перспективным направлением современной науки является синтез соединений, способных активировать действие ГЦ и, при этом, ингибировать функции ФДЭ.

В Институте проблем химической физики РАН проводятся работы по синтезу, исследованию физико-химических свойств и биологической активности перспективного класса экзогенных доноров NO — нитрозильных комплексов железа (НКЖ), которые являются миметиками активных центров нитрозильных [Fe-S] ферредоксинов. В настоящей работе представлены результаты исследования двух представителей данного класса соединений, а именно биядерного анионного НКЖ с тиосульфатными лигандами $[Fe_2(S_2O_3)_2(NO)_4]\cdot 4H_2O$ (комплекс **1**) и моноядерного катионного НКЖ $[Fe(SC(NH_2)_2)_2(NO)_2]Cl\cdot H_2O$ (комплекс **2**) на ферментативные функции ФДЭ.

$$\text{цГМФ} \xrightarrow{\text{ФДЭ цГМФ}} \text{ГМФ} \xrightarrow{\text{нуклеотидаза}} PO_4^{3-} + \text{гуанозин}$$

Рис. 1. Накопление неорганического фосфата в результате ферментативной реакции гидролиза цГМФ.

Концентрацию фосфатов определяли спектрофотометрическим методом в двойной ферментативной системе как представлено на рис. 1. Было установлено, что при концентрациях 0.1 mM, 0.01 mM и 0.001 mM комплекс **1** ингибирует действие ФДЭ на 100±10%, 87±9%, 65±7%, соответственно, а комплекс **2** — на 87±9%, 23±2%, 40±4% при аналогичных условиях, соответственно. Тиолатные лиганды в исследуемом диапазоне концентраций не оказывают значительного влияния на функции фермента. Для комплекса **1** была определена константа ингибирования из графика зависимости скорости ферментативной реакции от концентрации субстрата: K = 1 μM.

Для оценки NO-донорной активности использовали реакцию Грисса, по которой определяли концентрацию нитрит-ионов — основных продуктов NO в водных аэробных растворах. Согласно полученным данным, оба комплекса в результате гидролиза самопроизвольно генерируют NO, при этом катионный комплекс является более эффективным NO-донором.

Таким образом, полученные результаты позволяют рекомендовать данные комплексы для дальнейшего изучения в качестве потенциальных лекарственных препаратов антигипертензивного и вазодилататорного действия.

Работа выполнена по теме государственного задания, № государственной регистрации АААА-А19-119071 890015-6.

ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В БИОИМИДЖИНГЕ

Корозникова Е.Е.[1,2], Васин А.А.[1], Костров А.Н.[1], Залесский А.Д.[1], Надточенко В.А.[1,2]

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Биовизуализация (биоимиджинг) — одно из самых активно развивающихся направлений современной науки. Оно направленно на изучение пространственно-временного взаимодействия биомолекул на клеточном или субклеточном уровне. Для решения подобных задач очень удобным инструментом является использование флуоресцентных меток, которые позволяют проводить исследования без значительных воздействий на объект (в частности, проводить исследования в живых клетках). Квантовые точки (КТ) все чаще используются в качестве флуоресцентных маркеров в подобных исследованиях. Однако, селективная проницаемость мембран клеток, а также агрегативная устойчивость КТ значительно ограничивает их применение в биоимиджинге. Одним из решений данной проблемы может быть подбор и использование амфифильных покрытий КТ.

Данная работа направлена на изучение влияния стабилизирующего покрытия на биосовместимость КТ. В качестве объектов были выбраны КТ стабилизированные меркаптопропионовой кислотой, тиоэтанаммонием и полимерным полиэлектролитом. Инкубация КТ производилась в клетки A549 (adenocarcinoma lungh human) в течении 24 часов в CO_2 инкубаторе. Был произведен подбор концентрации КТ. С помощью методов конфокальной микроскопии, а также микроскопии времени жизни флуоресценции была установлена способность данных КТ проникать внутрь клеток, а также сделаны выводы о распределении КТ внутри клетки (рис. 1).

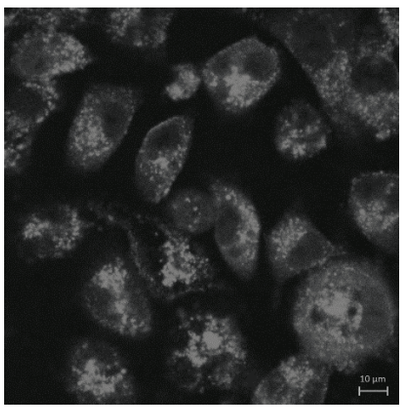


Рис. 1. Клетки, окрашенные КТ. Изображение получено в конфокальном микроскопе, сигнал ФЛ на длине волны 580-760 нм с отсечкой по времени 200 мкс.

НАНОМАСШТАБНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА КРИСТАЛЛЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Косарева Е.К.[1], Гайнутдинов Р.В.[2], Михальчук А.А.Л.[3], Ананьев И.В.[4], Муравьев Н.В.[1]

[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук*

[2] *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук*

[3]*Федеральный институт исследования и тестирования материалов (BAM)*

[4]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук*

Одним из важных направлений в современных исследованиях энергетических материалов является изучение процессов детонации и инициирования с высоким временным и пространственным разрешением. Предполагается, что детальное изучение явлений, протекающих на поверхности отдельных кристаллов, позволит по-новому взглянуть на процессы, лежащие в основе чувствительности энергетических материалов к инициирующим воздействиям.

В данной работе с помощью методов атомно-силовой микроскопии (АСМ), силовой спектроскопии и АСМ-литографии проанализирована реакция поверхности кристаллов четырех различных энергетических материалов (3,4-динитропиразол, пикриновая кислота, тетранитропентаэритрит, гексанитрогексаазаизовюрцитан) на три вида наномасштабного воздействия (индентирование, трение, удар). Исследована зависимость отклика на механическое воздействие от свойств кристаллов и условий окружающей среды.

Установлено, что локальное механической воздействие способно вызвать перекристаллизацию и разложение поверхности на кристаллах самых мягких из исследованных материалов, 3,4-динитропиразола и пикриновой кислоты. Кроме того, визуализирован известный эффект анизотропии кристаллов: показано, что воздействие на грань (100) пикриновой кислоты приводит к перестройке поверхности, тогда как на грани (010) изменений после воздействия не наблюдается. Также выяснено, что поверхность кристаллов стабилизируется при повышении влажности из-за диссипации энергии при взаимодействии поверхности с частицами воды в атмосфере, что может быть связано с эффектом снижения чувствительности энергетических материалов при намокании.

Результаты исследования могут быть полезны для фундаментального понимания процессов инициирования и разложения энергетических материалов.

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ ТЕРМОИНАКТИВАЦИИ ОКСИДАЗЫ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ *OGATAEA PARAPOLYMORPHA* DL-1 (OPADAAO1)

Кошкина М.К.[1], Атрошенко Д.Л.[1,2], Шеломов М.Д.[1,3], Савин С.С.[1,3], Тишков В.И.[1,2,3]

[1]*Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Москва, Россия*

[3]*ООО «Инновации и высокие технологии МГУ», Москва, Россия*

FAD зависимые оксидоредуктазы — класс ферментов, катализирующих окислительно-восстановительные реакции, сопровождающиеся переносом электронов с молекулы субстрата на кофермент FAD, который, таким образом, служит акцептором электронов.

К этому классу ферментов принадлежат оксидазы D-аминокислот (DAAO), которые катализируют окислительное дезаминирование D аминокислот в α-кетокислоты. На данный момент, интересным для изучения объектом является выделенная в растворимой форме в нашей лаборатории OpaDAAO1 — DAAO термофильных дрожжей *Ogataea parapolymorpha* DL-1. Представляет интерес изучение кинетики ее термоинактивации. В ходе данной работы были построены серии кривых термоинактивации при различных температурах, начальных концентрациях фермента и при наличии различных добавок.

Полученные данные позволили сделать предположения о кинетической схеме термоинактивации фермента. Эти данные позволят выделить наиболее перспективные с точки зрения повышения стабильности пути модификации OpaDAAO1.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук и докторов наук (МК-6239.2021.1.4).

МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИИ ГИДРОЛИЗА ИМИПЕНЕМА МЕТАЛЛО-БЕТА-ЛАКТАМАЗАМИ L1 И NDM-1

Кривицкая А.В.[1], Хренова М.Г.[1,2]

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия*

Борьба с бактериальной резистентностью к β-лактамным антибиотикам на сегодняшний день является одной из самых сложных задач. Превалирующий механизм бактериальной резистентности — экспрессия бактериальных ферментов β-лактамаз, которые инактивируют β-лактамные антибиотики посредством реакции гидролиза. Для разработки новых эффективных лекарственных средств способных противостоять бактериальной устойчивости необходимо четко понимать механизмы инактивации уже известных антибактериальных средств.

В данной работе рассмотрен процесс гидролиза антибиотика имипенема из класса карбапенемов металло-β-лактамазами L1 и NDM-1. Из экспериментальных данных известно, что конечным продуктом для обоих ферментов является протонированный по углероду R изомер имипенема, который с течением времени эпимеризуется в S изомер. Остается неясным образуется ли C-продукт R изомер в активном центре или же в результате быстрой таутомеризации в растворе из N продукта. Чтобы прояснить путь превращений имипенема, мы провели ряд молекулярных расчетов.

Рассчитанные комбинированным методом квантовой механики/молекулярной механики профили химической реакции демонстрируют, что в случае NDM-1 имеет место образование S изомера C-продукта, но предпочтительным продуктом гидролиза обоих ферментов является N-продукт. Структуры ферментов в каждой стационарной точке профиля потенциальной энергии проанализированы в рамках квантово-топологической теории атомов в молекулах. Детально рассмотрены фермент-субстратные комплексы, в частности сходства и различия в формировании «оксианионной дырки» в ферментах. Анализ структуры фермент-субстратного комплекса и второго интермедиата показал, что возможность образования C-продукта в NDM-1 объясняется исключительно наличием альтернативного канала протонирования, в L1 этот канал перекрыт Pro226. Дальнейшее исследование молекулярной динамики N протонированного имипенема в растворе показало, что предпочтительной конформацией является конформация для таутомеризации в R положение. Более того, молекулярная динамика C протонированных продуктов продемонстрировала предпочтительную эпимеризацию R в S, что согласуется с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 18-74-10056).

СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД В ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ С РАЗНЫМИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В СОСТАВЕ РАНОЗАЖИВЛЯЮЩИХ ПРЕПАРАТОВ

Кудряшова Н.О.[1,2], Жуденков К.В.[2], Глущенко Н.Н.[1]

[1] *Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
[2] *M&S Decisions, Москва, Россия*

В современном мире вопросы ранозаживления представляют повышенный интерес в связи с ростом хронических заболеваний, старением населения, резистентностью раневых инфекций к антибиотикам. Поэтому поиск эффективных ранозаживляющих средств является актуальным. Использование наночастиц (НЧ) меди в составе препаратов обеспечивает эффективное влияние на течение раневого процесса и антибактериальное действие. Однако многообразие методов получения наночастиц создает широкий спектр Cu НЧ с разной структурой и различными физико-химическими параметрами.

На основе проведенных экспериментов на мышах по оценке острой токсичности Cu НЧ с разными характеристиками, эффективности влияния их на заживление по показателям $T_{1/2}$ и $T_{пол}$ (временам полу- и полного заживления ран, соответственно), по антибактериальному действию на клетки *E.coli* и *St.epidermidis* был проведен анализ для выявления зависимостей между показателями биологического действия и физико-химическими характеристиками Cu НЧ. Выявлены следующие значимые характеристики: размер НЧ, толщина оксидной пленки и фазовый состав НЧ.

Установлены линейные зависимости между размером наночастиц и $T_{пол}$ (коэфф. наклона=-0.024; p-value=0.011); между размером Cu НЧ и антибактериальной активностью на клетки *E.coli* (коэфф. наклона=-0.559; p-value=0.006); между толщиной оксидной пленки Cu НЧ (коэфф. наклона=12.830; p-value=0.002), содержанием оксида меди (коэфф. наклона=-1.420; p-value=0.003) и антибактериальной активностью на клетки *St.epidermidis* (коэфф. наклона=-1.420; p-value=0.003). Показано, что токсичность Cu НЧ связана с содержанием оксида меди (CuO) (коэфф. наклона=0.198; p-value=0.030). В рамках проведенного анализа Cu_2Ox, Cu_1O и CuO показывают наилучшие результаты. Далее для прогнозирования оптимальных физико-химических характеристик Cu НЧ в составе лекарственных препаратов будет использована комбинационная модель.

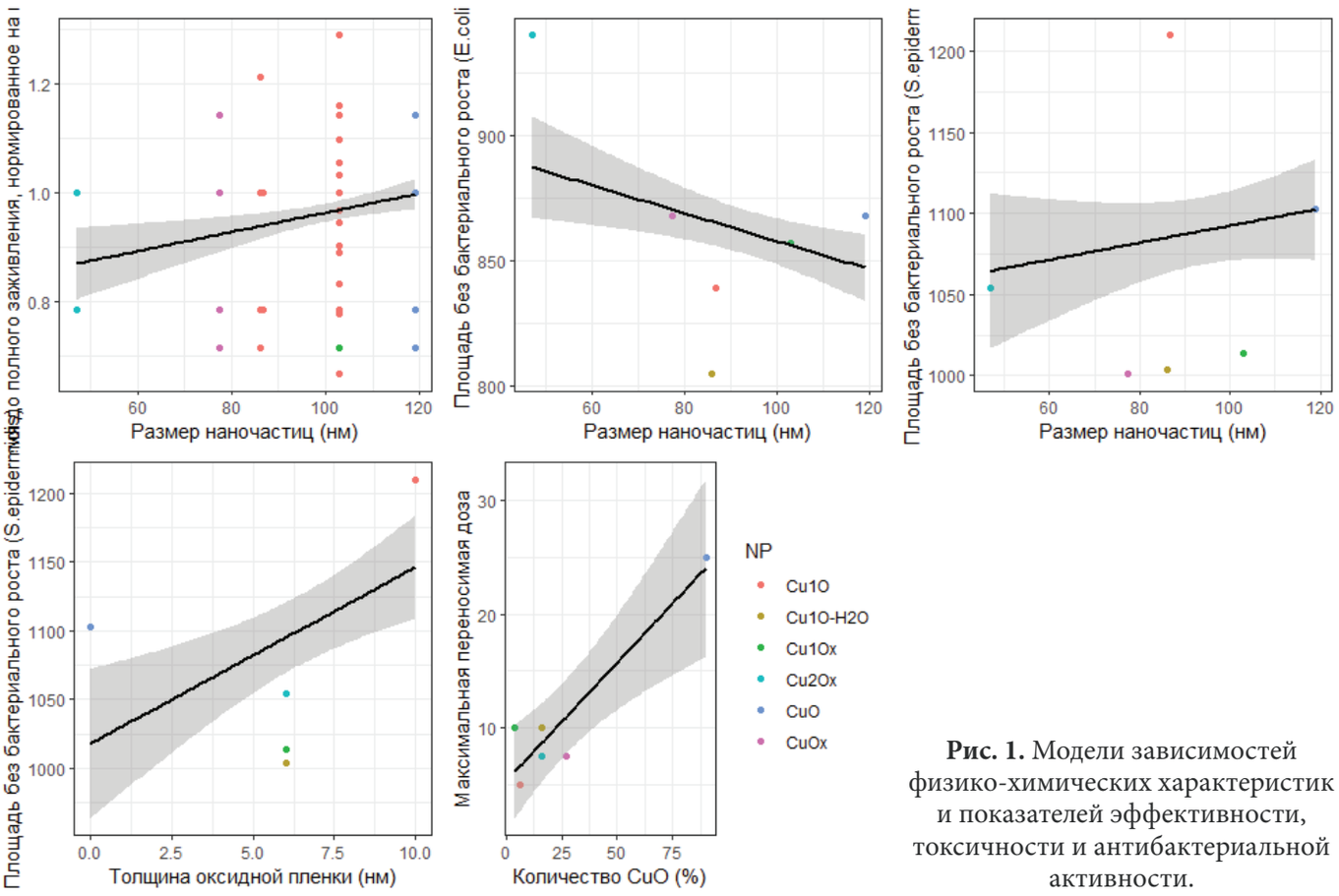


Рис. 1. Модели зависимостей физико-химических характеристик и показателей эффективности, токсичности и антибактериальной активности.

ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ — ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА И ИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ С СИНТЕЗОМ

Кузнецов В.А.

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

Полимерные композиты находят широкое применение в различных областях науки и техники, в частности в электронике. В большинстве случаев это обусловлено механическими свойствами полимеров, которые выгодно отличают такие композиты от классических полупроводниковых и металлических материалов электронной техники.

Одним из направлений исследований новых полимерных композитов является исследование их электропроводящих свойств. Это обусловлено как необходимостью определения таких прикладных характеристик, как температурный коэффициент сопротивления, величина удельного электросопротивления и его зависимость от концентрации проводящей фазы или температурный диапазон работоспособности, так и фундаментальных свойств, в частности механизмов электронного транспорта. Если с прикладными свойствами все понятно, то исследование механизмов электронного транспорта не всегда востребовано, и не всегда ясно зачем это делать, особенно в контексте того, что такие исследования проводятся при низких температурах, далеких от востребованных на практике. Дело в том, что данные о механизмах электронного транспорта в полимерных композитах могут дать дополнительную информацию о морфологии композитов, то есть прояснить характер распределения проводящей фазы. Так, например, изображения, полученные методами сканирующей или просвечивающей микроскопии, не всегда дают полную картину, ввиду того что в большинстве случаев — это изображения сечений, не дающих пространственной картины. Примером того, что таких изображений может быть недостаточно может послужить система плоских наночастиц, равномерно распределенных в объеме полимера. На ПЭМ-изображениях могут быть видны торцы частиц, отделенных друг от друга, но сказать соприкасаются ли эти частицы в объеме не всегда возможно, и часто остается только предполагать.

В этом смысле имеющиеся температурные зависимости электросопротивления $R(T)$ композитов и должная их обработка могут такие предположения либо подтвердить, либо опровергнуть. Например, если в двух разных диэлектрических матрицах будут равномерно распределены одинаковые частицы электропроводящей фазы, то

за счет определенных свойств полимера и условий синтеза композитов эти частицы могут либо соприкасаться, либо быть разделены диэлектрическими прослойками. В качестве примера можно привести полибензимидазол и хитозан в качестве полимерных матриц, а в качестве наполнителя — малослойный графен (МСГ), то есть наночастицы графита. Так вот в первом случае из исследования электронных транспортных свойств следует вывод о разделении частиц МСГ диэлектрическими прослойками, а во втором случае наличие такого разделения будет зависеть от концентрации частиц МСГ в объеме композита. Другой пример — одностенные углеродные нанотрубки, которые могут быть либо полупроводниковыми, либо металлическими. Если взять непрозрачную пленку, образованную только ОУНТ, то будут наблюдаться металлические зависимости $R(T)$, но если взять также непрозрачную пленку ОУНТ в изначально прозрачной диэлектрической матрице с достаточно большой концентрацией ОУНТ, то могут наблюдаться зависимости близкие по характеру к полупроводниковым. Также в качестве примера можно привести полимерные композиты сегрегированной сетчатой структуры, в которых частицы проводящей фазы заведомо образуют перколяционные сетки протекания — электронные транспортные свойства позволят установить характер распределения таких частиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда
№ 21-79-00224, https://rscf.ru/project/21-79-00224/.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ХЛОРИДА КАЛЬЦИЯ В КАЧЕСТВЕ ТЕМПЛАТА ДЛЯ СИНТЕЗА ОКТАКАРБОКСИФТАЛОЦИАНИНАТА

Кулёв В.А., Осокин В.С.
Ивановский государственный химико-технологический университет

Металлофталоцианины благодаря высокой химической и термической стабильности и уникальным физико-химическим свойствам находят широкое практическое применение во многих отраслях науки и техники. В промышленных масштабах их используют в качестве красителей синего и зеленого цветов, катализаторов сероочистки топлив (процесс Merox) а также материалов для оптоэлектроники, сенсорики и катализа.

Известны два основных способа получения фталоцианинов: мочевинный и нитрильный. С практической точки зрения, мочевинный способ является более предпочтительным, в виду того, что прекурсоры для синтеза фталоцианинатов: фталевая кислота и её производные — являются относительно недорогими, индустриально производимыми продуктами. С другой стороны, фталоцианины лиганды могут быть легко превращены в соответствующие металлокомплексы путем нагревания с избытком соли металла. Поэтому разработка новых методов синтеза таких соединений является актуальной задачей.

Нами впервые предложен новый метод синтеза октакарбоксифталоцианина путем деметаллирования его кальциевого комплекса, который может быть легко получен методом мочевинного сплавления, а также изучены спектральные и некоторые биологические свойства указанного комплекса. Структура полученного соединения была подтверждена с использованием методов ИК, УФ и масс спектроскопии.

Полученный комплекс представляет собой порошок темно-синего цвета, плохо растворимый в воде и хорошо растворимый в щелочах. На рис. 1 представлена структура комплекса, а также его УФ и спектры флюоресценции.

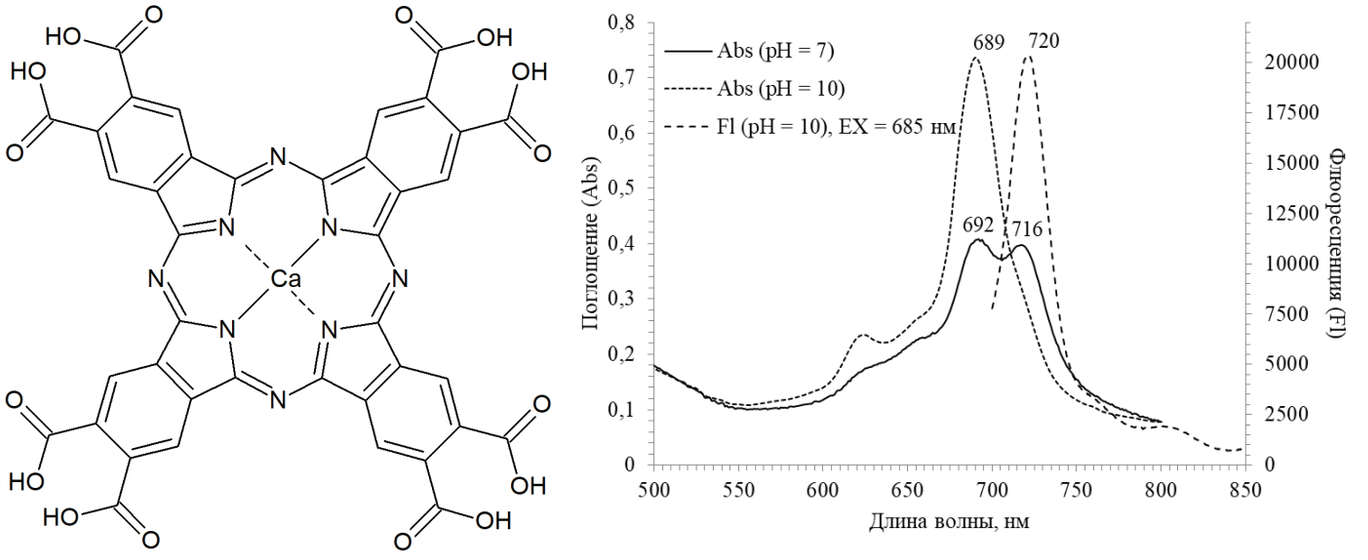


Рис 1. Структура и спектры поглощения и флюоресценции октакарбоксифталоцианината кальция при pH = 7 и 10.

При pH = 10 спектр комплекса, являющийся типичным для металлофталоцианинов, содержит интенсивную полосу поглощения в Q-области (689 нм). В данной среде соединение флуоресцирует (EX = 685 нм) с максимумом свечения при 720 нм; квантовый выход флуоресценции составляет 24% (стандарт — фталоцианинат цинка).

В нейтральной среде (pH = 7) интенсивность основной полосы снижается, и наблюдается расщепление сигнала на две компоненты. Данный факт указывает на склонность комплекса к ассоциации в указанных условиях. При этом образуются так называемые J-агрегаты, что подтверждает появление новой полосы поглощения с максимумом при 716 нм. Флюоресценция комплекса при pH 7 не наблюдается.

ВЛИЯНИЕ ГРЕЛИНА НА НЕЙРОВОСПАЛЕНИЕ

Кулёмина С.Ю.[1], Ереско С.О.[2,3]Айрапетов М.И.[1,4]

[1] Санкт-Петербургский государственный педиатрический медицинский университет
[2] Санкт-Петербургский государственный университет
[3] Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет
[4] Институт экспериментальной медицины

Нейровоспаление сопровождает патогенез многих заболеваний нервной системы. Существуют предположения, что пептид грелин (англ. ghrelin, GHR) может быть потенциальным терапевтическим средством, с помощью которого можно предотвратить нейровоспалительные процессы, однако эти данные не систематизированы.

При экспериментальном аутоиммунном энцефаломиелите GHR (100 мкг/кг) повысил мРНК TNF-α, IL-6, NF-κB и iNOS в сыворотке крыс, подавляя пути воспаления и пироптоз. GHR (20 мкг) после внутримозгового кровоизлияния уменьшает уменьшает отек мозга, объем гематомы, снижает уровни мРНК NLRP3, ASC, каспазы-1, IL-1β и IL-18, SOD. Введение GHR (100 мкг/кг) снизило уровни IL-1β, IL-6 и TNF-α, но повысило IL-4, IL-10 и IL-13 в тканях головного мозга крыс. Введение GHR (3 мкг/кг) людям с алкогольной зависимостью снижало IL-6 в крови и повышало IL-10. GHR увеличивал плотность дендритных шипиков в культивируемых нейронах гиппокампа крыс и повышал экспрессию мРНК BDNF-1,2,4,6. У мышей с болезнью Альцгеймера GHR (0,3 мг/кг) предотвратил снижение пространственной ориентации и памяти по результатам тестирования NOR и Y-лабиринта. Введение GHR (5 мг/кг) снизило накопление бета-амилоида, уменьшило микроглиоз и астроглиоз. У крыс с болезнью Паркинсона (БП) GHR повышал уровень pERK и GSK-3β, проявляя нейропротекторное действие, а введение низких доз GHR на ранних сроках развития в модели БП снижало потерю дофаминергических нейронов в одиночном ядре и стриатуме, блокировало активацию микроглии и подавляло высвобождение IL-6, повышало SOD1 и соотношение Bcl-2/Bax, что предотвращало повреждение нейронов и апоптоз. GHR (0,1-400 нМ) в линии клеток SH-SY5Y уменьшил нейротоксичность, вызванную 6-гидроксидопамином (6-OHDA), снижал дозозависимо индуцированную 6-OHDA экспрессию α-синуклеина, снизил процент апоптотических клеток. В модели эпилепсии у крыс GHR (80 мкг/кг) снижал уровень пептида CGRP, вещества P и IL-1β в плазме, снижал мРНК TNF-α, IL-1β и COX2. GHR (0,3 нмоль/мкл) при введении в гиппокамп после обонятельной бульбэктомии у мышей восстанавил нарушение памяти по результатам поведенческих тестов, усилил вызванную бульбэктомией низкую экспрессию NMDA и MAPK1, повышал CaMKIIa. В другой работе по результатам ПЦР GHR индуцировал нейропротекторные факторы (BDNF, IGF-1); снижал провоспалительные факторы (IL1, IL6, TNF), увеличивал SIRT1 в гипоталамусе и гиппокампе.

При моделировании различных форм патологий ЦНС было показано, что экзогенный GHR — нейропротекторное средство и может обладать терапевтическим потенциалом для лечения нейродегенеративных расстройств.

БИОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ ИСТОЧНИК ТОКА НА ОСНОВЕ ГРАДИЕНТА КОНЦЕНТРАЦИЙ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В КОРНЕОБИТАЕМОЙ СРЕДЕ РАСТЕНИЙ

Кулешова Т.Э.[1], Желначева П.В.[1], Гасиева З.А.[1], Галушко А.С.[1], Панова Г.Г.[1]

[1]Агрофизический научно-исследовательский институт

В системе корнеобитаемая среда-растения наблюдается наличие электрических полей, что связано с миграцией питательных веществ и формированием градиента концентраций, обусловленного диффузией носителей зарядов. Стационарность полей поддерживается присутствием дополнительных электродвижущих сил — перемещение зарядов может быть связано с электроактивностью растений и микроорганизмов. В настоящее время разрабатываются биоэлектрохимические системы (БЭС) — растительно-микробные топливные элементы, использующие в качестве энергоресурса способность бактерий окислять ризодепозиты. Теоретически рассчитанная удельная мощность таких элементов составляет 3.2 Вт/м^2. Предположительно, в основе электрогенных процессов в корнеобитаемой среде могут лежать возникающие в результате транспорта ионов

концентрационные эффекты, потенциалобразующая роль которых ранее не рассматривалась. Целью данной работы было выявление влияния состава корнеобитаемой среды на формировании разности потенциалов в прикорневой зоне.

Растения выращивали по технологии панопоники в условиях интенсивной светокультуры, в качестве фитотест-объекта выбран салат (*Lactuca sativa* L.) сорта Тайфун. Были исследованы следующие варианты питательного раствора Кнопа, модифицированные по форме азота: 1 — нитратная, 2 — смешанная нитратно-аммонийная, 3 — аммонийная, и 4 — нитратная с увеличенным в два раза содержанием хлорида калия, 5 — дигидроортофосфата калия, 6 — сульфата магния. Полученные результаты по динамике разности потенциалов, генерируемой в системе корнеобитаемая среда-растения, представлены на рисунке 1.

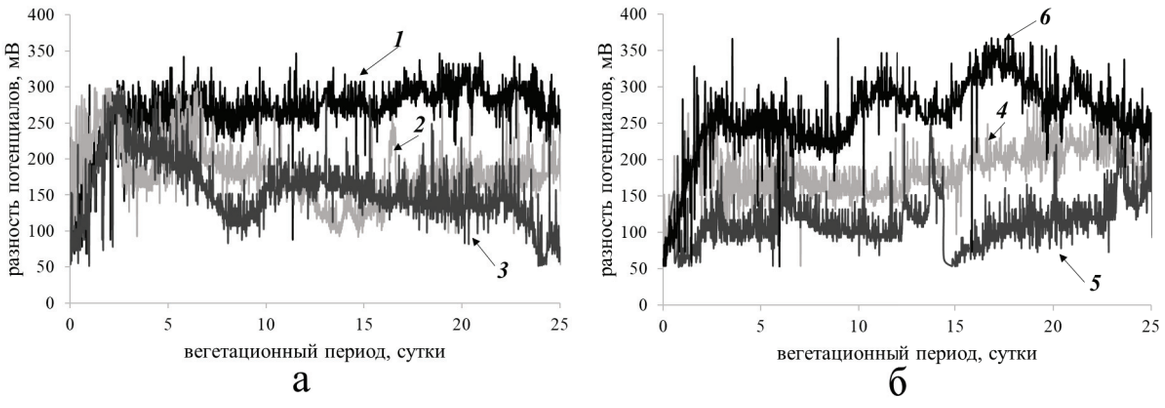


Рис. 1. Динамика разности потенциалов, генерируемая в БЭС на основе различных питательных растворов, отличающихся содержанием формы азота: 1 — нитратная, 2 — нитратно-аммонийная, 3 — аммонийная, 4 — нитратная с увеличенной концентрацией хлорида калия, 5 — дигидроортофосфата калия, 6 — сульфата магния.

Лучшим по величине и стабильности из исследованных вариантов питательного раствора для создания БЭС на основе электрогенных процессов в системе корнеобитаемая среда-растения был раствор Кнопа, содержащий азот в нитратной форме, — разность потенциалов достигала 300 мВ и была стационарной на протяжении вегетационного периода. Перемещение ионов в корнеобитаемой среде в процессе жизнедеятельности растений может стать новым зеленым источником электроэнергии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-4397.2022.5).

ОБНАРУЖЕНИЕ НЕОБЫЧНОЙ ДЕФОРМАЦИИ В КРИСТАЛЛАХ БИФТАЛАТА КАЛИЯ В ПОПЕРЕЧНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМУ ПОЛЮ НАПРАВЛЕНИИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕЁ СТРУКТУРНОЙ ОБУСЛОВЛЕННОСТИ

Куликов А.Г.[1], Новикова Н.Е.[1], Благов А.Е.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Верин И.А.[1], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

В кристаллах бифталата калия (БФК) впервые обнаружены необычные анизотропные деформации в условиях воздействия внешнего электрического поля. Методом времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии выделен быстрый пьезоэлектрический отклик и более медленные обратимые релаксационные деформации, схожие по кинетике с электропроводностью кристалла. Установлено, что деформации имеют активационный характер и зависят от напряженности поля и полярности. Наиболее отчетливо они проявляются вдоль оси *a*, перпендикулярной направлению *c* приложения поля (рис. 1а). Рентгеноструктурный анализ кристалла выявил разупорядочение атомов калия по нескольким позициям и вакансии в них (рис. 1б). Данные, полученные двумя рентгенодифракционными методами, позволяют заключить, что миграция носителей заряда (катионов калия) приводит к поперечной деформации кристаллической решетки БФК во внешнем электрическом поле. Полученные результаты демонстрируют новые возможности диагностики и создания в кристаллах деформаций, перпендикулярных приложенному электрическому полю, что крайне перспективно для задач стрейнтроники.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части подготовки кристаллов и обработки экспериментальных данных и по гранту

№ 075-15-2021-1362 в части проведения рентгенодифракционных исследований.

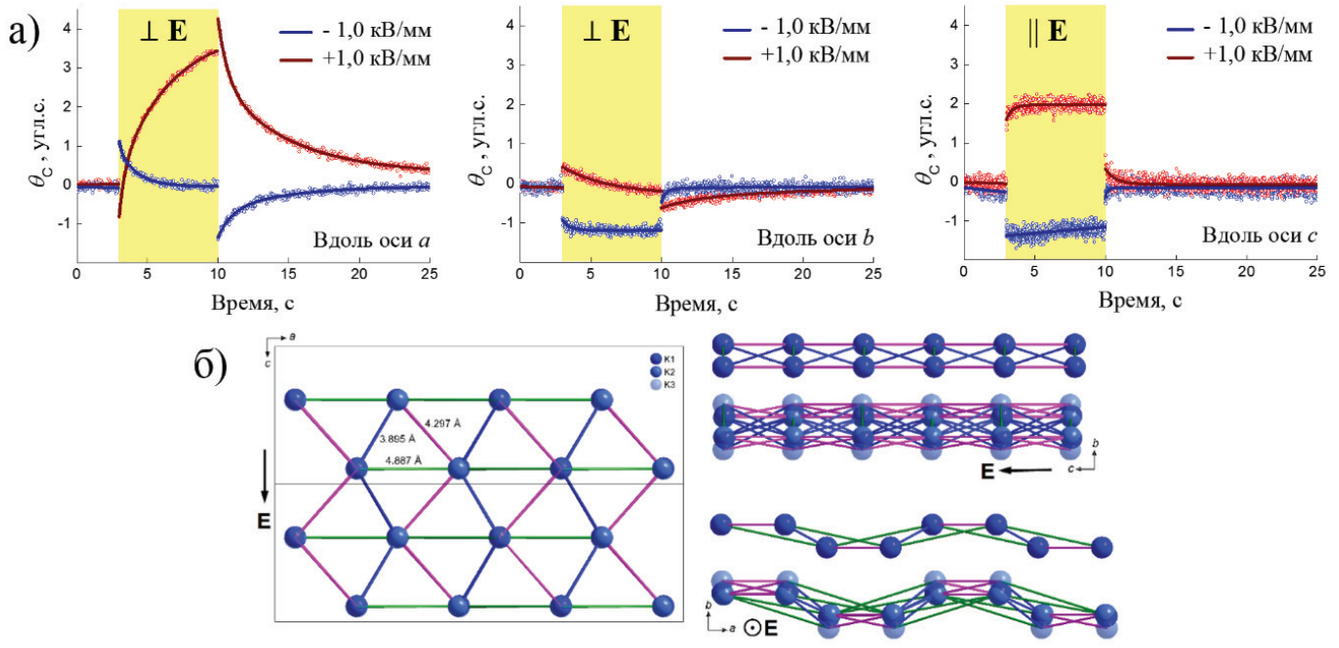


Рис. 1. Кристалл БФК: (а) — временные зависимости углового смещения дифракционных отражений вдоль осей *a*, *b* и *c* при импульсном воздействии (интервал выделен желтым) электрического поля напряжённостью *E* = 1.0 кВ/мм по оси *c*; (б) — проекция решетки атомов калия в структуре на плоскости *ac*, *bc* и *ab*. Стрелкой обозначено направление действия электрического поля.

ОСОБЕННОСТИ АДСОРБЦИИ ПАРОВ БЕНЗОЛА НА ПОРИСТЫХ УГЛЯХ И КРЕМНЕЗЁМАХ (ПРОДУКТАХ ПЕРЕРАБОТКИ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ)

Купреенко С.Ю., Новоторцев Р.Ю., Решетько С.С.

Химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Ежегодно только в России производится 200 тыс. тонн рисовой шелухи, а в мире эта цифра достигает 140 миллионов. Большую её часть утилизируют, закапывая в почву, однако из рисовой лузги можно одновременно получить пористые угли и диоксид кремния. Уголь и кремнезём являются недорогими адсорбентами, пригодными для очистки воды и воздуха. Представляет интерес изучить адсорбционные характеристики полученных и модифицированных материалов по отношению к типичным загрязнителям, например, бензолу.

Пиролизом рисовой шелухи получили золу. К навеске золы добавили 6М раствор NaOH. Полученную суспензию перемешали в течение суток при комнатной температуре. Углеродсодержащий остаток отфильтровали,

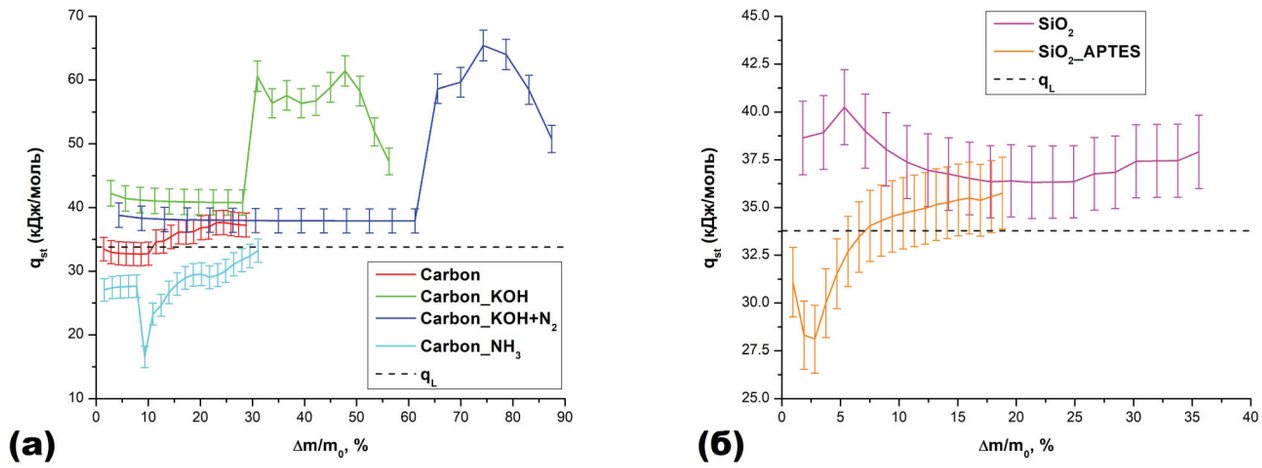


Рис. 1. Зависимость изостерической теплоты адсорбции q_{st} от величины адсорбции (относительного изменения массы $\Delta m/m_0$) бензола (а) пористыми углями и (б) кремнезёмом. Пунктиром обозначена молярная теплота конденсации q_L бензола.

отмыли и высушили. Оставшийся раствор обработали 37% раствором соляной кислоты. Осадок отфильтровали, отмыли и высушили. Таким образом, получены уголь (Carbon) и кремнезём (SiO_2), соответственно. Уголь активировали KOH 2 ч при 800°C без доступа воздуха (Carbon_KOH) и в токе азота (Carbon_KOH+N_2). Также уголь аминировали в автоклаве при 180°C в течение 3 ч (Carbon_NH_3). Кремнезём модифицировали гамммааминопропилтриэтоксисиланом (SiO_2_APTES).

С помощью прибора динамической адсорбции паров DVS Advantage (Surface Measurement Systems, Великобритания) для всех полученных адсорбентов весовым методом измерены изотермы адсорбции паров бензола при 20 и 30°C.

Рассчитаны ёмкость монослоя и удельная поверхность, оценена максимальная адсорбционная ёмкость. Особое внимание уделено зависимости изостерической теплоты адсорбции q_{st} от величины адсорбции (рис. 1), т.к. она несёт информацию об энергетической однородности поверхности сорбента, о взаимодействиях адсорбат-адсорбент, адсорбат-адсорбат и их относительном вкладе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ № МК-4402.2022.1.3

РОЛЬ СТРУКТУРЫ АКТИВНОГО ЦЕНТРА РАЗЛИЧНЫХ МИКРОБИАЛЬНЫХ И ЖИВОТНЫХ РОДОПСИНОВ В ДИНАМИКЕ ФОТОХРОМНЫХ РЕАКЦИЙ НА РАННИХ ВРЕМЕНАХ

Кусочек П.А., Логвинов В.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Родопсины — светочувствительные белки, использующие энергию света для обеспечения биологических процессов. Их хромофорной группой является протонированное основание Шиффа ретиналя (РПШО). В клетках бактерий фотоизомеризация РПШО происходит из полностью-*транс* формы в 13-*цис,* а в клетках животных — из 11-*цис* — в полностью-*транс*. Фотоизомеризация в белках протекает за сотни фемтосекунд с высоким квантовым выходом. Высокая эффективность данной реакции по-разному обеспечивается в животных и бактериальных родопсинах. В первых, как показано нами ранее, ключевую роль играют внутренние фотофизические свойства 11-*цис* изомера РПШО, тогда как последние меняют специфичность и скорость изомеризации полностью-*транс* хромофора. Целью работы является изучение роли белкового окружения в динамике протекания фотохромных реакций фотоизомеризации РПШО на ранних временах в разных бактериальных и животных родопсинах.

В исследовании изучались бактериальные родопсины, KR2 и бактериородопсин, бычий зрительный родопсин, и их первичные интермедиаты, K_{KR2}, K_{BR} и *батородопсин*, соответственно. Анализ вибронной структуры электронно-колебательных спектров РПШО, рассчитанных для реагентов и интермедиатов методом многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений (XMCQDPT2) в сочетании с методом потенциалов эффективных фрагментов (EFP), выявил, что в различных белковых окружениях колебательные моды сопряженной цепи хромофора обладают разной активностью и специфичностью.

В обоих бактериальных родопсинах наблюдается мода, соответствующая валентным колебаниям двойных связей ретиналя и локализованная на связи C_{13}=C_{14}, тогда как в бычьем родопсине наиболее интенсивным является колебание вдоль связи C_{11}=C_{12}. Такая селективность возбуждения валентных колебаний определенных двойных связей в начальный момент времени способствует реакции фотоизомеризации в обоих типах белков. Возбуждение внеплоскостных колебаний атомов водорода (HOOP) при связи C_{13}=C_{14} в родопсине KR2 и при связи C_{11}=C_{12} — в зрительном родопсине является еще одним фактором, способствующим реакции фотоизомеризации. В бактериородопсине наблюдается уменьшение активности данного вида колебаний по сравнению с другими родопсинами, что объясняется отличной структурой его активного центра.

Обратные реакции фотоизомеризации 13-*цис* изомеров РПШО в бактериальных интермедиатах также обладают селективностью, которая сильнее всего выражена для K_{KR2}, тогда как полностью-*транс батородопсин* изомеризуется неселективно. Таким образом, в работе продемонстрировано, что динамика на ранних временах в возбужденном состоянии зависит от структуры реакционного центра родопсинов обоих типов и способствует фотоизомеризации при наличии сильной водородной связи между РПШО и его первичном противоионом, приводя к наиболее быстрой реакции в зрительном родопсине и микробиальном родопсине KR2.

Автор выражает благодарность научному руководителю Боченковой А.В. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (грант №19-33-90254 Аспиранты).

СРАВНЕНИЕ DFT ПАКЕТОВ: АТОМНОПОДОБНЫЕ ОРБИТАЛИ (SIESTA) VS ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ (VASP)

Куфаров Н.Д., Аникина Е.В.

ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)»

Различные программные пакеты на основе метода функционала электронной плотности (DFT) используют свою расчетную схему и алгоритм ее выполнения, что зачастую приводит к определенному разбросу результатов моделирования, полученных в этих пакетах. Этот разброс может быть вызван как разными способами представления волновых функций и псевдопотенциалов, так и разными алгоритмами выполнения рутинных процедур (например, преобразования Фурье). Подобные неопределенности можно оценить с помощью специального дельта-теста. В нем моделируются наиболее устойчивые кристаллические структуры для каждого элемента и сравниваются их расчетные уравнения состояния. Сравнение происходит с помощью дельта-параметра (Δ), характеризующего энергетическое «расстояние» между полученными зависимостями полной энергии системы от объема ячейки моделирования. В данной работе сравнивались результаты, ранее полученные другими исследователями с помощью программного пакета VASP, и данные, полученные нами для тех же элементов в пакете SIESTA. Главное различие этих DFT пакетов состоит в представлении волновой функции системы: в VASP это базис плоских волн, в SIESTA — атомноподобных орбиталей. Уже было показано ранее, что Δ зависит от выбора характеристик базисного набора в SIESTA. Ожидаемо, наименьшую величину дельта-параметр принимает, когда базис настроен по наиболее устойчивой кристаллической структуре элемента (для углерода, например, эта структура — графит), поэтому оптимизация базисного набора атомноподобных орбиталей — полезная процедура для получения надежных, не зависящих от реализации DFT результатов.

Таблица 1. Дельта-параметр для легких элементов

Элемент	Li	C	Na	Mg	K	Ca
Δ, мэВ/атом	5,90	0,36	0,69	0,50	0,73	34,01

В таблице представлены результаты дельта-теста для некоторых элементов. Базисные параметры атомноподобных орбиталей оптимизировались для кристаллической структуры, используемой в дельта-тесте; псевдопотенциалы для расчетов в SIESTA брались из базы Fritz-Haber-Institute (FHI). Для четырех элементов (C, Na, Mg и K) дельта-параметр получился меньше 1 мэВ/атом. Следовательно, для использованных псевдопотенциалов можно ожидать хорошего согласия между результатами моделирования в VASP и SIESTA. А вот большие значения Δ (особенно у кальция) могут свидетельствовать о плохом качестве псевдопотенциала в одном из пакетов или в обоих сразу или о принципиально разных характеристиках использованных псевдопотенциалов (например, разное число электронов, рассматриваемых в качестве валентных). Исследование выполнено при финансовой поддержке молодой науки ЮУрГУ.

СОЛЬВАТАЦИЯ γ-ЦИКЛОДЕКСТРИНА В РАСТВОРИТЕЛЕ H_2O-ETOH

Кушнир Р.А., Алистер Д.А., Куранова Н.Н.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Повышение растворимости, регуляция скорости и степени высвобождения лекарственных средств из различных носителей — актуальные задачи современной фармацевтики. Для решения этих вопросов используют различные вспомогательные вещества, солюбилизацию, нанокапсулы и т.д. Перспективным является включение лекарственных средств в комплекс с циклодекстринами по типу «хозяин—гость». Пространственную структуру циклодекстрина можно изобразить в виде усечённого конуса, в полость которого могут помещаться молекулы других веществ, и при помощи гидрофобных взаимодействий и других связей образуются так называемые «соединения включения». В процессе такого комплексообразования изменяются исходные свойства включаемых веществ, а сам циклодекстрин при этом служит еще и защитой для молекул «гостя». Правильно подобранный сорастворитель может усилить солюбилизирующую способность циклодекстринов и изменить сольватационные характеристики реагентов, оптимизирую их координационные свойства. В настоящей работе изучено влияние растворителя вода-этанол (H_2O-EtOH) на сольватацию γ-циклодекстрина (γ-CD), рассчитаны изменения энергии Гиббса переноса γ-CD из воды в растворители H_2O-EtOH. Методом межфазного распределения вещества между двумя несмешивающимися фазами определяли коэффициенты распределения γ-CD в воде и ее смеси с EtOH. Расчет вели по формулам:

$$K_1 = [\gamma\text{-CD}]^{Hex}/[\gamma\text{-CD}]^{H2O};\ K_2 = [\gamma\text{-CD}]^{Hex}/[\gamma\text{-CD}]^{H2O\text{-EtOH}};$$

Равновесные концетрации γ-циклодекстрина определяли рефрактометрически, используя калибровочные графики зависимости коэффициента преломления раствора γ-CD от его концентрации.

Изменение энергии Гиббса γ-циклодекстрина при его переносе из воды в водно-этанольные растворы рассчитывали по уравнению:

$$\Delta_{tr}G^0(\gamma\text{-CD})^{H2O\text{-}EtOH} = RTln([\gamma\text{-CD}]^{H2O}/[\ \gamma\text{-CD}]^{H2O\text{-}EtOH}) = RTlnK_2/K_1$$

Полученные данные приведены в таблице 1. При переходе от воды к водно-этанольному растворителю наблюдается увеличение коэффициента распределения γ-CD.

Таблица 1. Коэффициенты распределения и термодинамические параметры сольватации γ-циклодекстрина.

X_{EtOH}, мол.д	0,0	0,05	0,1	0,2
K_1	0,08 ± 0,02	-	-	-
K_2	-	0,13 ± 0,06	0,23 ± 0,07	0,37 ± 0,14
$\Delta_{tr}G^0$(γ-CD), кДж/моль	0	1,04	2,48	3,62

Изменения энергии Гиббса при переносе γ-CD из воды в ее смеси с этанолом демонстрируют ослабление его сольватации. Можно предположить, что с ростом концентрации EtOH реакционная способность γ-циклодекстрина возрастает.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования (тема № FZZW-2020-0009).

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ПРИРОДУ И СВОЙСТВА ДЕФЕКТОВ В НАНОТРУБКАХ ДИОКСИДА ТИТАНА

Кытина Е.В.[1], Козловская К.Е.[1], Савчук Т.П.[1,2]

[1]Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1с2, 119991.
[2]Национальный исследовательский университет электронной техники — МИЭТ, пл. Шокина 1, Зеленоград, Москва, Россия

Диоксид титана (TiO_2) в наноразмерной фазе в настоящее время активно исследуется мировым научным сообществом, поскольку обладает рядом важных с практической точки зрения свойств. Одним из таких свойств является наличие большой удельной поверхности, доступной для воздействия молекул окружающей среды, что делает данный материал перспективным для применения в качестве фотокатализаторов, сенсоров, солнечных элементов и т.д. Темой данной работы является разработка эффективных фотокатализаторов на основе анодных трубок TiO_2 для преобразования углекислого газа в более энергоемкие углеводородные соединения и исследование их электронных свойств, в частности, природы и основных характеристик дефектов, что является важнейшей задачей экологии.

Формирование исходных массивов нанотрубок TiO_2 происходило путём двухстадийного электрохимического окисления предварительно подготовленной Ti-фольги ВТ1-0. Анодное окисление проводили в электролите на основе этиленгликоля, содержащем 0.3 масс. % NH_4F и 2% di-H_2O при температуре 20°C с использованием термостатируемого основания. Для кристаллизации полученные образцы подвергались термической обработке при 450 °C в муфельной печи в течение 60 минут. Далее с помощью метода ионного наслаивания (SILAR) на поверхность нанотрубок осаждали оксид меди Cu_xO с последующим отжигом в атмосфере воздуха при температуре 300 °C в течение 60 минут. Полученные образцы представляли собой нанокомпозиты TiO_2/Cu_xO.

Регистрация дефектов (радикалов) в нанотрубках TiO_2 осуществлялась с помощью метода электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) с использованием ЭПР-спектрометра Bruker ELEXSYS E500 (X-диапазон).

Спектр ЭПР исходных образцов TiO_2, согласно проведенному анализу, представляет собой суперпозицию двух сигналов: от оборванных углеродных связей (C·), фактор Ланде g=2.0028 ± 0.0005 и центров типа Ti^{3+}/вакансии кислорода (g_1=1.9961 ± 0.0005 и g_2=.9697±0.0005). Присутствие углерода в составе образцов, вероятно, обусловлено наличием этиленгликоля в электролите и также подтверждается данными элементного анализа. Спектр ЭПР нанокомпозитов TiO_2/Cu_xO представляет собой суперпозицию нескольких сигналов ЭПР: во-первых, от дефектов типа C· и Ti^{3+}/вакансий кислорода, наблюдавшихся в исходных структурах, и, кроме того, регистрируется мощный сигнал ЭПР от ионов меди Cu^{2+} (g=2.1612 ± 0.0005), что свидетельствует о наличии фазы CuO и согласуется с нашими данными, полученными методом вторичной ионной масс-спектрометрии. На фоне мощной линии ЭПР от Cu^{2+} центров также можно выделить сигнал небольшой интенсивности от O_2^- радикалов (g_1=2.026 ± 0.0005, g_1=2.009 ± 0.0005, g_1=2.003 ± 0.0005). Таким образом, методом ЭПР установлено, что в композитах TiO_2/Cu_xO наночастицы оксида меди присутствуют в виде фазы CuO. В отличие от исходных образцов на поверхности структур TiO_2/Cu_xO присутствуют также анион радикалы кислорода, которые, как известно, активно вовлечены в процесс фотокатализа. Следовательно, TiO_2/Cu_xO должны обладать большей фотокаталитической активностью, что важно для практических применений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00494.

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОДОВ МИКРОБНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА ДЛЯ ЗНАЧИТЕЛЬНОГО УВЕЛИЧЕНИЯ ЕГО МОЩНОСТИ И ПИТАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

Лазукин А.А.[1], Павлова П.А.[2] Кошель Е.И.[1]

[1]*Университет ИТМО*

[2]*ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»*

В настоящее время актуальной проблемой является поиск новых источников энергии и увеличение эффективности старых. Одним из направлений развития новых источников энергии является микробные топливные элементы (МТЭ). Микробные топливные элементы — это биотехнологические устройства, позволяющие генерировать электрический ток посредством микроорганизмов. К сожалению, мощность МТЭ ограничена особенностями метаболизма бактерий и потерями при передаче электронов на анод. В нашей работе мы провели модификацию электрода МТЭ с применением полианилина для увеличения его мощности.

Полианилин является перспективным соединением для увеличения характеристик МТЭ за счет уменьшения сопротивления при передаче электродов между биопленкой электрогенных бактерий и электродом. В качестве электрода нами использовался углеродный войлок «Карбапон» производства «М-Карбо». Модификация электрода проводилась электрохимическим методом полимеризации анилина с образованием электропроводящего эмеральдина. Для проведения исследования использовались МТЭ двухкамерного типа с электродом размером 5 * 5 см в среде LB. Электрогенной культурой выступал штамм *Shewanella oneidensis* MR1, являющейся одним из лучших признанных электрогенных микроорганизмов. В результате проведенных экспериментов удалось подтвердить повышение напряжения работы МТЭ и вырабатываемой мощности (рис.1). Все эксперименты проводились с замыканием между электродами резистора номиналом 1000 Ом.

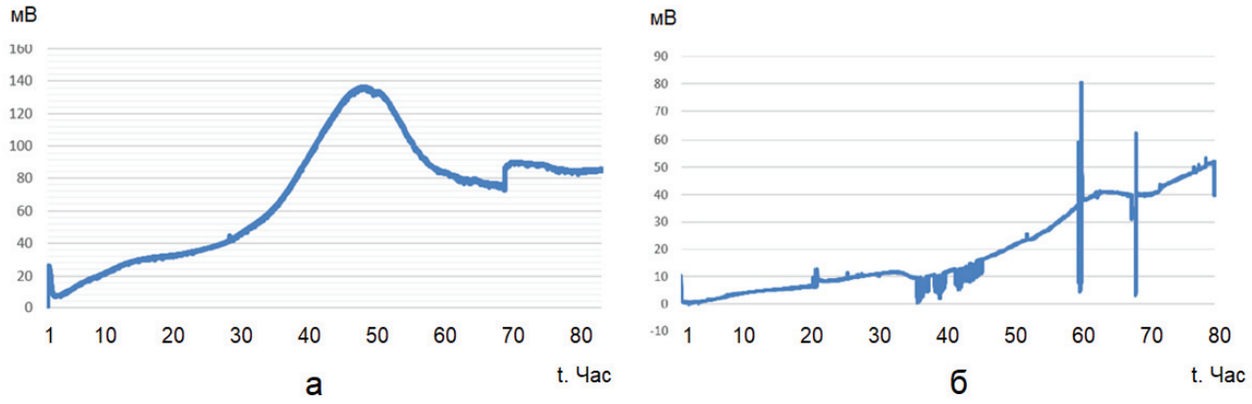


Рис. 1. Графики электрогенной активности МТЭ. А) Результат электрохимической модификации эмеральдином. Б) Результат работы с анодом без модификаций.

Полученные значения свидетельствуют о значительном увеличении напряжения, и мощности МТЭ. Увеличение мощности опытного МТЭ с модифицированным эмеральдином электродом достигало 133 мВ в то время, как контрольный МТЭ имел напряжение около 53 мВ. Суммарное увеличение мощности оценивается в 7,84 раза, а вырабатываемая мощность в 20 мкВт, что соответствует энергосберегающим режимам многих современных носимых устройств.

ПРЕДПОСЕВНАЯ ОБРАБОТКА ПШЕНИЦЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМОЙ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ: СРАВНЕНИЕ С ХОЛОДОВЫМ ЗАКАЛИВАНИЕМ И ДЕЙСТВИЕМ ТЕБУКОНАЗОЛ-СОДЕРЖАЩЕГО ПРОТРАВИТЕЛЯ

Лазукин А.В.[1], Корсукова А.В.[2], Грабельных О.И.[2,3]

[1]*ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ»*

[2] *Сибирский институт физиологии и биохимии растений СО РАН*

[3] *Иркутский государственный университет*

В работе проводится экспериментальное сравнение предпосевной подготовки семян мягкой озимой пшеницы (сорт «Иркутская» урожая 2017 года, семена получены из коллекций ЦКП «Биоресурсный центр» СИФИБР СО РАН) низкотемпературной плазмой поверхностного разряда атмосферного давления (обработка по не прямой схеме, то есть без контакта семян с разрядом), постоянного электрического поля высокого напряжения, химического протравителя семян (протравитель семян «Бункер», водно-суспензионный концентрат, фирма “Август”, содержание тебуконазола в препарате 60 г/л) и холодовой закалки на относительную устойчивость проростков

к промораживанию (доля выживших растений после суточного действия низкой температуры) и их морфофизиологические характеристики на начальном этапе прорастания (всхожесть, длина надземной части, суммарная длина корневой системы, сухая и сырая массы надземной и подземной части растения). Рассмотрены варианты сочетания различных обработок, в том числе действие химического протравителя и обработки низкотемпературной плазмой.

Обработки показали себя следующим образом. С точки зрения морфофизиологических характеристик проростков, наибольший стимулирующий эффект, достигается при закалке семян холодом. Действие низкотемпературной плазмы заметно только до 3их суток прорастания, эффекты оказываемые такой обработкой складываются с эффектами от обработки электрическим полем, что также отражается и на относительной морозоустойчивости проростков. Обработка протравленных и не протравленных семян низкотемпературной плазмой одинаково отражается на морфофизиологических характеристиках проростков.

С точки зрения устойчивости к низким температурам. Ни одна из обработок (химический протравитель, электрическое поле, низкотемпературная плазма) не повышала устойчивости не закаленных проростков. Если после обработки семян электрическим полем и химическим протравителем, полученные проростки были закалены, то устойчивость к низким температурам повышается. Если семена обработаны химическим протравителем, потом электрическим полем и/или низкотемпературной плазмой, то устойчивость снижается.

РОЛЬ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В ГИДРОФИЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ УГЛЕВОДОВ

Лаптев А.Ю., Рожманова Н.Б., Нестеренко П.Н.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия
e-mail: andrey.u.l@mail.ru

Наиболее распространенными неподвижными фазами (НФ) для разделения углеводов методом гидрофильной хроматографии являются различные полярные сорбенты на основе силикагеля. В их число входят немодифицированный силикагель, а также сорбенты на основе силикагеля с химически привитыми нейтральными и основными группами, такими как амино-, диольные, амидные, цвиттер-ионные, циклодекстрины и другие. В зависимости от природы привитых функциональных групп реализуются различные типы взаимодействий между сорбатом и сорбентом, определяющих механизм удерживания и селективность разделения. В жидкостной хроматографии гидрофильных взаимодействий (ЖХГВ) это донорно-акцепторные, ван-дер-ваальсовые, гидрофобные, электростатические и образование водородных связей. Однако, в этом варианте хроматографии практически не изучена возможность использования координационных взаимодействий для изменения селективности разделения.

Большинство неподвижных фаз ЖХГВ на основе силикагеля с привитыми полярными группами, например, аминопропильными, обладает комплексообразующими свойствами, а в насыщенной металлами форме проявляет координационные взаимодействия аналогично лигандообменной хроматографии. Комплексообразование представляет собой процесс, заметно отличающийся своей высокой селективностью от физической адсорбции или ионного обмена, что позволяет успешно разделять соединения с похожими свойствами, такие как углеводы.

В данной работе изучена возможность использования в ЖХГВ силикагеля с привитыми группами 2-гидроксиэтилиминодиуксусной кислоты (ГИДК, рис. 1) в свободной форме (H^+ — форме) и в форме комплексов с ионами металла (Ca^{2+}, Pb^{2+} и La^{3+} формах) для разделения моно-, ди- и трисахаридов. Удерживание углеводов изучали при различных соотношениях ацетонитрил — вода в подвижной фазе, добавок других полярных растворителей и температуре хроматографической колонки.

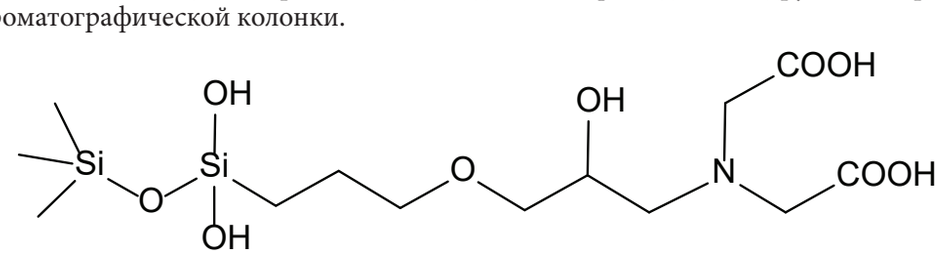


Рис. 1. Комплексообразующий сорбент Диасорб-130-ИДК в протонированной форме.

Изучены закономерности удерживания и разделения сахаров, а также их аномерных форм на ГИДК в H^+ — форме и в форме комплексов с ионами металла Ca^{2+} при температуре 30°С. При использовании сорбента, насыщенного ионами Pb^{2+} и La^{3+}, взаимное превращение аномеров ускоряется, и, за счет этого, улучшается форма хроматографических пиков. Было отмечено более сильное удерживание сахаров и улучшение разрешения между углеводами внутри групп, а также увеличение эффективности и селективности разделения сахаров на сорбенте, модифицированном ионами переходных металлов, по сравнению с сорбентом в H^+ — форме.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ОЧИСТКИ ВОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТХОДОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Лебедева О.Е., Соловьева А.А., Кононова М.И.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, ул. Победы, 85, Белгород, Российская Федерация, 308015, Кафедра общей химии

Главным назначением разрабатываемой технологии является эффективная очистка сточных вод и стоячих водоемов от органических загрязнителей при помощи ферментативных (пероксидазных) биокатализаторов.

Потенциальными потребителями являются компании, занимающиеся текстильной, пищевой, бумажной, полиграфической, кожевенной и косметической промышленностью, а также изготовлением красителей разного спектра (Полисинтез, Краски Белогорья, Белгородский лакокрасочный завод и т.д.), а также частные лица, столкнувшиеся с проблемой загрязнения воды.

Цель работы: разработка технологии очистки сточных вод от органических загрязнений методом ферментативного окисления с использованием в качестве источника фермента отходов растительного происхождения без выделения из них ферментов

В качестве растительного сырья использовалась навеска 0,5 г. очисток огурца обыкновенного (*Cucumis sativus* L.).

В данной работе проведена окислительная деструкция красителя бромфенолового синего (БФС) при участии пероксидаз, содержащихся в очистках огурца обыкновенного (Cucumis sativus L.) при pH 4,0–4,1 в присутствии пероксида водорода 0,1М.

В объем 25 мл буферного водного раствора БФС с разными концентрациями — от 9,6 до 132 мкМ помещали 0,5 г кожуры огурца. Реакцию запускали добавлением 0,1 мл 0,1 М раствора пероксида водорода, это считали временем начала реакции. Перемешивали содержимое в стаканах, переносили в кювету и регистрировали спектры поглощения в интервале длин волн 450–700 нм. В результате воздействия на раствор БФС пероксида водорода в присутствии растительных пероксидаз огурца обыкновенного наблюдали значительное уменьшение интенсивности поглощения при длинах волн 600 и 640 нм, что свидетельствует об уменьшении концентрации красителя. Эффективность удаления БФС варьировалась в зависимости от концентрации красителя, максимальное значение наблюдалось при 24 мкМ — 85%. При использовании только пероксида водорода без добавления растительного сырья или, наоборот, при отсутствии пероксида, не наблюдалось заметного снижения поглощения (не более 2%), то есть фермент катализирует окисление красителя пероксидом водорода в растворе.

Для получения кинетических характеристик изучаемой ферментативной реакции использовали схему Михаэлиса-Ментен. Параметры ферментативной реакции определялись линеаризацией графика зависимости начальной скорости пероксидазного окисления красителя от его концентрации в координатах Лайнуивера-Берка. Найдено, что для окислительной реакции деструкции БФС при температуре 25оС и pH = 4,1 константа Михаэлиса и максимальная скорость составляют 30,5 мкМ и 60,2 мкМ·мин–1, соответственно.

Таким образом начальные результаты демонстрируют предполагаемую эффективность пероксидазного окисления бромфенолового синего с участием пероксидазы огурца. В перспективе ферментативная окислительная деструкция может рассматриваться как альтернатива биодеградации.

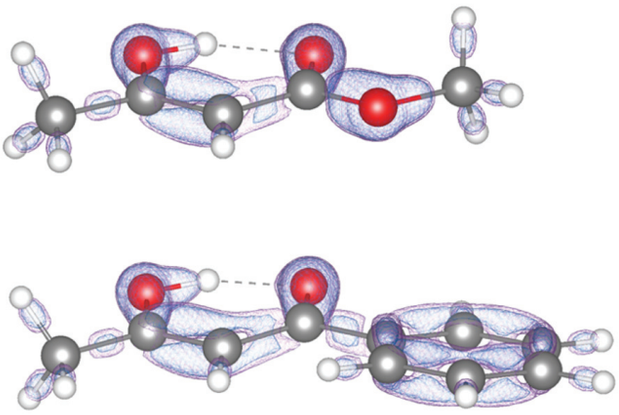
КЕТО-ЕНОЛЬНАЯ ТАУТОМЕРИЯ С ПОЗИЦИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Левина Е.О.[1,2], Хренова М.Г.[2,3], Астахов А.А.[4], Цирельсон В.Г.[5]

[1]*Московский физико-технический институт*
[2]*ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН*
[3]*МГУ им. М. В. Ломоносова*
[4]*Объединенный институт ядерных исследований*
[5]*РХТУ им. Д. И. Менделеева*

В данной работе исследовалось влияние электронной делокализации в молекулах енолов на положение равновесия в реакциях таутомерии β-дикетонов. Были рассмотрены ацетилацетон и его производные, содержащие группы с различными электронными эффектами (-Phe, -CF_3, -OCH_3, -OC_2H_5 и -NH_2), для которых доступны экспериментальные константы равновесия.

Анализ особенностей химического связывания, проведенный посредством новых квантово-химических дескрипторов (тензора делокализации, обменного и фермионного потенциалов), показал, что положение равновесия в реакциях таутомерии определяется паттернами электронной делокализации в C=C-C фрагменте енольных форм. Более стабильные енолы имеют более близкие по кратности связи C=C и C-C, что свидетельствует о более интенсивной делокализации электронов в области C=C-C связей (Рисунок 1). Эти особенности связаны с ограничениями в потенциальной и кинетической энергии, диктуемыми принципом Паули, то есть со статической и кинетической обменной корреляцией. Анализ обменного потенциала позволяет установить, что статическая



обменная корреляция (определяющаяся пространственной атомной структурой) определяет общие паттерны делокализации во всех молекулах енолов, не позволяя различить соединения, для которых характерно большее или меньшее присутствие енольной формы в равновесной смеси. Именно локальное уменьшение кинетической обменной корреляции (связанной с эффектами электронного движения) оказывается ответственно за увеличение стабильности определенных енольных форм. Данное утверждение прямо следует из особенностей распределения фермионного потенциала, который в отличии от обменного потенциала, учитывает кинетическую обменную корреляцию наряду со статической. Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 20-33-90021.

Рис. 1. Распределение первого собственного значения плотности тензора делокализации в менее (верхняя панель) и более (нижняя панель) стабильных енольных формах (изоповерхности 0.24 и 0.26 отмечены розовым и голубым). Большая степень слияния домена формально двойной связи C=C с доменом формально одинарной связи C-C указывает на большую степень делокализации электронов в C=C-C фрагменте.

ТЕТРААЛКИЛАММОНИЕВЫЕ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ: МЕХАНИЗМЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕГРАДАЦИИ И НЕИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА РАЗЛОЖЕНИЯ

Левин М.М., Иванов А.С., Архипова Е.А., Купреенко С.Ю.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет

Ионные жидкости (ИЖ) представляют большой интерес за счет своих уникальных физико-химических свойств, таких как высокая термическая и электрохимическая стабильность, низкое давление насыщенных паров и относительно высокая электропроводность. Такого рода соединения применяются в устройствах хранения и преобразования электроэнергии, в органическом синтезе и катализе.

В данной работе исследованы термические свойства ИЖ тетраалкиламмониевого ряда: трифторметансульфоната тетраэтиламмония ([Et_4N][OTf]), тетрафторобората тетраэтиламмония ([Et_4N][BF_4]) и тетрафторобората 5-азониаспиро[4,4]нонана ([SBP][BF_4]), структуры которых изображены на Рисунке 1. Методом дифференциального термического анализа определена их термическая стабильность. Установлены температуры начала разложения, которые составили 322 °C, 341 °C и 354 °C для [Et_4N][OTf], [Et_4N][BF_4] и [SBP][BF_4] соответственно. На основании результатов дифференциального термогравиметрического анализа (ДТГ), совмещенного с масс-спектрометрией отходящих газов, предложены основные пути термического распада ионных жидкостей. С целью разделения индивидуальных процессов проведена деконволюция кривых ДТГ, а также ионных токов, соответствующих определенным ионам.

Установлено, что при разложении ИЖ реализуются механизм элиминирования по Гофманну, а также обратная реакция Меншуткина (для тетрафтороборатов). Методами неизотермической кинетики на основе уравнений Киссинджера, Фридмана и Вязовкина рассчитаны энергии активации процессов разложения ИЖ. Для [SBP][BF_4] эти величины составили 120–150 кДж/моль, для [Et_4N][BF_4] — 200–300 кДж/моль, а для [Et_4N][OTf] — 100–300 кДж/моль. Профили зависимостей энергии активации от конверсии свидетельствуют о том, что разложение ИЖ представляет собой сложный многоступенчатый процесс, сочетающий параллельные и обратимые стадии, а также смену лимитирующих стадий.

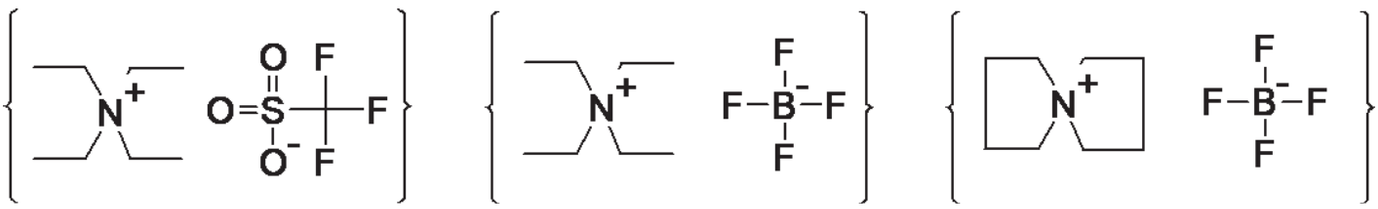


Рис. 1. Структуры исследуемых тетраалкиламмониевых ионных жидкостей: [Et_4N][OTf] (а), [Et_4N][BF_4] (б), [SBP][BF_4] (в).

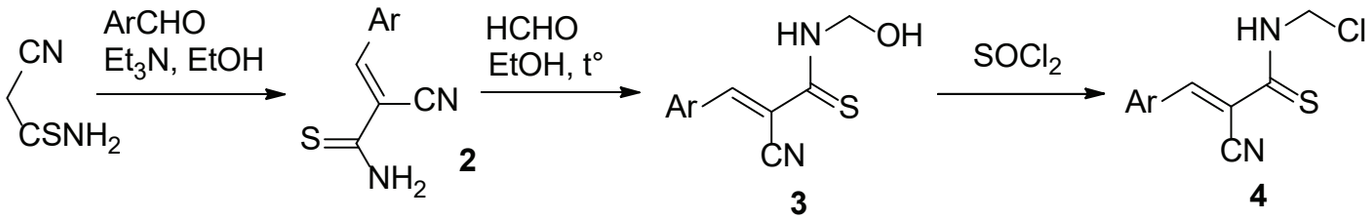
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-13-00217).

N-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)ТИОАМИДЫ: СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ

Левченко А.Г., Дахно П.Г., Доценко В.В.

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» г. Краснодар

Целью данного исследования являлся синтез N-(гидроксиметил)-тиоакриламидов, производных цианотиоацетамида, изучении их свойств и возможной биологической активности *in silico*. Цианотиоацетамид **1** зарекомендовал себя как удобный реагент для получения кислород-, серо- и азотсодержащих гетероциклов. Полученные производные цианотиоацетамида 1 тиоакриламиды **2** были введены в реакцию с 37%-ным HCHO в водно-спиртовой среде. Выход составил в среднем 55-65%. Полученные продукты **3** отличаются повышенной растворимостью в водном этаноле, в сравнении с исходными соединениями. Для подтверждения строения полученных соединений **3** были использованы методы ИК- и $^{1}H/^{13}C$ ЯМР-спектроскопии. Для оценки реакционной способности соединений **3** была проведена реакция с $SOCl_2$, в ходе которой образуются N-(хлорметил)тиоамиды **4**.



Для прогнозирования возможной биологической активности полученных соединений **3** и **4** был использован сервис Pass Online.

N-(Гидроксиметил)тиоамиды **3** с большей вероятностью проявляют свойства ингибиторов тирозинкиназ (87,4%), S-метилтрансферазы гомоцистеина (78,2%) и протеинкиназ (70,0%), также они могут проявлять противоопухолевые свойства (78,8%) и в меньшей степени — антипсориатические свойства (57,3%). К нежелательным эффектам прогноз относит гипоплазию коры надпочечников (67,9%) и анемию (53,8%). Для N-(хлорметил)тиоамидов **4** PASS Online предсказывает уменьшение вероятности ингибирующих свойств тирозинкиназы (78,3%) и протеинкиназы (67,5%), но при этом появляются свойства ингибитора хлоридпероксидазы (60,5%).

Вероятность антипсориатических свойств — наоборот, увеличивается (58,6%), также как и вероятность гипоплазии коры надпочечников (78,3%). Дополнительно возникают риски развития нейтрофильного дерматоза — синдрома Свита (66,3%). Молекулярный докинг с целью поиска возможных протеиновых мишеней для полученных соединений **3** проведен с использованием нового протокола протеин-лигандного докинга GalaxySagittarius на базе веб-сервера GalaxyWeb. На Рис. 1 показана визуализация комплекса соединения **3** (Ar = 4-ClC_6H_4) с урокиназой. В целом соединения **3** представляют интерес как потенциальные противоопухолевые агенты.

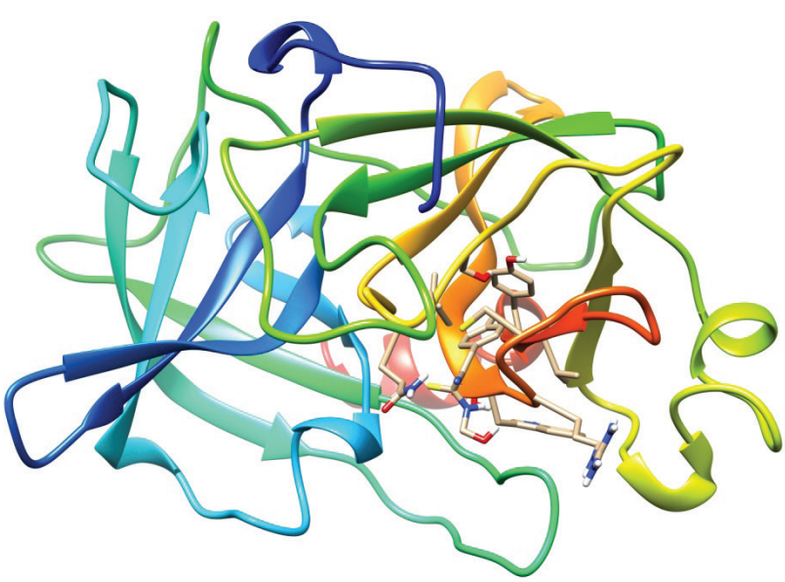


Рис. 1. Протеин-лигандный комплекс соединения **3** (Ar = 4-ClC_6H_4) с сериновой протеазой uPA –урокиназным активатором плазминогена (PDB ID 1C5Z, Uniprot ID P00749).

РЕАКЦИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ЗАМЕЩЕНИЯ В НЕВОДНОЙ СРЕДЕ: НОВЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ

Леончук С.С., Фальчевская А.С., Николаев В.А., Виноградов В.В.

ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО»

Подходы к синтезу новых функционалных материалов сегодня достаточно вариативны. Однако если дело касается синтеза металлических нано- и микро-структурированных материалов, то здесь особой простотой, удобством и продуктивностью отличается реакция гальванического замещения (РГЗ). В литературе за последние несколько лет появилось множество работ, связанных с созданием полых металлических капсул, трубок и других микро- и наночастиц замысловатой формы, которым находят самые разные варианты применения. Синтез таких материалов часто проводят с применением «жертвенных» (темплатных) частиц металлов. Особенно здесь выделяются жидкие при комнатной температуре металлические сплавы галлия, к примеру, эвтектический сплав галлия и индия. Такие сплавы легко диспергировать на микро- и нано-капли в воде и использовать для дальнейших операций. Но здесь стоит уделить внимание тому факту, что большая часть вариаций РГЗ осуществляется именно в водной среде, где, как известно, возможно протекание множества побочных процессов, а также существует объективная сложность в изменении окислительно-восстановительных потенциалов металлов.

В таком случае перевод реакции гальванического замещения в неводные (органические) среды имеет перспективу развития как новый метод синтеза функциональных материалов. Но сложность такого трансфера классической и простой окислительно-восстановительной реакции в органическую среду осложняется необходимостью подбора правильного растворителя, который бы имитировал воду в аспекте её растворяющей и диссоциирующей способности по отношению к неорганическим солям, но при этом был бы более индифферентным к интермедиатам реакции и не порождал побочных реакционных процессов, приводящих к нежелательным продуктам (как, к примеру гидролиз, протекающий в воде). За последние двадцать лет набрали особую популярность такие растворители, как ионные жидкости (или глубокие эвтектические растворители). Эти жидкие при комнатной температуре расплавы применяются не только в органическом синтезе, но и в создании различных функциональных материалов, в том числе и путем гальванического замещения. Однако их диэлектрическая проницаемость значительно ниже, чем у воды, в связи с чем слабее и их способность к растворению неорганических солей металлов, применяемых для РГЗ. В качестве нового подхода к выбору растворителей для РГЗ мы предлагаем комбинации ионных жидкостей с полярными апротонными органическими растворителями (ДМФА, ДМСО, пиридин, ТГФ, этиленкарбонат и т.п.) для получения оптимальных и даже уникальных свойств среды, необходимых для осуществления РГЗ.

В работе представлены результаты исследования образцов, синтезированных путем РГЗ между эмульсиями жидкого галлий-индиевого (GaIn) эвтектического сплава и растворами хлоридов меди, серебра, кобальта, никеля, цинка, гадолиния, рутения, германия и железа в среде смесей ДМСО и ДМФА и наиболее популярных на сегодня ионных жидкостей: [BMIM]BF4 (1-бутил-3-метилимидазолия тетрафторборат) и [BMIM]PF6 (1-бутил-3-метилимидазолия гексафторфосфат). Выделены уникальные свойства данных смесей в ряде случаев. Установлен фазовый, элементный и структурно-групповой состав синтезированных образцов (порошков), а также их морфология методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), энергодисперсионного анализа (ЭДА), рентгенофазового анализа (РФА) и ИК-спектроскопии. Сделаны прогнозы на будущее в применения РГЗ для синтеза функциональных материалов.

ИЗМЕНЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЙ ОКСИДА ГРАФЕНА В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМОСТАТИРОВАНИЯ

Ломовкин В.В.[1,2], Столярова Д.Ю.[2], Рабчинский М.К.[3], Гудков М.В.[4], Чвалун С.Н.[2]

[1]*Московский физико-технический институт (НИУ)*

[2]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"*

[3]*Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН*

[4]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН*

В последнее десятилетие так называемые «умные/интеллектуальные» материалы, благодаря способности варьировать свои химические и физические свойства в ответ на прикладываемые стимулы или изменение внешних условий, притягивают к себе всё больше внимания учёных. Стимул-чувствительные полимерные композиты графена и его функционализированных форм занимают особое место среди «умных» материалов. Методы получения графена достаточно просты и масштабируемы, а регулируемая в широком диапазоне функционализация способствует выгодному сочетанию его с различными полимерами. Для создания композитов чаще всего используют графен, полученный в результате восстановления оксида графена (ОГ). Метод Хаммерса является одним из наиболее распространённых способов получения ОГ путём жидкофазного расслоения графита. Он за-

ключаются в воздействии сильными окислителями на графит, что способствует получению большого количества функциональных кислородсодержащих групп, благодаря которым ОГ образует стабильные суспензии в воде и других полярных растворителях (например этиленгликоль, N-метил-2-пирролидон, ДМФА). Как показано в работах Giudice F. Del и др. в 2018 и Vasu K.S. и др. в 2013, концентрация, латеральный размер частиц и степень восстановления ОГ влияют на динамические вязкоупругие характеристики и вязкость водных суспензий ОГ. В исследовании Kumar P. V. и др. 2014 года был рассмотрен способ модификации ОГ путём мягкой термической обработки, а также проиллюстрировано, что в её результате спектр оптического поглощения ОГ смещается и понижается удельное поверхностное сопротивление. Одной из задач данной работы является изучение влияния изменений в электронной структуре слоев ОГ на взаимодействие частиц между собой и дисперсионной средой в суспензиях, что отразится на реологических параметрах водных суспензий ОГ.

В работе были изучены изменения физических свойств водных суспензий ОГ в процессе контролируемого термостатирования. Получена серия образцов седиментационно устойчивых водных суспензий ОГ со временем термической обработки от 0 до 120 часов при 80 °C и концентрацией дисперсной фазы 0.8 масс.%. В ходе реологических исследований были проведены серии осцилляционных тестов в режимах амплитудной и частотной развёртки, а также серия ротационных измерений в режимах с контролируемым напряжением сдвига и контролируемой скоростью сдвига, при t = 22 °C. Также был измерен электрокинетический потенциал частиц.

Кривые течения для всех образцов суспензий были получены и проанализированы, представлены зависимости реологических характеристик и ζ-потенциала от времени мягкой термической обработки суспензий ОГ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, 20-04-60458.

ФОЖАЗИТ КАК НЕПОДВИЖНАЯ ФАЗА ДЛЯ ВЭЖХ

Лузанова В.Д., Рожманова Н.Б., Нестеренко П.Н.
Химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова

В настоящее время наблюдается огромный интерес к использованию микропористых сорбентов для разделения соединений различных классов. Пористая структура цеолитов с порами определенного размера определяет их молекулярно-ситовые, адсорбционные свойства, а также дополнительную способность к ионному обмену с катионом, удерживаемом в порах с размером 0,5 — 1,2 нм. Эти свойства определяют чрезвычайно высокую селективность цеолитов, которая определяется значениями кинетических диаметров сорбатов. Применение цеолитов в качестве сорбентов широко используется в газо-адсорбционной хроматографии для разделения газов и низкомолекулярных органических соединений. Использование сорбционных материалов на основе цеолитов в высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) рассмотрено лишь в единичных работах. Трудности применения цеолитов в этой области связаны с влиянием сольватации поверхности цеолита элюентом и изменением эффективного размера пор в стенках цеолитов, а также особенностями диффузии разделяемых соединений в “застойных зонах” жидкости внутри структуры сорбента. Представляет интерес изучение адсорбционных свойств широкопористых цеолитов в качестве неподвижных фаз для ВЭЖХ.

В работе использовали колонки из нержавеющей стали размером 100×4,6 мм и 50×4,6 мм, заполненные фожазитом или цеолитом 13Х со средним размером частиц 5 мкм. В качестве наполнителя колонок использовали образец Ц-202-98 13Х (ВНИИНП, Москва). Данный сорбент был охарактеризован с использованием методов низкотемпературной адсорбции азота (BET), рентгенофлуоресцентной спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии. В данном сорбенте имеется два вида микропор с размером 0,7 и 1,2 нм, а удельная поверхность составляет 618 м^2/г. Методом рентгеновской дифракции подтверждено, что данный сорбент имеет структуру типичную для фожазита (FAU).

В условиях нормально-фазовой ВЭЖХ изучено удерживание ряда модельных соединений. На первом этапе был изучен молекулярно-ситовой эффект для цеолита. В качестве сорбатов для этой цели использовали соединения с различными значениями кинетических диаметров, отражающих способность соединений проникать в узкие поры. На втором этапе изучали удерживание низкомолекулярных соединений с кинетическими диаметрами в диапазоне от 0,23 до 0,70 нм в метаноле в зависимости от их полярности. Найдено, что колонка удерживает только соединения с полярностью (P') выше, чем у метанола. Порядок элюирования соответствует возрастанию полярности соединений, при этом наиболее сильно удерживается вода. Изучено влияние температуры колонки на удерживание воды на цеолите и определены теплоты адсорбции (ΔH) из зависимости Вант-Гоффа.

В оптимальных условиях показана возможность прямого определения содержания примесей воды в различных органических растворителях с использованием рефрактометрического и спектрофотометрического детекторов. Так, в образце ацетонитрила (Реахим, х.ч.) найдено 1,35 % воды, что несколько выше нормируемого, согласно техническим условиям, содержания менее 1%. Построен градуировочный график и найдены пределы линейности и обнаружения содержания воды в различных полярных органических растворителях.

СОЗДАНИЕ ПОРИСТЫХ ГИДРОГЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АКРИЛАТОВ И КОЛЛАГЕНА

Лунева О.В., Кашурин А.И., Успенская М.В.
Университет ИТМО, Санкт-Петербург

Гидрогели представляют собой гидрофильные трехмерные сетки, образованные посредством химических и/или физических связей. Использование гидрогелей в биомедицине определяется их уникальными свойствами, среди которых — биосовместимость, биоактивность, биоразлагаемость и т. д. В частности, подобные материалы широко применяются в качестве раневых повязок, для которых одной из ключевых характеристик является сорбционная способность. Сорбционную способность возможно варьировать путем увеличения концентрации сшивающего агента.

Именно поэтому целью настоящей работы явилось исследование сорбционных свойств пористых гидрогелей на основе акриловой кислоты, акриламида и коллагена с различной долей сшивающего агента, полученных методом свободно-радикальной полимеризации в водной среде. В качестве инициирующей системы использовали окислитель — пероксидисульфат аммония и восстановитель — N,N,N',N'-тетраметилэтилендиамин. В качестве сшивающего агента был использован, N, N-метилбисакриламид.

Таблица 1. Некоторые сорбционные и кинетические характеристики акриловых композитных материалов

Концентрация сшивающего агента, %	Q, г/г	$k_{2*}10^{-5}$, г/ммоль·мин	n	$k_{*}10^{-3}$, мин$^{-1}$
0,2	150	4,00	0,9	4,00
0,4	140	2,00	0,9	3,00
0,6	130	3,00	0,9	3,00
0,8	100	3,00	0,8	5,00
1,00	90	4,00	0,7	7,00

В таблице 1 представлены некоторые характеристики набухания новых гидрогелевых коллаген-содержащих композитов в зависимости от доли сшивающего агента в дистиллированной воде (константа скорости набухания (k_2), коэффициент диффузии (n), параметр сетки по Фику (k)). Гидрогелевые композиции, приготовленные с массовой долей сшивающего агента в системе 0,2 % обладали максимальной сорбционной емкостью в дистиллированной воде равной 150 г/г. Наименьшей сорбционной емкостью отличились образцы с массовой долей сшивающего агента в системе 1%, значение которой равняется 90 г/г. Увеличение концентрации сшивающего агента приводит к большему числу поперечных связей между цепями сополимера. Полученная в результате сильно сшитая структура создает затруднения для релаксации полимерных цепей, что в конечном итоге препятствует набуханию и удержанию молекул растворителя. В ходе работы было установлено, что полимерная гидрогелевая композиция с массовой долей сшивающего агента 0,2% относительно массы акриловых мономеров обладает наилучшими характеристиками в дистиллированной воде, а именно: коэффициент диффузии n = 0,9; параметр сетки Фика $k = 4{,}00_{*}10^{-3}$мин$^{-1}$; константа скорости набухания $k_2 = 4{,}00*10^{-5}$ г/(ммоль·мин).

СИНТЕЗ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ КАТИОНАМИ МЕДИ (II)

Макарян А.В., Тарасенко Е.А., Смальченко Д.Е., Лебедева О.Е.
ФГАОУ ВО Белгородский государственный национальный исследовательский университет (НИУ «БелГУ»)

Применение материалов, несущих в своей структуре необходимые для роста и развития растений микроэлементы и обеспечивающих их медленное и постепенное высвобождение, становится все более популярным направлением разработки функционализированных материалов. С участием меди в тканях растения происходит синтез белков, обеспечивающих водоудержание в растительных тканях, медь препятствует бактериальным заболеваниям растения, участвует в процессе фиксации азота растениями.

Целью настоящей работы является синтез медьсодержащих слоистых двойных гидроксидов со структурой гидроталькита, обеспечивающих пролонгированное высвобождение ионов меди в почву.

Синтез медьсодержащих слоистых двойных гидроксидов проводили методом соосаждения при постоянном pH, прекурсорами служили нитраты металлов. В процессе синтеза pH поддерживался на уровне 8,5-9,5 (поддержание pH в заданном диапазоне осуществляли 1М раствором NaOH). Последующее «старение» образца про-

водили при комнатной температуре в течение 48 часов. В последующем образец декантировали, отмывали дистиллированной водой и сушили на воздухе при температуре 25°С в течение 48 часов.

Был синтезирован и охарактеризован образец с 1% замещением двухвалентного катиона магния на катионы меди. Определен фазовый состав полученного образца. На основании порошковой рентгеновской дифрактограммы (РФА) (рис. 1) видно, что присутствует характерный для гидроталькитоподобных материалов набор рефлексов, посторонних фаз не обнаружено. По данным РФА были рассчитаны параметры кристаллической решетки синтезированных образцов. Параметр *a* характеризует расстояние между соседними катионами в бруситоподобном слое и рассчитывается как удвоенное межплоскостное расстояние отражения (110). Величина *c* характеризует межслоевое расстояние и рассчитывается как удвоенная величина d для первого, наиболее интенсивного рефлекса на дифрактограмме (отвечающего плоскости (003)). Для исследуемого образца параметры ячейки составили: *a = 3,056 нм, c = 23,476 нм, c/a = 7,682.*

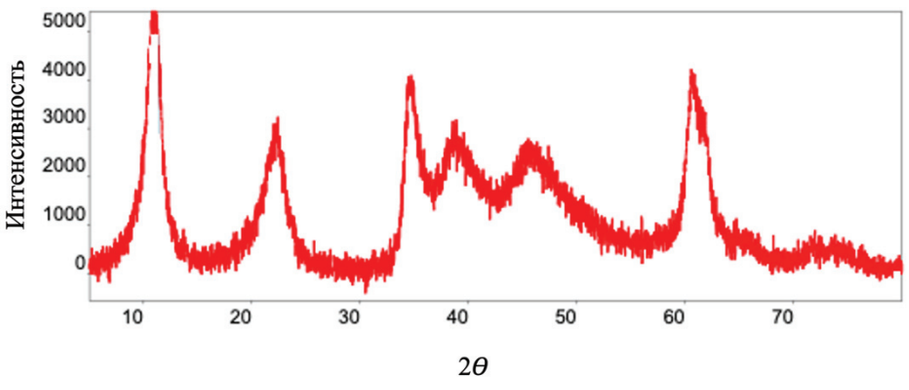


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма синтезированного образца (абсцисса — 2θ, град., ордината — интенсивность, условные единицы).

Выполнена оценка способности образца к высвобождению ионов меди.

ВЛИЯНИЕ КРУПНЫХ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ НАПОЛНИТЕЛЯ С ДИАМЕТРОМ БОЛЕЕ 50 МКМ НА ПРОЧНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕРМОПЛАСТИЧНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ

Максимова Ю.М., Харламова К.И.

«МИРЭА — Российский технологический университет»
(Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Москва, Россия

Дисперсно-наполненные полимерные композиционные материалы (ДНПКМ) широко используются в различных областях науки и техники (автомобилестроение, конструкционные, строительные и материалы специального назначения, др.).

При получении ДНПКМ особое влияние на прочностные характеристики оказывают геометрические параметры частиц наполнителя, морфология его поверхности и содержание.

Для описания дисперсной структуры ДНПКМ была предложена обобщенная модель, описываемая в рамках обобщенных (Θ, B, M, $S_{н,}$ $a_{ср}$, $a_{ср1}$) и приведенных (θ/B, θ/$S_{н}$, $a_{ср}$/d, $a_{ср1}$/d) параметров.

Обобщенный параметр Θ учитывает долю полимерной матрицы, форму, размер и максимальную упаковку наполнителя, а также структуру дисперсной фазы и позволяет провести классификацию дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов по типам структур: разбавленные (РС), низконаполненные (ННС), средненаполненные СНС (СНС-1 — до предела текучести, СНС-2 с пределом текучести), высоконаполненные (ВНС), сверхвысоконаполненные

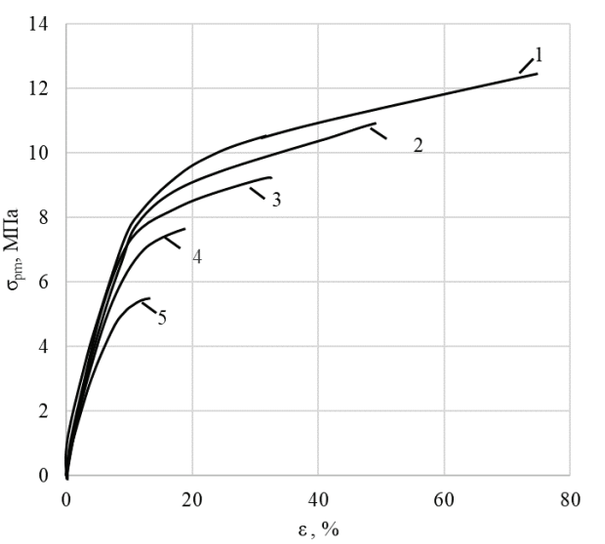


Рис. 1. Зависимость напряжения при разрыве (σ_{pm},МПа) от относительной деформации (ε, %) для ДНПКМ на основе ПЭНП+ПСМ-250: 1- Θ = 1 об. д. (РС), 2- Θ = 0,90 об. д. (РС), 3- Θ = 0,75 об. д.(ННС), 4- Θ = 0,60 об. д.(СНС-1), 5 — Θ = 0,45 об. д.(СНС-2)

(СВНС). Приведенные параметры учитывают соотношение различных частей полимерной матрицы (Θ, В, М) при увеличении содержания наполнителя $\varphi_н$.

В работе получены ДНПКМ на основе полиэтилена низкой плотности 10803-020 (ПЭНП, Rosneft, Россия) и крупных дисперсных наполнителей со средним диаметром частиц 250 (ПСМ — 250) и 55 (ПСМ — 55) мкм (Inoteck, Россия) с разными типами дисперсных структур.

Показано, что с увеличением содержания крупных частиц (> 50 мкм) прочность при растяжении снижается. Установлено, что оптимальным типом дисперсной структуры для ДНПКМ на основе ПЭНП с крупными частицами (>50 мкм) является разбавленный (РС), описываемый следующими значениями параметров: Θ <0,9; θ/В >30, $\theta/S_н$> 400.

АТОМНО-СЛОЕВОЕ ОСАЖДЕНИЕ ТИТАН-МОЛИБДЕНОВЫХ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ $TICL_4$, $MOOCL_4$ И H_2O

Максумова А.М.[1], Максумова И.М.[1], Абдулагатов И.М.[1], Абдулагатов А.И.[1,2]

[1]*Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Дагестан, Россия*
[2]*ООО АСО НаноТех, г. Махачкала, Дагестан, Россия*

Применение TiO_2 в качестве фотоактивного материала ограничено в связи с низкой фоточувствительностью TiO_2 в видимой области спектра, вследствие значения ширины запрещенной зоны, равной ~3,2 эВ, что соответствует УФ области спектра. Это не позволяет использовать фотокаталитические свойства TiO_2 при естественном или искусственном освещении. Одним из методов, позволяющим сместить область поглощения в видимую часть спектра, является легирование кристаллической решетки TiO_2 атомами металлов. В данной работе проведено исследование процесса термического атомно-слоевого осаждения (АСО) тонких пленок оксида титана, легированного молибденом ($Ti_xMo_yO_z$). Пленки осаждали по схеме, представленной на рисунке, посредством повторяющихся поверхностных реакций между $TiCl_4$, $MoOCl_4$ и H_2O. Процесс, рассмотренный в данной работе, является объединением двух процессов — АСО TiO_2 и MoO_3.

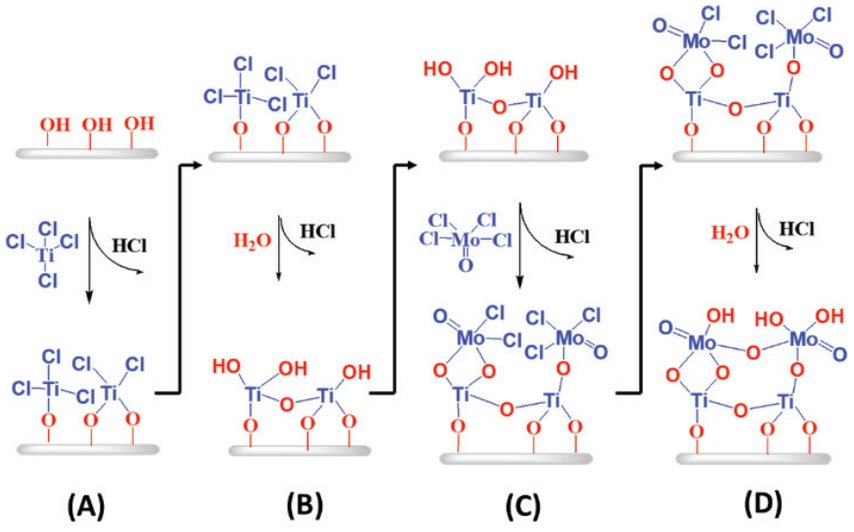


Рис. 1. Последовательность подачи реагентов в суперцикле процесса АСО $Ti_xMo_yO_z$

Предварительные термохимические расчеты реакций галогенидов с H_2O: $TiCl_4(г) + 2H_2O(г) \rightarrow TiO_2 + 4HCl(г)$, ΔG (150 °C) = -22,72 ккал; и $MoOCl_4(г) + 2H_2O(г) \rightarrow TiO_2 + 4HCl(г)$, ΔG (150 °C) = -17,24 ккал показали, что реакции протекают самопроизвольно. Рост пленки наблюдали *in situ* в режиме реального времени методом кварцевого пьезоэлектрического микровзвешивания (КПМ) в диапазоне температур от 115 до 180°C. В работе были рассмотрены процессы роста пленок $Ti_xMo_yO_z$ с различным соотношением субциклов $TiCl_4$-H_2O и $MoOCl_4$-H_2O в суперцикле. Во всех случаях наблюдали линейный рост пленки с количеством СО циклов. Поверхностные реакции галогенидов и H_2O носили самоограничивающийся характер. Данные КПМ показали возможность использования рассмотренной химии поверхности для осаждения тонких пленок $Ti_xMo_yO_z$. Анализ КПМ данных показал, что вместе с ростом пленки протекают и процессы частичного травления на этапе напуска $TiCl_4$. Предположительно, данное явление связано с «конверсией» поверхностных молибденоксидных групп в TiO_x путем перехода -Cl лигандов $TiCl_4$ на атомы Mo с последующим его переходом в газовую фазу по реакции $MoO_3 + TiCl_4(г) \rightarrow TiO_2 + MoOCl_4(г)$, ΔG (150 °C) = -4,7 ккал. Явление конверсии при осаждении пленки, как правило, приводит к отклонению состава получаемых пленок от правила смесей.

Работа выполнена в рамках государственного задания FZNZ-2020-0002.

ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОКОНТЕЙНЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ, ЗАГРУЖЕННЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫМ ПРЕПАРАТОМ СУНИТИНИБОМ, С РАКОВЫМИ КЛЕТКАМИ HCT116

Максутова Д.Е.[1], Первушин Н.Ю.[2], Гонгальский М.Б.[1], Осминкина Л.А.[1]

[1]*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Физический Факультет, Москва, Российская Федерация*

[2]*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Факультет фундаментальной медицины, Москва, Российская Федерация*

В данной работе изучена токсичность in vitro наночастиц пористого кремния, в поры которых было загружено химиотерапевтическое лекарство Sunitinib malate (СБ) (СБ-НЧ ПК), при их взаимодействии с клетками колоректального рака HCT116. Проведена диагностика взаимодействия СБ-НЧ ПК с клетками с помощью таких оптических методов, как микро-спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) и люминесцентная микроскопия.

Водные суспензии НЧ ПК были получены измельчением пленок пористого кремния в планетарной шаровой мельнице. Методом динамического рассеяния света был измерен диаметр и ζ-потенциал НЧ ПК до и после загрузки СБ, что составило 109 нм и -54 mV для НЧ ПК и 180 нм и -48 mV для СБ-НЧ ПК. С помощью метода спектрофотометрии оценена эффективность загрузки СБ в поры наночастиц, которая составила 50% по массе.

Методами Вестерн-блот анализа и проточной цитометрии было показано, что СБ-НЧ ПК запускают эффективную гибель опухолевых клеток после 24 часов инкубации, начиная с 25 мкМ, а непосредственно СБ — с 5 мкМ.

Методом КРС показана интернализация СБ-НЧ ПК при их инкубации 24 часа с клетками. Концентрация СБ составляла 10 мкМ. В спектре КРС наблюдаются пики на характерных частотах кристаллического кремния, СБ и молекул клетки, среди которых сахара (глюкоза, манноза, трегалоза) и аминокислоты (гистидин, аланин).

Размер нанокристаллов кремния, рассчитанный по положению максимума спектра КРС составил ~ 4.5 нм. Методом люминесцентной микроскопии показана локализация наноконтейнеров через 24 часа инкубации в цитоплазме клеток.

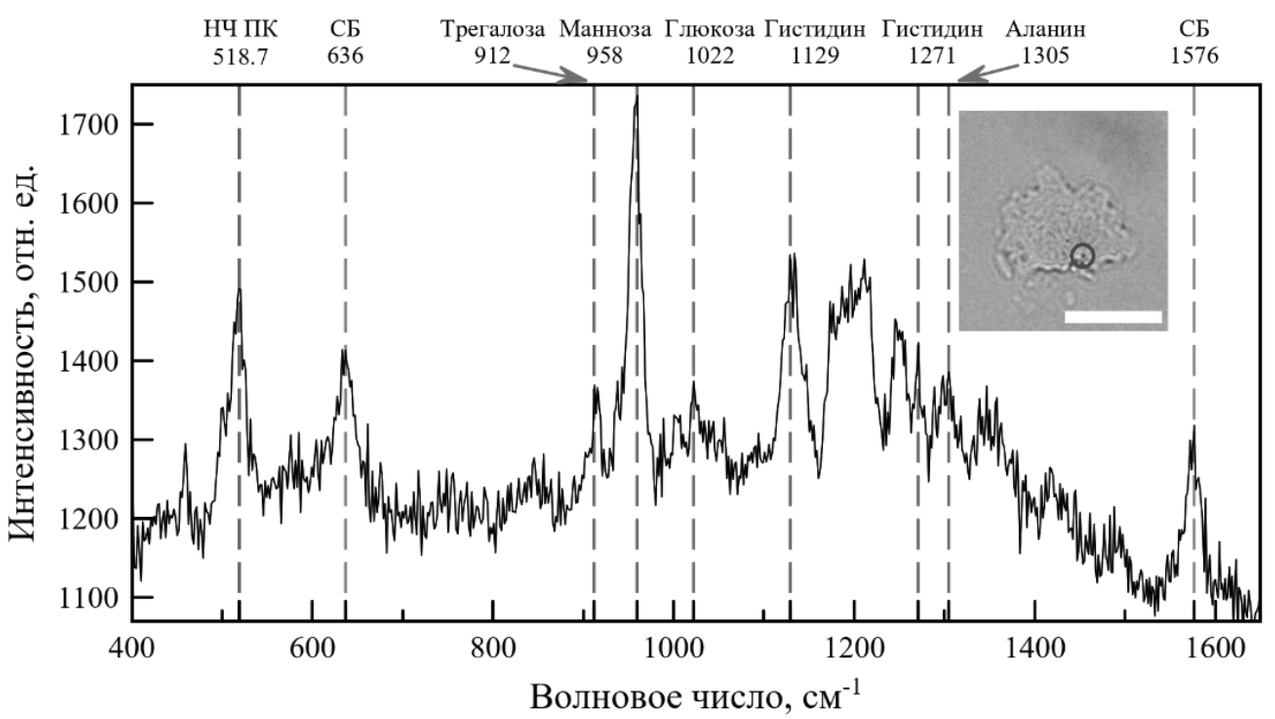


Рис. 1 Спектр КРС СБ-НЧ ПК при их 24 инкубации с клетками HCT116.
На вставке к рисунку представлена оптическая микрофотография клетки HCT116 с НЧ ПК; кругом обведена область с НЧ ПК, от которой был получен спектр КРС. Шкала 20 μm.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-72-10131.

ОСОБЕННОСТИ ГИДРОЛИТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЭТИЛЕНОКСИДА С ЛАКТИДОМ, ЭТИЛЕНОКСИДА С КАПРОЛАКТОНОМ ЛИНЕЙНОЙ И РАЗВЕТВЛЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ МОНОСЛОЯХ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКИХ СРЕД РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

Малахова Ю.Н.[1,2], Пономаренко Е.А.[1], Авдиевская Е.В.[1], Фатеева Е.С.[1], Микушева А.Д.[1], Ступников А.А.[2], Чвалун С.Н. [1,2,3]

[1]РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова
[2]НИЦ «Курчатовский институт»
[3]ИСПМ РАН

Блок-сополимеры этиленоксида с лактидом, этиленоксида с капролактоном содержат полиэфирный блок, способный к гидролитическому разложению. Амфифильная природа блок-сополимеров способствует их самоорганизации в ленгмюровские слои на поверхности жидкостей различного состава. Исследование гидролиза сложноэфирной связи в ленгмюровских слоях позволяет исключить стадию диффузии реагентов и продуктов гидролиза непосредственно к молекуле полимера. Изменение pH и/или ионной силы жидкой среды может оказывать влияние на кинетику гидролитического разложения.

Целью работы было сформировать и исследовать ленгмюровские слои блок-сополимеров этиленоксида с лактидом, этиленоксида с капролактоном линейной и разветвленной структуры на поверхности водных растворов различного состава (H_2O pH7, H_2O+HCl pH 2, 3.1, 4.3, 5.4, 6, H_2O+KOH pH 8.3, 10.5, 11.6, H_2O+NaCl pH6-7), а также изучить кинетику гидролитического разложения данных блок-сополимеров в ленгмюровских слоях.

Исследование ленгмюровских монослоев было выполнено комплексом методов: измерением поверхностного давления, поверхностного потенциала и микроскопией под углом Брюстера. В результате были получены изотермы поверхностного давления, поверхностного потенциала в циклах сжатия-расширения ленгмюровских слоёв, изобары изменения площади межфазной поверхности от времени при варьировании условий гидролитического разложения. Кинетика гидролитического разложения (на основе изобар) была аппроксимирована уравнением псевдо-первого порядка по модели без учёта концевых групп с двумя параметрами: константа реакции и изменение площади вследствие гидролиза случайной сложноэфирной связи в цепи и параллельно протекающего процесса растворения коротких сегментов.

Увеличение длины гидрофобного блока приводит к смещению изотерм поверхностного давления и поверхностного потенциала в сторону увеличения площадей на молекулу и повышению поверхностного давления фазового перехода из жидкорасширенного в жидкоконденсированное состояние в области плато на изотермах поверхностного давления и поверхностного потенциала. Для блок-сополимеров этиленоксида с капролактоном методом микроскопии под углом Брюстера визуализирована двумерная кристаллизация в области фазового перехода.

Изменение pH водных растворов в кислую область или изменение ионной силы (от H_2O к H_2O+NaCl) приводило к смещению изотерм поверхностного давления и поверхностного потенциала в сторону увеличения площадей на молекулу, а в щелочную область — в сторону уменьшения площадей на молекулу для исследованных блок-сополимеров. Обнаружено, что изменение pH водных растворов как в сильнокислую, так и сильнощелочную области приводит к увеличению скорости гидролитического разложения блок-сополимеров этиленоксида с лактидом, этиленоксида с капролактоном линейной и разветвленной структуры в ленгмюровских слоях.

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИМЕТИЛАМИНО-ЗАМЕЩЁННЫХ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ В ПРОТОНИРОВАННОЙ И НЕПРОТОНИРОВАННОЙ ФОРМАХ

Медянцев Е.С.[1,2], Шпотя В.А.[1], Лобова Н.А.[1,2]

[1]Московский физико-технический институт
[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Центр Фотохимии РАН

Рассмотрено фотофизическое поведение красителей DAST и DASPI при изменении pH среды. Исследование было проведено методами спектроскопии, ядерного магнитного резонанса, а также расчётными методами квантовой химии.

Появление заряда на атоме азота деметиламино-группы вследствие протонирования приводит к укорачиванию хромофора красителя и выведению атома азота из сопряжения. При этом, длина волны поглощения сокращается более чем на 100 нм (λ = 450 нм для непротонированного раствора красителя в воде и λ = 330 для

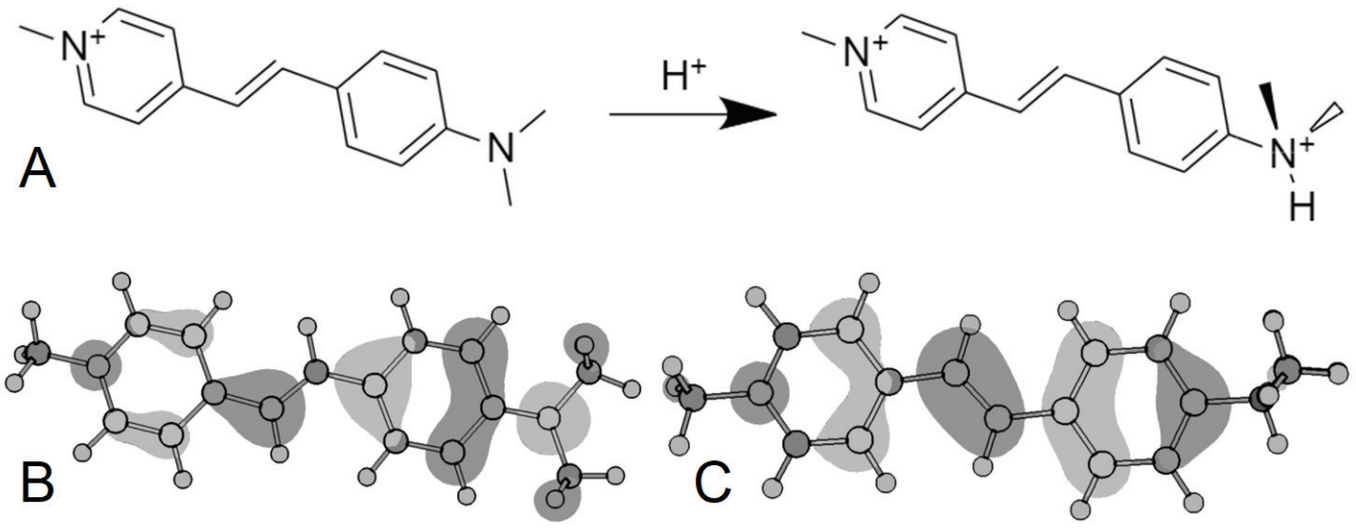


Рис. 1. Протонирование хромофора красителя DASPI/DAST (A) и рассчитанные ВЗМО непротонированной формы (B) и протонированной формы (C) красителя.

протонированного), что хорошо согласуется с теоритическими расчётами методом функционала плотности ($\Delta\lambda \approx 100$ нм).

Данные красители являются перспективными в области разработки супрамолекулярных систем типа «гость хозяин». Комплексы данного типа обладают высокой устойчивостью к фотодеструкции, что делает исследование этих систем особенно важным в области разработки органических лазеров и материалов, обладающих нелинейными оптическими свойствами.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ И ПЕРОВСКИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Мелихова Д.О.[1], Константинова К.М.[1], Иштеев А.Р.[1], Диденко С.И.[2]

[1] *НИТУ «МИСИС», Лаборатория перспективной солнечной энергетики, Москва, Россия*
[2] *НИТУ «МИСИС», Кафедра полупроводниковой электроники и физики полупроводников, Москва, Россия*

Сцинтилляторы — вещества, излучающие свет при поглощении ионизирующего излучения. Они используются в детекторах ионизирующего излучения, применяемых в различных сферах таких как атомная промышленность, ускорители частиц. В настоящее время одним из более распространенных сцинтилляторов является смесь на основе органических полимеров:1,4-бис (5-фенилоксазол-2-ил) бензола (POPOP) и паратерфенила(PTP) в полистерене. Однако проблемой таких сцинтилляционных материалов является низкая устойчивость к радиации.

В качестве альтернативы органическим сцинтилляторам в данной работе предложены материалы на основе неорганических композиций перовскитных квантовых точек. Перовскит — перспективный полупроводниковый материал, обладающий высокими свойствами фото- и радиолюминесценции. Перовскитные квантовые точки(КТ) — нанокристаллы перовскита, покрытые слоем органического стабилизирующего агента(лиганда). Основная особенность КТ — изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от размера наночастицы. Также важным свойством КТ является Стоксов сдвиг — разница между длинами волн пиков поглощения и фотолюминесценции, что позволяет избежать перепоглощения материала.

В исследовании сравниваются оптические свойства сцинтилляционных материалов на основе органических полимеров и перовскитных КТ. Для сравнения использовались растворы КТ на основе перовскита $CsBr{\cdot}PbBr_2$ с бромидом октиламмония в качестве лиганда, а также POPOP и PTP в толуоле. Полученные образцы были охарактеризованы методами спектрофлуориметрии и спектрофотометрии. По результатам спектрофлуориметрии, пик фотолюминесценции падает на 418 нм в случае POPOP, на 344 нм в случае PTP и на 505 нм в случае КТ.

ОЦЕНКА МЕСТНОЙ ТОКСИЧНОСТИ БИОПЛАСТИЧЕСКОГО РАНЕВОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ДЕРМЫ СВИНЬИ

Мелконян К.И.[1], Русинова Т.В.[1], Козмай Я.А.[1], Асякина А.С.[1,2], Солоп Е.А.[1,2], Веревкин А.А.[1]

[1]*ФГБОУ ВО КубГМУ Минздрава России*
[2]*ФГБОУ ВО КубГУ*

На сегодняшний день в реконструктивной восстановительной хирургии для оптимизации регенерации поврежденных тканей используют собственные ткани пациента (аутотрансплантаты), но возможность развития осложнений и ограниченность их размеров сужают область применения данного метода. В связи с этим важным является разработка биосовместимых материалов на основе естественных биополимеров, преимущественно алло- и ксеногенного происхождения с использованием методов тканевой инженерии. Создаваемые материалы должны обладать оптимальной биосовместимостью, не быть иммуногенными и цитотоксичными. Стоит отметить, что наиболее подходящим материалом для их создания является дерма свиньи, состав и структура которой сходны с дермой человека. Таким образом, целью данного исследования является оценка местной токсичности биопластического раневого покрытия (БПМ) на основе дермы свиньи. Исследование было одобрено локальным Независимым этическим комитетом ФГБОУ ВО КубГМУ Минздрава России. Для получения образцов дермы с боковой поверхности кожи поросёнка породы Ландрас (возраст 4 месяца) удаляли эпидермис с помощью электродерматома, после чего забирали образцы дермы толщиной 0,5±0,05 мм. Далее их обрабатывали при температуре 25°С смесью 5% раствора NaOH (Вектон, Россия) и 3% раствора H_2O_2 (Йодные Технологии и Маркетинг, Россия) в соотношении 1:1, при гидромодуле 1:5, в течение 48 часов, после чего отмывали в деионизированной воде до стабилизации pH. После обработки образцы БПМ подвергались рутинному гистологическому анализу. Проводили количественное определение содержания ДНК с использованием набора реагентов Dneasy Blood and Tissue Kit (Qiagen, Швеция) по протоколу фирмы-изготовителя. Далее проводилась подкожная имплантация образцов БПМ в межлопаточной области крыс (n=10) породы Wistar возрастом 6 месяцев, массой 260±20 г. На 14-е сутки после подкожного введения образцов выполняли их эксплантацию и проводили морфологический и гистологический анализ.

Образцы БПМ после стабилизации pH стали полупрозрачными, а их средняя толщина составила 1,0±0,05 мм. Гистологический анализ с окрашиванием гематоксилином-эозином показал, что структура была преимущественно гомогенна и имела вид оксифильной массы, представленной разнонаправленными тяжами пучков коллагеновых волокон. Количество ДНК в БПМ составляло 47,95±2,03 нг/мг, при этом его содержание в нативной дерме было 187,96±5,21 нг/мг, что обеспечивает относительную неиммуногенность БПМ. У животных на 14-е сутки после подкожной имплантации образцов отсутствовали макроскопические признаки воспаления и не наблюдалось нагноений и отека мягких тканей в области имплантации, а также признаков лимфоцитарно-макрофагальной инфильтрации в эксплантированных образцах и подлежащих тканях.

В результате проведенной работы было выявлено, что созданный нами биопластический материал не сохранял структуру нативной дермы, при этом количество ДНК в нём значительно снижалось, что указывало на потенциальную неиммуногенность биоматериала. Проведённые подкожные тесты показали отсутствие видимых признаков местной тканевой реакции. Полученные данные указывают на перспективность изучения свойств полученного материала и дальнейшей разработки методики с целью максимального сохранения структуры дермы.

КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ 6,8-ДИНИТРОТРИАЗОЛО[1,5-А] ПИРИДИНОВ ПО ДАННЫМ ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА И КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Мельников И.Н.[1], Киселев В.Г.[1,2], Далингер И.Л.[3], Муравьев Н.В.[1], Пивкина А.Н.[1]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук*
[2]*Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук*
[3]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук*

Одним из перспективных классов энергетических материалов (ЭМ) являются гибридные гетероциклические соединения. Среди их достоинств выделяют высокую плотность, повышенную термическую стабильность, а также сниженную чувствительностью к механическим воздействиям по сравнению с известными энергетическими материалами, такими как гексоген, октоген и др. К таким соединениям относятся недавно синтезированные 6,8-динитро[1,2,4]триазоло[1,5-а]пиридин (1) и 2-амино-6,8-динитро[1,2,4]триазоло[1,5-а]пиридин (2). По данным дифференциальной сканирующей калориметрии структуры 1 и 2 обладают высокой температурой начала разложения 281 и 339°С, соответственно при скорости нагрева 5°С/мин. Тем не менее, механизм и кинетика термического разложения динитротриазоло[1,5-а]пиридинов до сих пор остается не исследованной, а природа их высокой термической стабильности остается не ясной. Цель данной работы состоит в определение кинетических закономерностей термолиза и нахождении механизма первичного разложения указанных соединений.

Термическое разложение соединений 1 и 2 изучалось методом дифференциальной сканирующей калориметрии высокого давления (2,0 МПа), так как при атмосферном давлении оба соединения успевают испариться до начала их разложения. Термокинетический анализ неизотермических данных, выполненный при помощи современного изоконверсионного и формально-кинетического анализа, показал сложный механизм термолиза, которому соответствуют эффективные кинетические параметры.

Механизм термического разложения 1 и 2 изучался теоретически с помощью новой высокоточной модификации теории связанных кластеров DLPNO-CCSD(T)/aug-cc-pVQZ. В механизме разложения рассмотрен ряд первичных каналов, среди которых радикальный разрыв связи C-NO_2, нитро-нитритная изомеризация и др. (рисунок 1). Расчеты показывают, что энергетически предпочтительным процессом для обоих соединений является нитро-нитритная изомеризация. Сравнение констант скорости первичных каналов показывает, что при температуре около 230°C молекулярный механизм сменяется радикальным разрывом связи C-NO_2 с активационными барьерами 278 и 283 кДж/моль для соединений 1 и 2, соответственно.

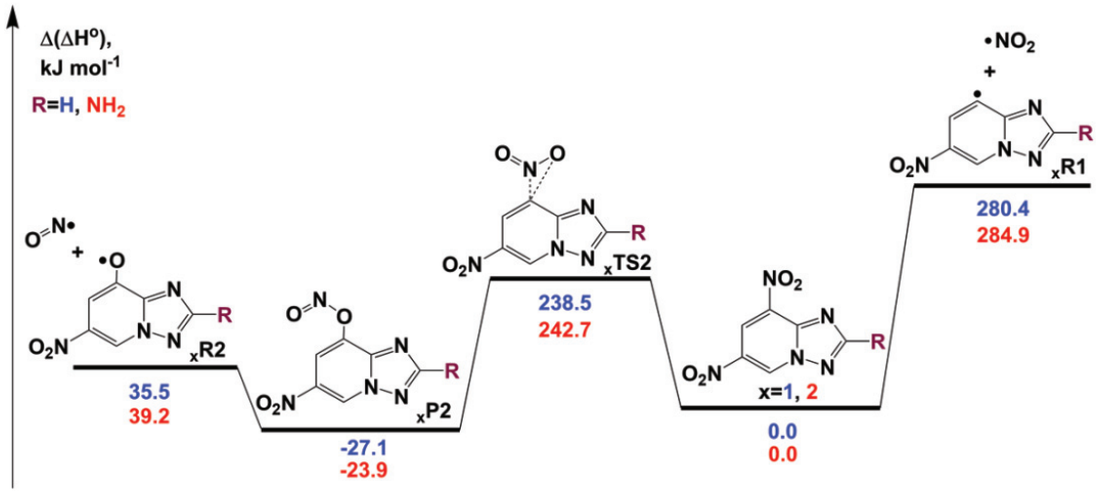
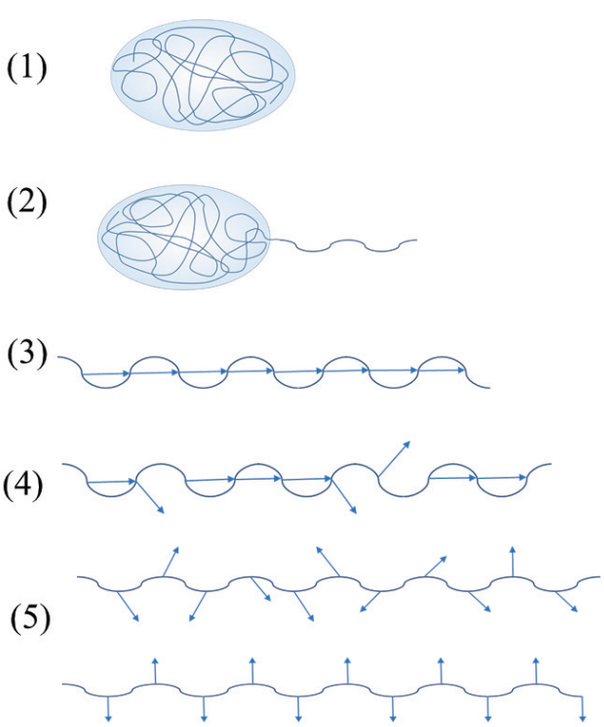


Рис. 1. Конкурирующие реакции в механизме термического разложения 1 и 2.

РАСТЯЖЕНИЕ ЦЕПИ С ПОЛЯРНЫМИ ГРУППАМИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ

Мерзлякова Т.Ю.[1], Гордиевская Ю.Д.[1,2], Крамаренко Е.Ю.[1,2]

[1]*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия*



В данной работе методом молекулярной динамики было изучено растяжение одиночной полимерной цепи с варьируемой долей полярных групп (диполей) при воздействии внешней силы на концевое звено. Диполи моделируются как два противоположно заряженных звена, одно из которых принадлежит основной цепи, а другое является боковой группой и может свободно вращаться вокруг цепи. Особое внимание уделено изучению конформаций, образующихся при разворачивании глобулы при изменении доли полярных групп и полярности растворителя.

Было показано, что растяжение в малополярных растворителях происходит в несколько этапов. При воздействии малой силы глобула приобретает вытянутую форму и деформируется как единое целое (1). При дальнейшем растяжении происходит переход от деформированной глобулы к метастабильному состоянию, характеризующемуся сосуществованием глобулы и вытянутой цепи, часто называемой «головастик» (2). При последующем увеличении силы наблюдаются различные режимы, зависящие от доли *f* диполей

Рис. 1. Схематическое представление растяжения полимерной цепи с полярными группами.

в составе цепи. Так для $f \sim 1$ может наблюдаться плато, связанное с образованием внутренней цепи из полярных групп (3), препятствующей растяжению, в то время как при $f << 1$ переход происходит плавно с постепенным разворачиванием глобулы и разрушением мультиплетов (4). Последующее растяжение приводит к полному разворачиванию цепи и разрыву связей между полярными группами (5). Построена диаграмма состояний дипольной цепи в зависимости от f, полярности среды и величины растягивающей силы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2021-622).

ВОЗМОЖНАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ СВЯЗЬ ДЛИНЫ ТЕЛОМЕР И ТЯЖЕСТИ ТЕЧЕНИЯ ПНЕВМОНИЙ РАЗЛИЧНОЙ ЭТИОЛОГИИ

Миронов И.В.[1], Спивак И.М.[1,2]

[1]*Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова, Санкт-Петербург*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург*

Эпидемия COVID-19 поставила перед медициной вопрос прогнозирования течения заболевания и его возможных последствий на ранних этапах болезни. В качестве одного из главных предикторов течения заболевания и его возможных последствий может быть предложено измерение длины теломер. В литературе есть большой массив исследований, доказывающих, что основой клеточного старения является уменьшение средней длины теломер и накопление ультракоротких теломер с возрастом.

В настоящее время показано, что кроме ядерной теломерной ДНК в тканях существует и внеклеточная, появляющаяся в результате ее физиологического выхода из клетки. Причем количество внеклеточной теломерной ДНК прямо пропорционально средней длине теломер и, как и средняя длина внутриядерной теломерной ДНК, коррелирует с показателями общего здоровья индивидуума. В то же время во внеклеточной ДНК находится и митохондриальная ДНК, появляющаяся в результате гибели клеток и митоптоза, напротив, коррелирующая с провоспалительным фенотипом. Как доказано экспериментально, более выраженное увеличение количества внеклеточной митохондриальной ДНК и уменьшение теломерной ДНК\длины теломер с возрастом характерно для мужчин. Это приводит к повышенному риску тяжелого течения пневмонии именно у пожилых пациентов мужского пола (Storci et al., 2020). Укорочение теломер лежит в основе прогрессирующего распада противовоспалительного внеклеточного резервуара телДНК. У молодых людей резервуар теломерной противовоспалительной ДНК подавляет провоспалительную активность мтДНК. Высвобождение мтДНК является наследственным механизмом ответа на повреждение клеток и в настоящее время считается основным локальным и системным триггером воспаления (Bruno et al., 2020). Эти данные могут служить одним из объяснений более выраженной степени воспаления у пожилых пациентов с более короткими теломерами.

Длину теломер измеряли в ДНК, выделенной из лимфоцитов периферической крови с применением набора (Биолабмикс, Новосибирск) по протоколу производителя. Для измерения длины теломер применяли метод количественной полимеразной цепной реакции в реальном времени (кПЦР), предложенной Каутоном (Cawthon, 2002) в нашей модификации (Vasilishina et al., 2018).

Предварительные результаты показали, что у 14 пациентов с пневмоний, вызванной SARS-cov-2, после 3 недель пребывания в стационаре длины теломер достоверно сократились не менее, чем на 100 пн. При проведенных ранее исследованиях длина теломер за такой срок в контрольной группе не менялась (Spivak et al. 2018). Мы можем сделать вывод, что укорочение теломер является одним из серьезных последствий COVID-19 и, вероятно, приводит к ускорению процессов старения. Из полученных нами предварительных результатов, следует, что мы можем рассматривать длину теломер в качестве потенциального биологического маркера не только оценки возможной тяжести течения пневмонии, вызванной новой коронавирусной инфекцией, но и ее отдаленных последствий.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант No. 20-013-00121 А.

АНАЛИЗ ИЗОМЕРОВ ПЕПТИДНЫХ ТОКСИНОВ С ПОМОЩЬЮ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Можаева В.А.[1,2], Кудрявцев Д.С.[2], Прохоров К.А.[1]

[1] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук*
[2] *Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук*

Некоторые пептидные токсины из ядов животных являются лигандами определенных клеточных рецепторов и представляют интерес, в том числе, с клинической точки зрения. Например, α-конотоксины — это короткие (12-16 а.о.) пептиды, полученные из моллюсков, имеющие в своей структуре две дисульфидные связи. Эти пеп-

тиды являются лигандами никотинового ацетилхолинового рецептора и могут быть использованы для изучения данного рецептора, а также, потенциально, в качестве лекарственного препарата. Так как выделение конотоксинов из моллюсков в достаточных количествах крайне проблематично, важной задачей является получение их синтетических аналогов. При этом необходимо обеспечить их естественную конформацию, которая поддерживается правильными дисульфидными сшивками.

В данной работе мы предложили метод, основанный на рамоновской спектроскопии, с помощью которого удалось различить дисульфидные изомеры конотоксина RgIA (RgIA и isoRgIA) и сопоставить их структуры с другими конотоксинами.

Нами были записаны спектры сухих образцов RgIA и isoRgIA в диапазоне 1640-1730 см$^{-1}$ (рисунок 1а). Этот диапазон включает полосу Amide I (1600-1690 см$^{-1}$), которая обычно используется для определения вторичной структуры белка или пептида. Видно, что максимум в спектре изомера заметно смещен относительно максимума RgIA. Следовательно, изменение дисульфидных сшивок приводит к изменению вторичной структуры этого конотоксина. Далее, мы сопоставили вторичные структуры RgIA и isoRgIA с таковыми для других конотоксинов, проанализировав Amide I полосу всех образцов методом главных компонент. Полученный в результате график баллов (scores) по главным компонентам приведен на рисунке 1б. На его основании, опираясь на значения весовых коэффициентов для разных частот, образцы можно разделить на 2 группы: одна включает конотоксины имеющие α-спираль в своей структуре, тогда как другая содержит токсины с иррегулярной структурой.

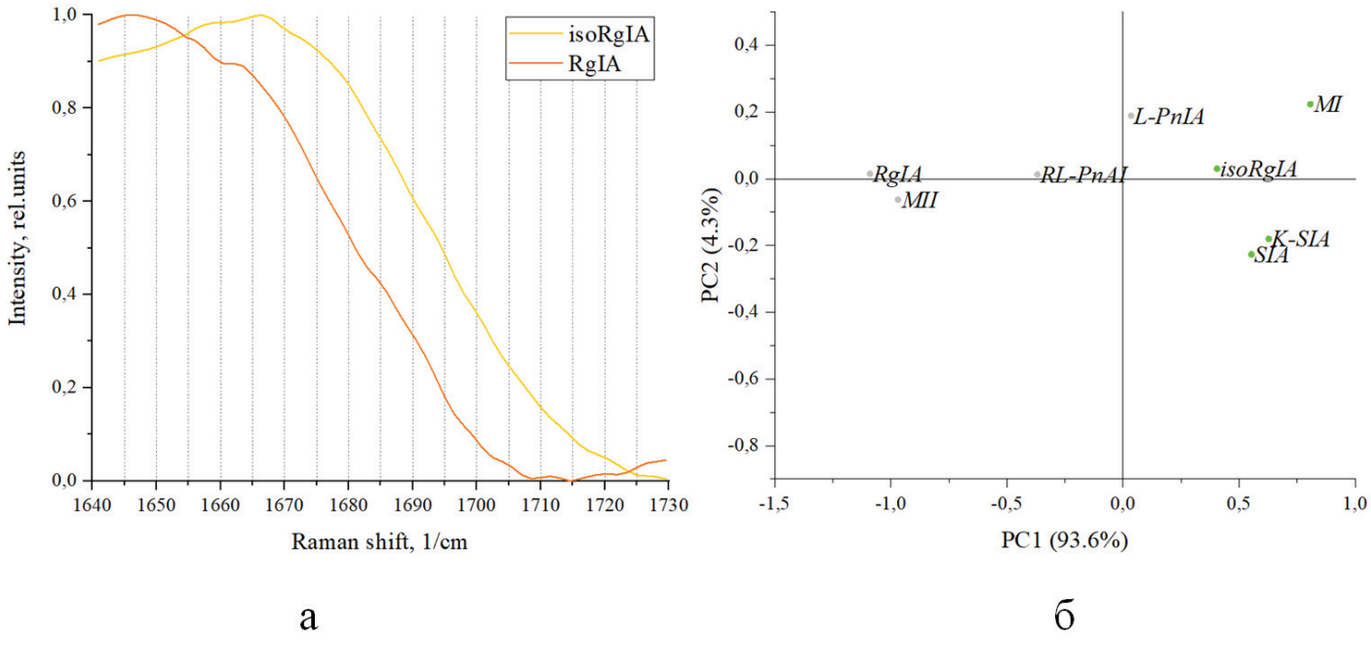


Рис. 1. а) Спектры RgIA и isoRgIA в диапазоне 1640-1730 см$^{-1}$;
б) результаты анализа методом главных компонент спектров α-конотоксинов в диапазоне 1640-1730 см$^{-1}$

В результате мы показали, что можно различать дисульфидные изомеры α-конотоксинов на основе предложенного анализа их рамановских спектров.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ PLGA НАНОЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ МЕЗО-ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ

Моллаева М.Р., Яббаров Н.Г., Сокол М.Б., Чиркина М.В., Никольская Е.Д.
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва

В настоящее время активно разрабатываются новые подходы к лечению опухолевых заболеваний. Одним из новых перспективных подходов является каталитическая терапия, основанная на образовании активных форм кислорода (АФК) в результате реакции аскорбиновой кислоты (АК) с различными каталитически активными веществами. В данном исследовании в качестве катализаторов окисления были выбраны мезо-тетрафенилпорфирины железа (FeClТФП), марганца (MnClТФП), никеля (NiТФП) и кобальта (CoТФП). С целью снижения неспецифической токсичности и улучшения биодоступности металлопорфирины (МеП) были инкапсулированы в наночастицы (НЧ) на основе сополимера молочной и гликолевой кислот (PLGA).

НЧ были получены методами преципитации (CoТФП) и одинарного эмульгирования (FeClТФП, MnClТФП и NiТФП), а также оптимизированы с помощью планов Бокса-Бенкена. Размеры полученных НЧ составили менее 350 нм, а общее содержание МеП в них: 8.7% (CoТФП), 11.1% (NiТФП), 14.4% (FeClТФП), 28.9% (MnClТФП). Цитотоксическую активность комбинации АК с МеП и МеП-НЧ оценивали методом МТТ-теста (табл. 1). Показано, что наибольшую эффективность проявляла каталитическая система на основе MnClТФП/АК и MnClТФП-НЧ/АК.

Таблица 1. Результаты анализа цитотоксической активности комбинации АК и МеП/МеП-НЧ в отношении клеток линии MCF-7 (аденокарцинома молочной железы человека).

IC50, мкМ	FeClТФП	MnClТФП	NiТФП	CoТФП
МеП/АК	55.2	2.7	3.4	5.1
МеП-НЧ/АК	36.2	1.0	7.4	4.4

Для исследования каталитической активности MnClТФП/АК и MnClТФП-НЧ/АК использовали флуоресцентный зонд 2,7-дихлородигидрофлуоресцеин диацетат, двойную окраску флуоресцентными красителями аннексином V и йодидом пропидия, а также TUNEL анализ. Установлено, что включение MnClТФП в НЧ сохраняло активность субстанции, что выражалось в индукции избытка АФК, приводящих к повреждению цепей ДНК и последующей гибели клеток путем апоптоза.

С целью повышения селективности доставки разработанной каталитической системы к опухолевым клеткам, поверхность MnClТФП-НЧ модифицировали векторной молекулой – рекомбинантным 3-доменом альфа-фетопротеина человека (рАФП3д). АФП является известным онкомаркером, экспрессия рецепторов АФП наблюдается на многих опухолевых клетках и практически отсутствует на нормальных.

Синтез конъюгата MnClТФП-НЧ-рАФП3д проводили по модифицированному карбодиимидному методу. Полученный конъюгат обладал более низким дзета-потенциалом по сравнению с MnClТФП-НЧ и чуть большим размером за счет модификации поверхности. Проведение МТТ-теста на клетках линии MCF-7 показало, что конъюгат проявлял схожую цитотоксическую активность (IC50 1.1 мкМ) с MnClТФП-НЧ (IC50 1.0 мкМ), что подтверждает сохранение функциональной активности МеП и рАФП3д после конъюгации.

Таким образом, разработанные НЧ и конъюгат адресного действия на их основе, содержащие MnClТФП, в комбинации с АК проявили цитотоксическую активность, позволяющую рассматривать данные системы доставки в качестве перспективных препаратов для противоопухолевой терапии.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТИ МЕЗОСФЕРЫ НАД ВОСТОЧНОЙ СИБИРЬЮ

Мордосова О.В.[1], Колтовской И.И.[2]

[1]Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова, Физико-технический институт
[2]Институт космофизических исследований и аэрономии им. Ю.Г. Шафера Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение Федерального исследовательского центра «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»

Генерация внутренних гравитационных волн (ВГВ) в основном происходит в тропосфере или на ее границе во время активных метеорологических процессов. Одной из главных задач ВГВ является перенос энергии, импульса из нижней атмосферы в мезосферу и термосферу. На высоте мезопаузы ВГВ подвергаются спектральной фильтрации из-за ветрового сдвига и поглощаются, вызывая в области поглощения избыточное разогревание. Важно отметить, что при поглощении они могут передавать свой импульс массе воздуха, что приводит к появлению компоненты ветра, в направлении распространении ВГВ. Все эти обстоятельства влияют на структуру нейтральной и ионизованной атмосферы. Наиболее информативным и дешевым методом исследования горизонтальных

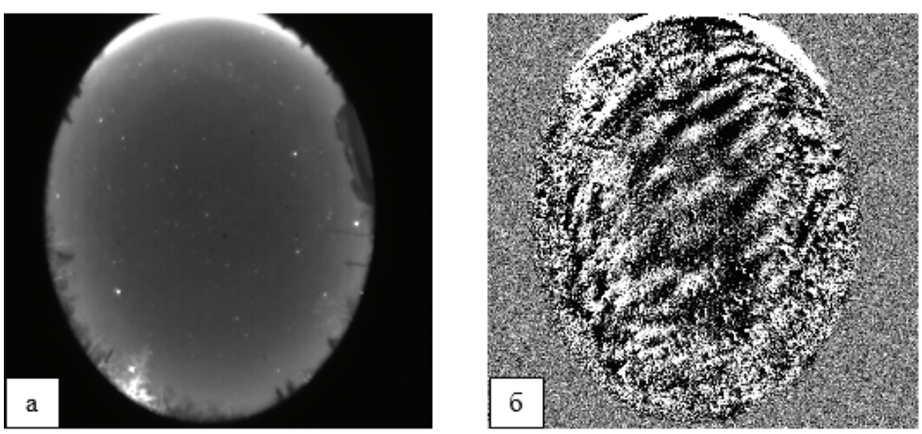


Рис. 1. Кадр ночного неба, полученного с помощью регистрирующего устройства CCD (а) и изображение обнаруженных ВГВ выполненных методом TD (б) (2 марта 2017г.)

параметров ВГВ является визуализация волновых структур в эмиссиях свечения ночного неба камерами всего неба.

Цифровая камера всего неба установлена на оптической станции Маймага (63°N, 129.5°E) (расположена в 140 км к северу от г.Якутска). Съемки ночного неба проводились со средним пространственным разрешением, размер одного пикселя при этом равнялся 23x27 мкм, что соответствует горизонтальному разрешению в зените в примерно 1.5 км на высоте 90 км. Для визуализации и обработки данных камер всего неба был использован метод обработки — временное дифференцирование (time differencing (TD)).

В данной работе по изображениям камеры всего неба (рисунок 1) проанализированы 123 дня за период 2017-2018 гг. Из них выявлены 27 дней с ВГВ зафиксированных на 256 кадрах.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ L-ЛАКТИДА В ПРИСУТСТВИИ TI(TBSE)$_2$ МЕТОДОМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ

Москвичев С.С.[1,2], Седуш Н.Г.[1], Чвалун С.Н.[1]

[1]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*
[2]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

Полилактид — это биоразлагаемый полимер, который с каждым годом все более активно применяется при производстве медицинских изделий и экологолически безопасной упаковки. Актуальной задачей является поиск новых катализаторов и инициаторов для синтеза полилактида, которые не содержат олова и обеспечивают получение полимера с контролируемым комплексом свойств. В представленной работе синтезирован и охарактеризован каталитический комплекс на основе иона титана (IV). Методом ДСК исследована кинетика полимеризации L-лактида в присутствии Ti(Tbse)$_2$ при различных температурах, рассчитаны константы скорости реакции, получены параметры уравнения Аррениуса (энергия активации и предэкспоненциальный множитель).

Синтетическая последовательность получения титанового комплекса заключается во взаимодействии замещенного салицилового альдегида с этаноламином с образованием основания Шиффа, с последующей его обработкой изопропоксидом титана. Структуру полученного комплекса подтверждали методами ЯМР, ИК-спектроскопии и элементного анализа.

Кривые ДСК реакции полимеризации L-лактида (рис. 1а) в присутствии титанового комплекса получали в изотермическом режиме в интервале температур 145-180 °C. Концентрация катализатора составляла 2 мольн. %. Энтальпия полимеризации L-лактида составила –116±1 Дж/г. Кинетические кривые (рис. 1б) получали интегрированием кривых ДСК. При увеличении температуры реакции от 145 до 180 °C скорость реакции возрастает, равновесная конверсия примерно равна 96,5 %.

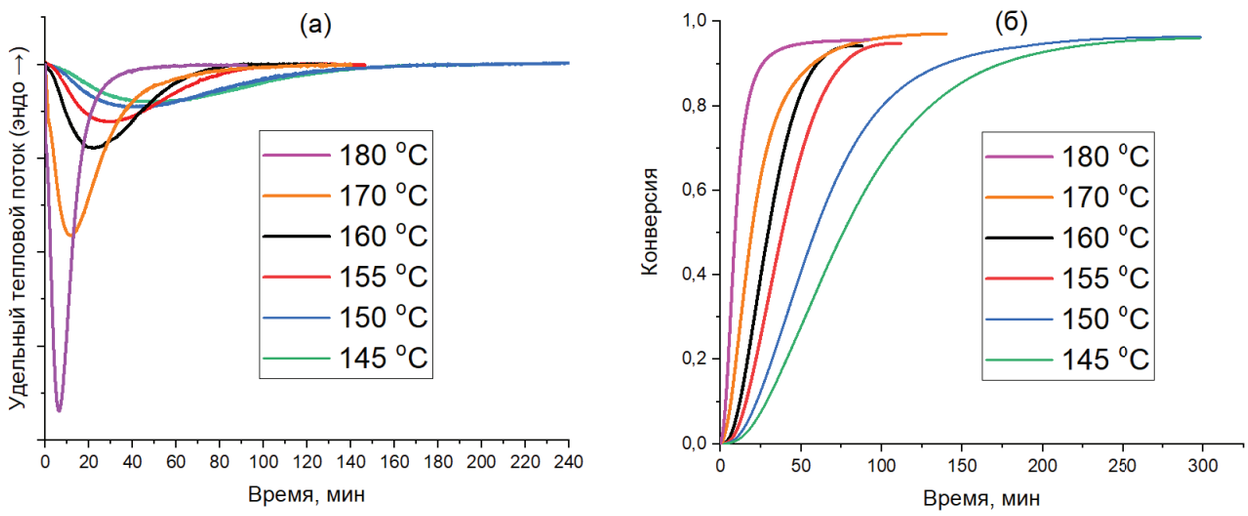


Рис. 1. ДСК кривые (а) и кинетические кривые (б) полимеризации L-лактида в интервале температур 145-180 °C

Константа скорости реакции k, энергия активации E_a и предэкспоненциальный множитель A были рассчитаны с применением модели обратимой полимеризации. Для расчета констант скорости при различной температуре были построены зависимости $-\ln(1-\alpha/\alpha_{max})$ от времени. Константа скорости была определена по тангенсу угла наклона линейной части соответствующей кривой, отнесенному к концентрации катализатора. На основании полученных констант скорости была построена зависимость Аррениуса, по тангенсу угла наклона прямой

определена энергия активации E_a, а по ее пересечению с осью ординат — натуральный логарифм предэкспоненциального множителя lnA:

$$E_a = 148{,}0 \pm 19{,}0 \text{ кДж/моль}, \ln A = 44{,}5 \pm 5{,}4, \text{ где A в (мольн. \%·ч)}^{-1}.$$

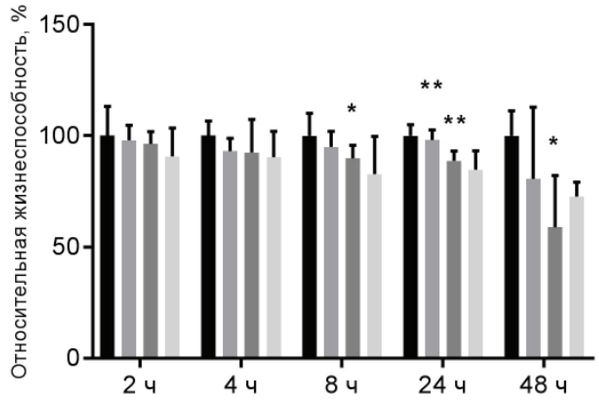
Работа выполнена при поддержке внутреннего гранта НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 2755 от 28.10.2021 г.).

НАНОКОМПОЗИТ ЗОЛОТО/КОБАЛЬТОВЫЙ ФЕРРИТ, ЛЕГИРОВАННЫЙ ЦИНКОМ, КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ АГЕНТ ДЛЯ ФОТОТЕРМИИ

Моторжина А.В.[1], Пшеничников С.Е.[1], Беляев В.К.[1], Йованович С.[2,3], Левада Е.В.[1]

[1] *Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия*
[2] *Институт ядерной физики «Винча» — Национальный институт Республики Сербия, Университет Белграда, Белград, Сербия*
[3] *Институт Йозефа Стефана, Любляна, Словения*

Нанокомпозит, состоящий из наночастиц золота, окруженных наночастицами кобальтового феррита, легированного цинком был впервые синтезирован и исследован в качестве потенциального агента для фототермии. Комплексное исследование структурных свойств и морфологии частиц нанокомпозита показывает узкое распределение по размерам, а также структурную и морфологическую стабильность во времени. Наночастицы кобальтового феррита, легированного цинком, обуславливают суперпарамагнитные свойства нанокомпозита, что увеличивает его стабильность в водной суспензии. В спектре пропускания присутствует характерный пик поглощения, обусловленный возбуждением локализованного плазмонного резонанса на наночастицах золота. В исследуемом образце пик сдвинут в ИК-область и расположен на длине волны порядка 600 нм. На этой длине волны проводилось исследование эффективности преобразования интенсивности оптического излучения в тепло для суспензии клеток Jurkat (иммортализованных Т-лимфобластах человека) и частиц нанокомпозита в трех различных концентрациях 10, 50 и 100 мкг/мл.



Предварительно была проведена оценка относительной жизнеспособности клеточной культуры Jurkat при выдержке с частицами нанокомпозита в течение различного времени (Рис. 1) Концентрации 50 и 100 мкг/мл показали значительное снижение пролиферативной активности клеток раковой культуры Jurkat с увеличением времени выдержки. Предполагается, что цитотоксический эффект на раковые клетки усилится при комбинировании с фототермической терапией.

Рис. 1. Относительная жизнеспособность клеточной линии Jurkat после выдержки с частицами нанокомпозита Au/CFO_Zn в течение 2, 4, 8, 24, 48 часов в процентах в сравнении с контрольными данными. Показанные результаты представляют собой среднее значение ± стандартное отклонение. Столбцы, отмеченные звездочками, указывают на результаты, которые статистически отличались от контроля: * P <0,0332, ** P <0,0332. Статистический анализ проведен с помощью теста Краскела-Уоллиса

РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОГО ПОДХОДА ДЛЯ НАДЕЖНОГО ПРЕДСКАЗАНИЯ КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ОТКРЫТЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ОБОЛОЧКАМИ

Мощенков А.Д.[1,2], Отлётов А.А.[2], Миненков Ю.В.[2]

[1] *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, г. Москва*
[2] *ФГБУН Федеральный Исследовательский Центр Химической Физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук, г. Москва*

Конформационный поиск и сэмплинг представляют собой одну из центральных проблем современной квантовой химии. Надежное исследование конформационного пространства возможно лишь при наличии эффективного метода оценки потенциальной энергии. В настоящее время предложены подходы, позволяющие надежно воспроизводить конформационные энергии комплексов металлов с закрытыми электронными оболочками.

Целью настоящей работы является разработка аналогичных рекомендаций для систем с открытыми электронными оболочками.

С использованием Кембриджской базы данных были выбраны 16 немультиреференсных (Рис. 1а) комплексов переходных (*3d*-) металлов с открытыми оболочками, для каждого из которых были автоматически сгенерированы 10 уникальных конформаций. Все полученные структуры были оптимизированы в приближении PBE-D3(BJ)/def2-svp. Последующий расчёт (single point) энергий был выполнен с помощью: а) ряда стандартных функционалов (PBE-D3(BJ), PBE0-D3(BJ), M06, ωB97X-V и базисных наборов def2-tzvp); б) их ускоренных композитных вариантов (PBEh-3c и B97-3c); в) полуэмпирических методов (PM6, PM7, GFN1-xTB GFN2-xTB) и метода силового поля (GFN-FF). Результаты статистического анализа конформационных энергий (Рис. 1б) свидетельствуют о наличии корреляции между стандартными функционалами. Композитные методы PBEh-3c и B97-3c корректно ранжируют конформации по их относительным энергиям. Полуэмпирические методы и силовое поле GFN-FF работают менее стабильно и нуждаются в предварительном тестировании для конкретной системы.

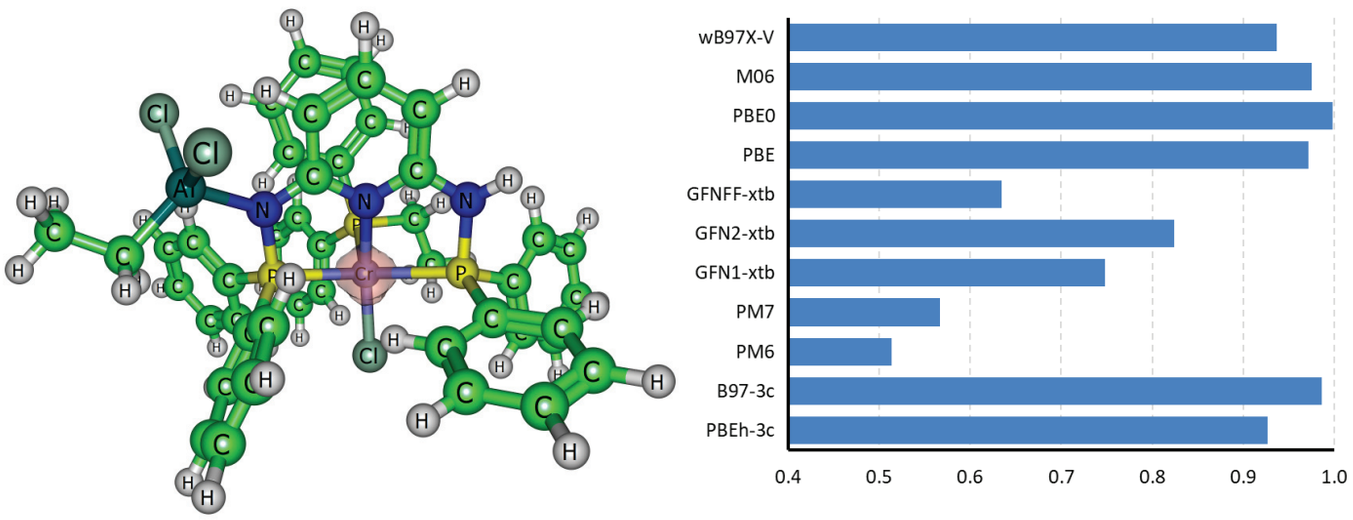


Рис. 1. (а) Распределение электронной плотности (FOD) для комплекса, волновая функция которого описывается в рамках однодетерминантного приближения волновой функции. (б) Коэффициенты корреляции Пирсона (ρ) между конформационными энергиями, полученными с помощью протестированных методов и их усредненными (PBE, PBE0, M06, ωB97X-V) значениями.

ВЛИЯНИЕ УХОДЯЩЕЙ ГРУППЫ НА ГИДРОЛИЗ ОРГАНОФОСФАТОВ ФЕРМЕНТОМ ИЗ БАКТЕРИИ PSEUDOMONAS DIMINUTA

Мулашкина Т.И.[1], Кулакова А.М.[1], Хренова М.Г.[1,2]

[1] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ "Фундаментальные основы биотехнологии" РАН, Москва, Россия*

Фосфотриэстеразы гидролизуют органофосфаты, которые используются как пестициды, инсектициды и огнезащитные средства. Пестициды и инсектициды представляют собой органофосфаты с хорошей уходящей группой, тогда как огнезащитные средства представляют собой органофосфаты с плохой уходящей группой. В данной работе исследован гидролиз в активном центре фосфотриэстеразы из бактерии Pseudomonas diminuta (Pd-PTE) органофосфатов с разной нуклеофугностью: дибутил-4-нитро-фенилфосфат (**1**) и дибутилфенилфосфат (**2**).

В данной работе для комплексов фермента с субстратами **1** и **2** в состоянии интермедиата реакции проведены расчеты молекулярной динамики с потенциалами комбинированного метода квантовой механики / молекулярной механики (КМ/ММ). Методом квантовой механики описывались активный центр фосфотриэстреазы, который включает катионы кобальта Co^{2+}, гидроксид-анион $OH^{⊠}$, аминокислотные остатки His55, His57, карбоксилированный Lys169, His201, His230, His254, Asp301, и органосфофат. В расчетах квантовой части использовали неограниченный метод теории функционала плотности: функционал PBE0 с дисперсионной поправкой D3 и базис 6-31G**. Для описания молекулярно-механической части использовалось силовое поле CHARMM. Из полученных траекторий молекулярной динамики были построены распределения расстояний между атомом фосфора и кислородом гидроксид-аниона ($P\text{-}O_H$) и между атомом фосфора и атомом кислорода уходящей группы ($P\text{-}O_{Ph}$). Кроме того, для интерпретации различий в системах с выбранными субстратами были построены карты лапласиана электронной плотности.

Распределение длин связей нуклеофильной атаки (P-O_H) и разрываемой связи с уходящей группой (P-O_{Ph}) показало, что в соединении **1** с хорошей уходящей группой стабильнее связь P-O_H, чем P-O_{Ph}, в соединении **2** с плохой уходящей группой обратная тенденция. Это также подтверждается электронным строением интермедиатов.

Для изучения реакционной способности фосфотриэстеразы использовались подходы молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами (КМ/ММ-МД) с добавлением смещающего потенциала методом зонтичной выборки. Квантовая подсистема и методы были выбраны аналогично предыдущему этапу. Процесс гидролиза описывается двумя стадиями: образование интермедиата и получение комплекса фермент-продукт. Для описания данных стадий в качестве коллективных переменных были выбраны расстояния P-O_H и P-O_{Ph}, соответственно.

Данные полученные в ходе КМ/ММ-МД моделирования с зонтичной выборкой обрабатывали методами анализа взвешенных гистограмм (WHAM) и зонтичного интегрирования (UI), что позволило получить профили энергии Гиббса реакций гидролиза.

Их анализ показал, что гидролиз дибутил-4-нитро-фенилфосфата (**1**) происходит с невысокими барьерами, тогда как гидролиз дибутилфенилфосфата (**2**) не осуществим. Таким образом, показана неспособность Pd-PTE гидролизовать органофосфаты с плохой уходящей группой.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-33-70001).

ОГРУБЛЁННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТИМУЛО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СТЕРЕОРЕГУЛЯРНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Муратов А.Д.

Федеральный Исследовательский Центр Химической Физики им. Н.Н. Семёнова Российской Академии Наук

Интенсивная разработка наноустройств, основанных на переключении между двумя устойчивыми состояниями, обуславливает поиск молекулярных наноструктур, обладающих динамикой, схожей с бистабильными механическими системами по типу осциллятора Дуффинга.

Демонстрация спонтанных вибраций или стохастического резонанса в таких молекулярных структурах представляет особенный интерес. С помощью полноатомных молекулярно-динамических вычислений было продемонстрировано бистабильное поведение по типу осциллятора Дуффинга коротких цис-пиридин-фурановых олигомеров, в которых спонтанные вибрации и стохастический резонанс активируются температурой.

В данной работе представляется огрублённая модель коротких цис-пиридин-фурановых олигомеров. Используется ранее разработанный алгоритм параметризации стереорегулярных соединений в последней версии наиболее распространённого огрублённого силового поля Martini 3.0. Исследуется возможность спонтанного резонанса и стохастических вибраций в огрублённой системе.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ФТАЛОЦИАНИНОВ ЦИНКА, СОЧЕТАЮЩИХ НА ПЕРИФЕРИИ ГАЛОГЕНЫ И ФЕНОКСИЛЬНЫЕ ГРУППЫ

Мыкина Е.А., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

ФГБОУ ВО «Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет», Иваново, Россия

В последнее время внимание исследователей всё чаще привлекает изучение физико-химических свойств и возможности применения соединений, относящихся к группе фталоцианинов. Комплексы фталоцианинов с переходными металлами используются в качестве красителей и пигментов. Показано, что тонкие пленки фталоцианинов могут использоваться в микроэлектронных приборах благодаря их уникальным электрофизическим, оптическим и физико-химическим свойствам.

Настоящее сообщение посвящено синтезу феноксихлорзамещенных фталонитрилов и металлофталоцианинов на их основе, а также изучению структур и оптических свойств данных соединений.

Нуклеофильным замещением атомов хлора в 3,4,5,6-тетрахлорфталонитриле на фенилфеноксильные группы в различном мольном соотношении были получены 4-фенилфенокси-3,5,6-трихлорфталонитрил (1) и 4,5-дифенилфенокси-3,6-дихлорфталонирил (2). Процесс проводили в диметилформамиде в течении 12 часов при температуре 80 °C с постепенным внесением карбоната калия (схема 1).

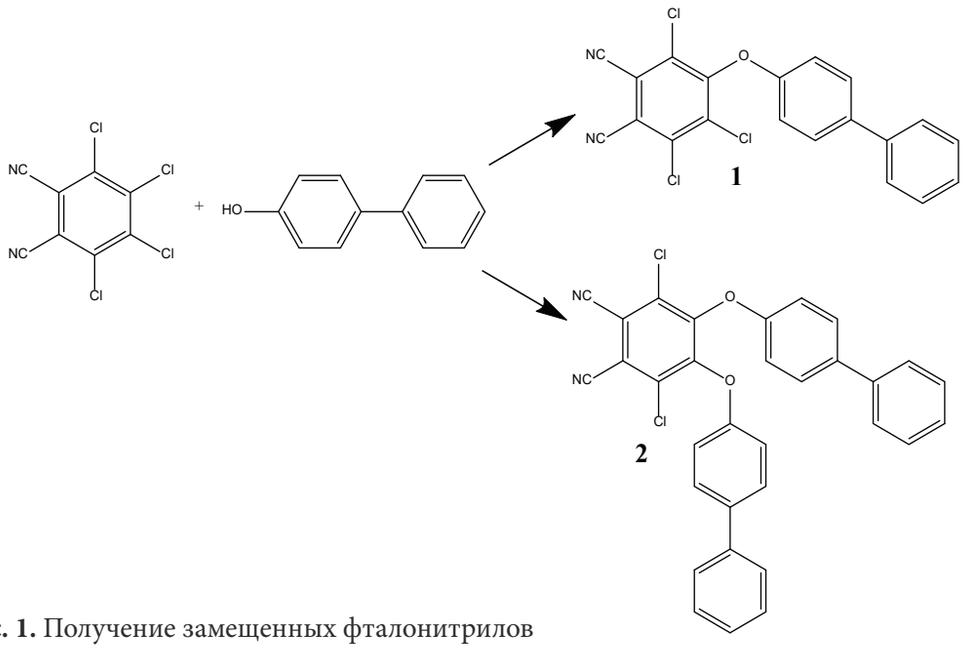


Рис. 1. Получение замещенных фталонитрилов

Темплатной конденсацией синтезированных комплексов с ацетатом цинком получены соответствующие металлокомплексы. Очистку полученных соединений проводили колоночной хроматографией. Идентификацию всех синтезированных соединений осуществляли с привлечением современных физико-химических методов.

Изучены спектральные свойства синтезированных фталоцианинов в органических растворителях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант №17-73-20017) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

ХАЛЬКОГЕНИДНЫЕ И УГЛЕРОДНЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

Насиров П.Д., Новикова С.А., Грибова Е.Д.

Государственный университет «Дубна»

В настоящее время обретает актуальность вопрос проектирования и создания методов экспресс-диагностики острых заболеваний, предлагающих возможность проведения быстрого и точного анализа вне лабораторных условий. К числу таких методов можно отнести анализ на тест-полосках, основанный на высокоаффинных взаимодействиях иммунореагентов и визуализации данных взаимодействий посредством химически связанных с ними меток (рис.1). На сегодняшний день в подобных системах в качестве меток используются коллоидные наночастицы золота имеющие ряд недостатков при проведении анализа, кроме того, себестоимость тест-полосок на основе коллоидного золота слишком высока. На почве данной проблемы ведутся научные исследования новых материалов, наиболее перспективными из которых являются коллоидные квантовые точки (КТ).

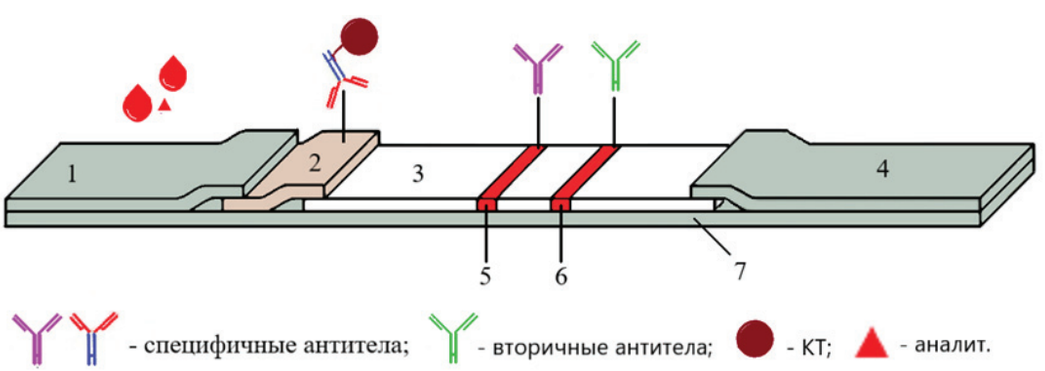


Рис. 1. Схематическое изображение иммунохроматографической тест-полоски с использованием КТ.
1 — мембрана для нанесения образца, 2 — мембрана для меченых антител, 3 — нитроцеллюлозная мембрана, 4 — впитывающая мембрана, 5 — тестовая линия, 6 — контрольная линия, 7 — пластиковая подложка

Существует множество видов КТ, различающихся по своим структуре и составу. В данный момент наибольший прогресс достигнут в области синтеза и применения халькогенидных КТ, синтезированных металлоорганическим синтезом, почти лишенных практических недостатков, однако имеющих дорогостоящий и неэкологичный синтетический подход. В связи с этим не теряет актуальность вопрос использования других методов синтеза КТ, позволяющих перейти в сферу зеленых технологий получения и повысить коммерческую доступность тест-систем на их основе.

В данной работе был проведен синтез халькогенидных КТ водным коллоидным методом, а также синтез углеродных КТ; были охарактеризованы физико-химические свойства полученных наночастиц и оценена возможность их использования в иммунохроматографических тест-системах.

ВЛИЯНИЕ ТИПА ПАВ НА РЕАКЦИЮ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННОГО ФОТООСНОВАНИЯ

Наумова А.О., Афанасьев А.К., Мельников П.В.

МИРЭА — Российский технологический университет,
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

Фотоперенос протона является одним из фундаментальных процессов в химии и биологии. Помимо соединений, которые в возбужденном состоянии становятся более сильными кислотами (например, гидрокси- и амино-замещенные ароматические соединения), есть и другие, которые становятся более сильными основаниями, такие как акридин.

В работе исследовано влияние анионных, неионогенных и катионных поверхностно-активных веществ на реакцию протонирования акридина в возбужденном состоянии в 0,2 М аммиачном буферном растворе. При добавлении анионного ПАВ происходит заметный сдвиг pK_a^* в область более высоких значений pH (рис. 1 *а*). Основной причиной этого является солюбилизация неполярной молекулы акридина в углеводородной фазе, которая приводит к смещению равновесия в обратимой реакции.

Зависимость сдвига константы pK_a^* от типа ПАВ и длины углеводородной цепи представлена на рисунке 1 *б*. Присутствие НПАВ никак не влияет на смещение pK_a^*. Введение в систему АПАВ приводит к сдвигу pK_a^* в область более высоких значений pH и возрастает от 9,9 для чистого акридина до 10,7 в присутствие ДДСН. По-видимому, здесь имеет место процесс увеличения локальной концентрации за счет взаимодействия отрицательно заряженных мицелл и катионов аммония. Наличие КПАВ, наоборот, приводит к сдвигу pK_a^* в область более низких значений pH от 9,9 для чистого акридина до 9,7 в присутствие ЦТАБ. Такую зависимость можно объяснить кулоновским отталкиванием положительно заряженных мицелл и катионов аммония.

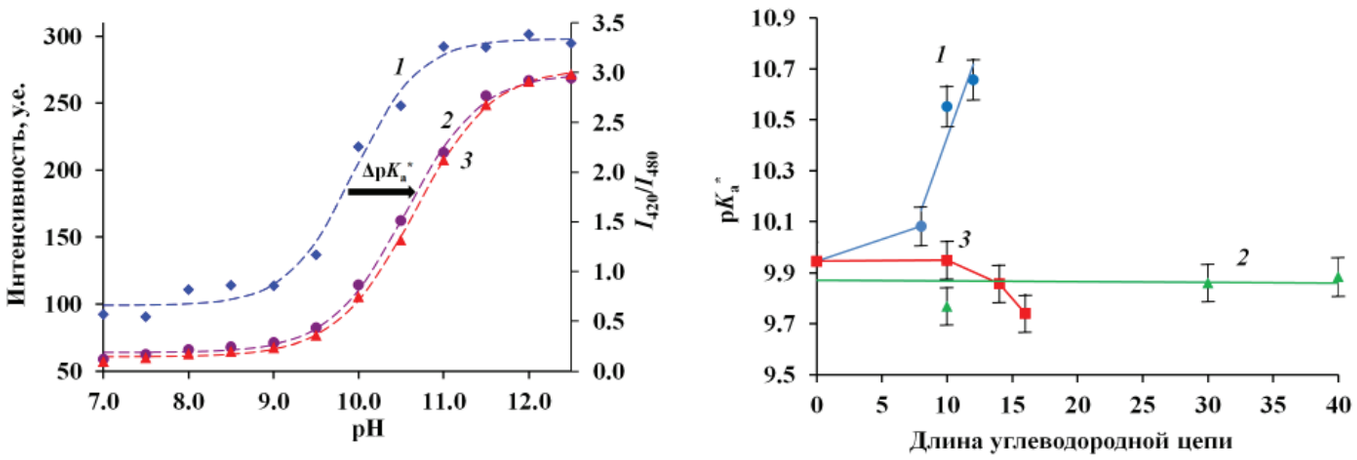


Рис. 1. *а* — (1) зависимость флуоресценции акридина на длине волны 430 нм от pH среды в отсутствие АПАВ (левая ось); зависимости от pH среды соотношения интенсивностей пиков исходной и протонированной форм акридина (правая ось) в присутствии 1,5 ККМ (2) ДСН и (3) ДДСН.; *б* — сдвиги константы pK_a^* в зависимости от типа ПАВ и длины углеводородной цепи для 1 — АПАВ, 2 — НПАВ, 3 — КПАВ.

Наблюдаемый эффект при добавлении ПАВ принципиально отличается от влияния полиэлектролитов, которые не влияют на реакцию фотопереноса протона, но существенно сдвигают равновесие кислотно-основной реакции в основном состоянии. Супрамолекулярная настройка pK_a и pK_a^* представляет огромный интерес, поскольку такие системы находят применение в доставке лекарств, катализе и в изготовлении сенсоров.

РОЛЬ АЛЬФА-ОСЦИЛЛЯЦИЙ В НАРУШЕНИИ ДВИГАТЕЛЬНОГО КОНТРОЛЯ У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА

Незвинский А.А.[1], Белова Е.М.[1], Попов В.А.[2], Седов А.С.[1,3]

[1] *ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН*

[2] *Исследовательский центр нейрохирургии им. Н.Н. Бурденко*

[3] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*

Осцилляторная нейронная активность субталамического ядра (СТЯ) в диапазоне 8-30 Гц считается одним из возможных “биомаркеров” болезни Паркинсона.

Для изучения осцилляций применяли метод микроэлектродной регистрации во время операции вживления стимулирующего электрода (DBS) в субталамическое ядро пациентам с болезнью Паркинсона на временных интервалах покоя пациента (спонтанная активность) и выполнения двигательных тестов — частое сжимание руки в кулак (вызванная активность). Спектральный анализ методом вычисления плотностей спектральных мощностей 72 записей сигналов на 19 траекториях в 17 полушариях у 10 пациентов проводился для трех частотных диапазонов: альфа, низкий бета и высокий бета (7-12 Гц, 12-20 Гц и 20-30 Гц соответственно).

Мы обнаружили значимое (p=0,0363) снижение мощности осцилляций только альфа-ритма при выполнении двигательных тестов при помощи критерия Манна-Уитни.

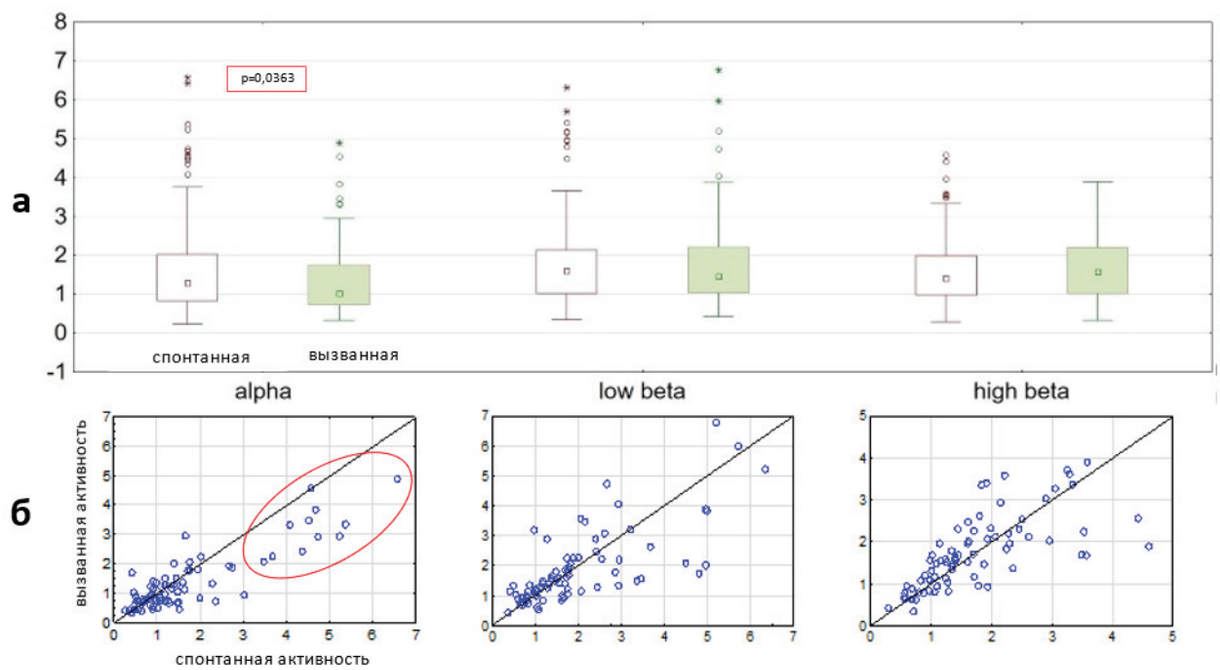


Рис. 1. Рис. 1. а) попарное сравнение значений PSD осцилляций спонтанной и вызванной активности в альфа-, низком бета- и высоком бета-диапазонах; б) сопоставление значений спонтанной и вызванной активности на каждой глубине записи на трех частотных диапазонах.

В альфа диапазоне наблюдается тенденция к уменьшению осцилляций при выполнении двигательных тестов, в то время как в низком и высоком бета-диапазонах такого характера изменения осцилляций не наблюдается, что свидетельствует о функциональном различии частотных диапазонов в двигательном контроле и его нарушении у пациентов с болезнью Паркинсона.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ СТЕРЕОИЗОМЕРОВ ВИНИЛХЛОРИДА МЕТОДОМ ЯМР

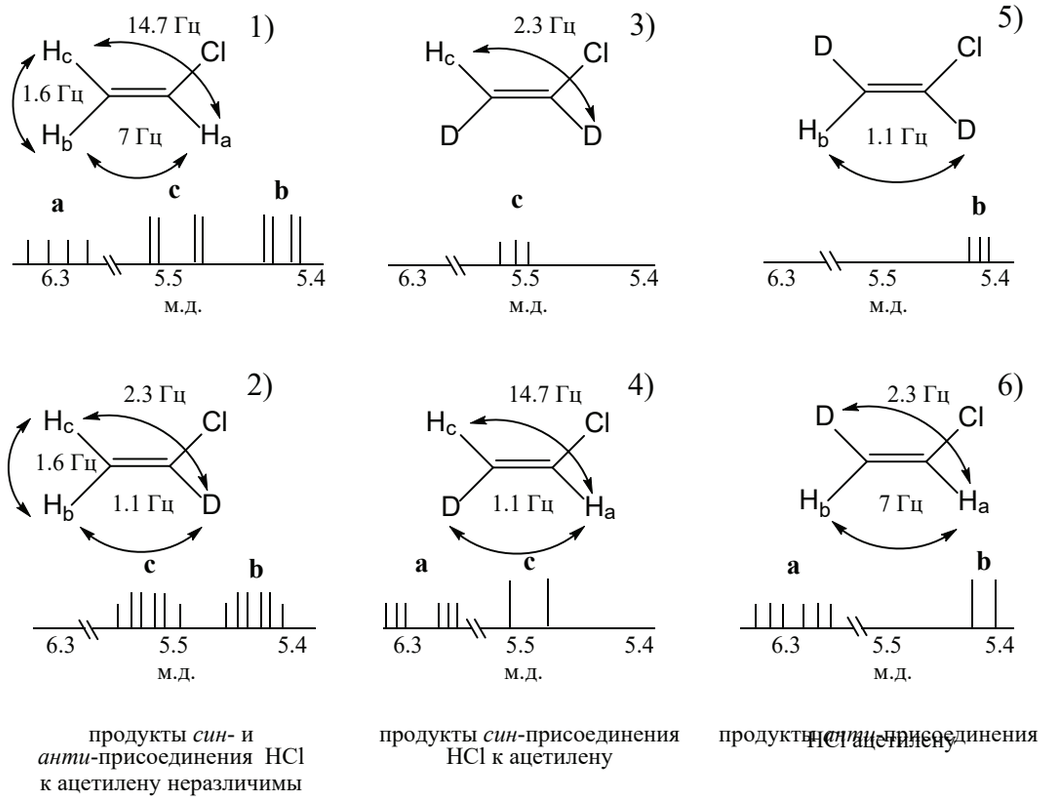
Никитенко Д.В., Краснякова Т.В., Кобец К.Д., Митченко С.А.

Институт физико-органической химии и углехимии, г. Донецк

Каталитическое гидрохлорирование ацетилена является важным промышленным процессом производства винилхлорида — мономера многотоннажного полимерного пластика поливинилхлорида. В качестве катализатора, как правило, используют нанесенную на активированный уголь высокотоксичную сулему, которая в реакционных условиях легко сублимирует, нанося существенный ущерб окружающей среде. Поэтому в настоящее время остро стоит проблема поиска новых каталитических систем гидрохлорирования ацетилена с целью замены

промышленного катализатора на экологически более дружественный. Целенаправленный поиск таких систем возможен при понимании механизма реакции, неотъемлемой частью которого является установление ее стереоселективности. Для этого удобно использовать изотопно-меченые реагенты, в частности, дейтерированный ацетилен. Однако, получение изотопно-чистого C_2D_2 гидролизом карбида кальция затруднено вследствие изотопного обмена между D_2O и парами атмосферной воды: в результате образуется смесь изотопомеров ацетилена $C_2H_{2-i}D_i$, (i = 0, 1, 2).

При проведении реакции гидрохлорирования $C_2H_{2-i}D_i$ возможно формирование шести изотопомеров продукта реакции, представленных на рисунке.



продукты *син*- и *анти*-присоединения HCl к ацетилену неразличимы

продукты *син*-присоединения HCl к ацетилену

продукты *цис*-*транс*-присоединения HCl к ацетилену

Рис. Штрих-диаграмма ^{1}H-ЯМР спектра возможных изотопомеров винилхлорида, образующихся в реакции HCl с $C_2H_{2-i}D_i$ (i = 0, 1, 2).

Гомоядерные КССВ, определенные для недейтерированного винилхлорида, указаны на рисунке для продукта 1. Учитывая различие гиромагнитных соотношений для ядер водорода и дейтерия (γ_H / γ_D) = 6.5 можно ожидать следующий набор КССВ для содержащих дейтерий изотопомеров винилхлорида: $^3J_{HH}$(*транс*) = 14.7 Гц, $^3J_{HD}$(*транс*) = 2.3 Гц, $^3J_{HH}$(*цис*) = 7 Гц, $^3J_{HD}$(*цис*) = 1.1 Гц, $^2J_{HH}$ = 1.6 Гц. Геминальная КССВ $^2J_{HD}$ = 0.24 Гц слишком мала, чтобы проявляться в спектре.

Рассчитанные значения КССВ делают возможным моделирование ^{1}H-ЯМР спектра для ожидаемых продуктов гидрохлорирования смеси изотопомеров ацетилена. Соотнесение сигналов в экспериментальном и модельном спектрах позволяют провести оценку соотношения *цис*- и *транс*-HDC=CDCl (продуктов 3 и 5 соответственно) в реакционной смеси, что и будет рассмотрено в докладе.

НАНОЧАСТИЦЫ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ МАГНИТО-МЕХАНИЧЕСКОЙ МАНИПУЛЯЦИИ БИОМОЛЕКУЛАМИ

Никитин А.А., Прищепа А.В., Абакумов М.А.

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Уникальные физические свойства магнитных наночастиц (МНЧ) сложных оксидов железа позволяют использовать такой материал в качестве исследовательского инструмента для изучения молекулярных процессов и их механизмов на наноразмерном уровне. МНЧ способны преобразовывать энергию низкочастотных переменных магнитных полей в механические колебания. Конъюгируя макромолекулы с МНЧ, можно вызывать контролируемое растяжение, сжатие или изменение формы таких молекул, тем самым управляя их каталитической и биоло-

гической активностью. Более того, закрепляя МНЧ на поверхности клеточной мембраны и, затем, обрабатывая их слабыми низкочастотными переменными магнитными полями, можно проводить дистанционную активацию ионных каналов, а также запускать различные механизмы клеточной гибели. Такая возможность дистанционного контроля над различными молекулярными процессами открывает новые горизонты для разработки платформ для адресной доставки лекарств, контроля за их высвобождения, а также позволяет дистанционно разрушать опухолевые клетки. Несмотря на то, что эффективность магнито-механического подхода неоднократно демонстрировалась в различных экспериментальных работах, модельные исследования проводятся на уровне доказательств и не подкрепляются количественными данными, и лишь несколько теоретических работ описывают влияние внешних полей на МНЧ. Более того, существующие экспериментальные работы описывают магнито-механические эффекты, опосредуемые агрегатами МНЧ. Все это приводит к тому, что в различных работах экспериментальные значения энергий магнито-механического эффекта и механических сил, опосредованных МНЧ с одними и теми же характеристиками, отличаются на несколько порядков. Существующие противоречия ясно показывают необходимость правильной оценки корреляции между свойствами МНЧ и опосредуемом ими магнитомеханическом эффекте.

Для решения данной проблемы была разработана специальная экспериментальная методика с применением коротких ДНК-дуплексов, содержащих до 60 пар оснований, для которых может быть легко рассчитана энергия связи комплементарных цепочек. Одноцепочечную флуоресцентно-меченую ДНК, содержащую 60 нуклеотидов, ковалентно закрепляли на поверхности МНЧ, тогда как комплементарные ей цепочки с длиной от 18 до 60 нуклеотидов ковалентно связывали с поверхностью стеклянной подложки. Далее конъюгаты МНЧ гибридизовали с комплементарными ДНК на поверхности стекла, после чего полученные микрочипы обрабатывались низкочастотными магнитными полями с известной амплитудой, что приводило к вращательным движениям МНЧ, опосредованным магнитным крутящим моментом. Такой крутящий момент передавался от МНЧ к связанным с ними ДНК-дуплексам, что приводило к механическим деформациям и разрыву цепей ДНК с последующим отрывом МНЧ от подложки, который фиксировался по изменению сигнала флуоресценции. Было показано, что 10 нм МНЧ ферритов способны опосредовать диссоциацию ДНК-дуплексов с энергией связи комплементарных цепочек 90 ккал·моль$^{-1}$ в поле с амплитудой 100 мТл и частотой 180 Гц. Кроме того, было показано, что выраженность магнито-механического эффекта напрямую зависит как от формы, так и от размера МНЧ, а также зависит от времени экспозиции и последовательности оснований в ДНК-дуплексе. Более высокие значения удельной намагниченности насыщения МНЧ приводили к большей степени механической диссоциации ДНК-дуплексов, что коррелирует с теоретическими расчетами.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 21-13-00438.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.
Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

Пористый никелид титана $Ni_{50}Ti_{50}$ является наиболее известным и перспективным функциональным материалом для многих применений благодаря своим уникальным механическим свойствам, отличной коррозионной стойкости и биосовместимости. Эти свойства во многом определяются спецификой пористой структуры: наличием в системе просачивающихся сетей пор или изолированных пор, а также размерами и геометрией пор. Одним из значительных достижений является синтез металлических пен на основе никеля и титана с микронными или наноразмерными порами, низкой плотностью в сочетании с высокой прочностью, большой площадью поверхности и открытой пористостью.

Несмотря на успехи, достигнутые в разработке технологий получения пористых металлических сплавов, производство пористого никелида титана значительно сложнее, в первую очередь, из-за высокой температуры плавления. Более того, результаты моделирования пористой структуры иногда не удается корректно сопоставить с данными эксперимента из-за существенного различия в линейных размерах пор: на эксперименте поры миллиметрового размера, в то время как моделирование позволяет получать поры размером порядка ста нанометров.

В настоящем исследовании мы представляем метод генерации пористой структуры для классической молекулярной динамики, позволяющий задавать параметры пор, сопоставимые с параметрами пористых экспериментальных образцов. Предложен критерий масштабирования пористо структуры, позволяющий корректно сопоставлять результаты моделирования с экспериментальными данными для образцов с различной степенью пористости. Входными параметрами в предложенном методе являются координаты атомов модельной системы, экспериментальные значения среднего линейного размера пор и требуемое значение пористости. Рисунок 1 показывает мгновенный снимок пористого никелида титана при температуре 300 К, сгенерированного предложенным методом.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

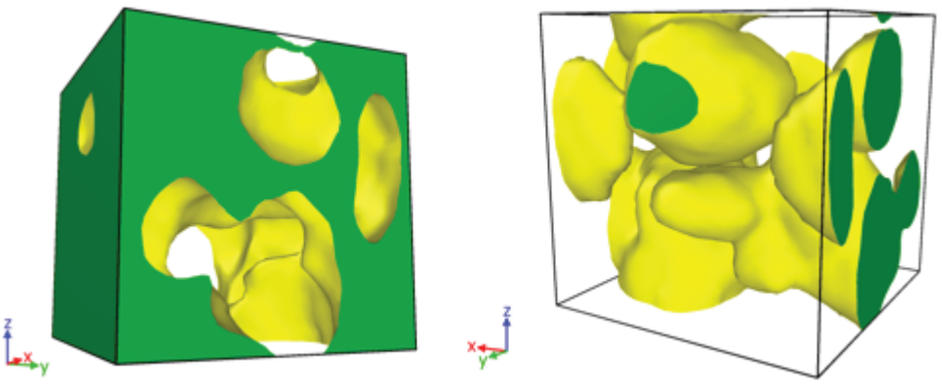


Рис. 1. Мгновенный снимок конфигурации пористой системы $Ni_{50}Ti_{50}$ (слева пористая матрица, справа — поры) с линейными размерами порядка 8.7 нм с пористостью 40% и размерами пор в пределах 2.1-5.7 нм.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ

Никишин И.И.[1], Адлерберг В.В.[1], Сенковенко А.М.[1], Чевкина Е.М.[2], Скрябин Г.О.[2], Багров Д.В.[1]

[1]*Биологический факультет МГУ, Москва, Россия*

[2]*Российский научный онкологический центр им. Н.Н. Блохина, Москва, Россия*

Развитие методов визуализации внеклеточных везикул (ВВ) с использованием микроскопии высокого разрешения критически важно для понимания функций и роли ВВ. Необходимость данных методов подчеркивается в рекомендациях Международного общества по изучению внеклеточных везикул (International Society for Extracellular Vesicles). Согласно этим рекомендациям, в исследованиях ВВ препараты после выделения следует характеризовать на уровне отдельных частиц, причем предпочитаемые методы — это просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) или атомно-силовая микроскопия (АСМ). В нашей работе мы разработали методику корреляционной АСМ-ПЭМ микроскопии, позволяющую охарактеризовать двумя методами отдельные везикулы на одних и тех же полях зрения. В нашей работе исследованы препараты ВВ, выделенных из кондиционированной среды культивирования клеток аденокарциномы молочной железы MCF-7 и линии клеток рака яичника Skov3. Метод ПЭМ позволяет получать детализированную информацию о размерах и морфологии частиц, при этом метод АСМ позволяет не только регистрировать изменение рельефа поверхности везикул и их латеральные размеры, но и оценивать высоту частиц над подложкой. С помощью разработанной методики было проведено сопоставление изображений индивидуальных внеклеточных везикул, полученных методами АСМ и ПЭМ (рис. 1), при этом точность позиционирования на макроскопическом образце достигала ~5 нм. Было показано, что морфология внеклеточных везикул «сдутые мячики» (cup-shaped morphology), которая для ПЭМ является наиболее распространенной и общепринятой, отличается от рельефа поверхности, полученного методом АСМ. По нашим данным, около 60% внеклеточных везикул на АСМ-изображениях не имели морфологии «сдутых мячиков», которая в 100% случаев проявлялась на ПЭМ-изображениях тех же самых частиц. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №19-34-90148), а также НОШ МГУ «Молекулярные основы живых систем и синтетическая биология».

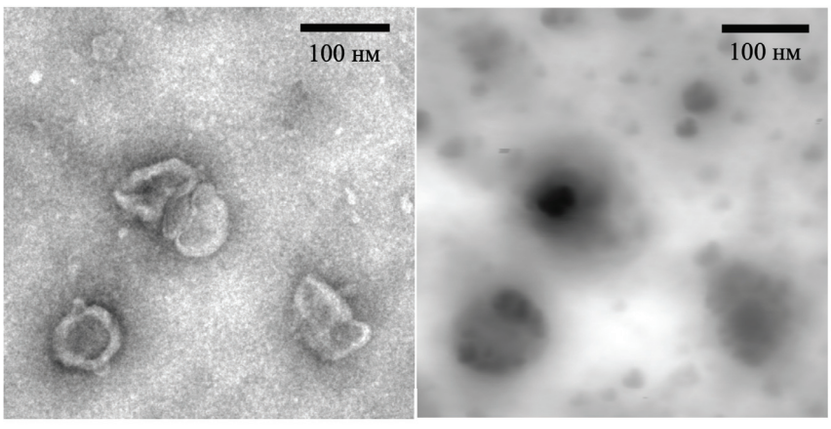


Рис. 1. Снимки внеклеточных везикул, полученные с использованием разных микроскопов (А — ПЭМ, Б — АСМ, выбрана инвертированная серая палитра).

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С N-ЭТИЛТИОМОЧЕВИННЫМИ ЛИГАНДАМИ В МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ С ГЕМОГЛОБИНОМ

Новикова В.О.[1], Покидова О.В.[1], Куликов А.В.[1], Санина Н.А.[1,2,3]

[1]Институт проблем химической физики, РАН, г. Черноголовка, Россия
[2]Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва
[3]Научно-образовательный центр «Медицинская химия» Московского государственного областного университета, г. Мытищи

Нитрозильный комплекс с N-этилтиомочевинными лигандами (ЕТМ) состава $[Fe(SC(NH_2)(NHC_2H_5))_2(NO)_2]^{+\cdot}Cl^{-}\cdot[Fe(SC(NH_2)(NHC_2H_5))Cl(NO)_2]^0$ является перспективным донором монооксида азота (NO) — сигнальной молекулы, которая обладает широким спектром биологически важных эффектов (регуляция просвета кровеносных сосудов, влияние на адгезию тромбоцитов, участие в передаче нейронных сигналов и др.), а также вызывает ряд патологических процессов. Целью настоящей работы явилось исследование распада ЕТМ в присутствии дезокси- и оксигемоглобина (Hb и HbO_2). Согласно литературе, данные белки могут быть вовлечены в процессы биотрансформации нитрозильных комплексов. NO, выделившийся при диссоциации комплексов, реагирует с HbO_2 с образованием нитрат-иона и метгемоглобина (metHb): $HbO_2 + NO \rightarrow metHb + NO_3^-$. Hb с NO образует в растворе нитрозилгемоглобин: $Hb + NO \leftrightarrow HbNO$. На рис. 1 показаны изменения спектров в результате данных реакций. Установлено, что при увеличении концентрации белка наблюдается уменьшение скорости реакции, что свидетельствует о стабилизации ЕТМ на поверхности белка: образование NO из белок-связанного комплекса происходит медленнее. Наблюдаемая в спектрах ЭПР анизотропия g-фактора указывает на сильное торможение вращения парамагнитных фрагментов комплекса за счет их связывания с молекулой белка. Таким образом, результаты ЭПР-спектроскопии подтверждают данные УФ-спектроскопии о стабилизации ЕТМ в системе с белком.

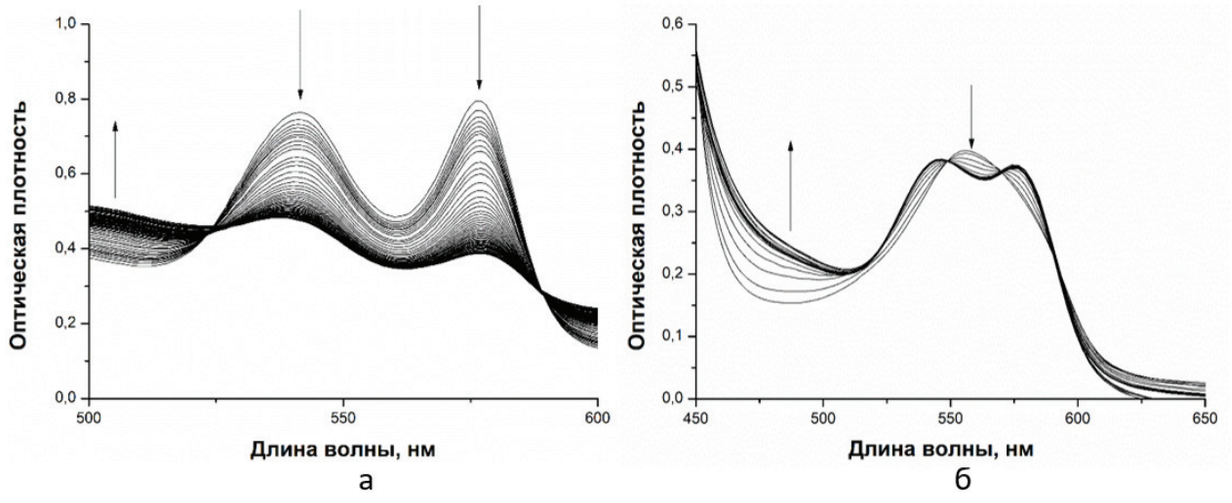


Рис. 1. а) изменение спектров оптического поглощения $3\cdot10^{-5}$ М раствора HbO_2 в присутствии ЕТМ при 20°С 24 ч в аэробных условиях; б) изменение спектров оптического поглощения $8{,}5\cdot10^{-6}$ М раствора Hb в присутствии ЕТМ при 20°С 24 ч в анаэробных условиях.

Исследование по трансформации комплекса в системе с белком выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-00316). Синтез комплекса выполнен по теме Государственного задания, № гос. регистрации № АААА-А19-119071890015-6.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПЕРРЕНАТОВ И ПЕРТЕХНЕТАТОВ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ПУРИНОВОГО РЯДА

Новиков А.П.

Российский университет дружбы народов
Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина
Российской академии наук

Перренат и пертехнетат-ионы легко доступны от генераторов $^{188}W/^{188}Re$ и $^{99}Mo/^{99m}Tc$ и представляют большой интерес в ядерной медицине, как для диагностических, так и для терапевтических применений. Также в последние годы разрабатываются нейтральные хосты сложного строения с внутренними полостями, содержащими

азотистые основания. В случае эффективного связывания с перренат и пертехнетат анионами они могут быть перспективными доставщиками рения и технеция в клетки различных органов и тканей. Молекулы азотистых гетероциклов пуринового ряда являются важными простейшими молекулярными компонентами при моделировании создания подобных хостов для ReO_4^- или TcO_4^-. Они так же могут помочь в разработке или улучшение методов разделения Tc и Re.

В настоящей работе были синтезированы в виде монокристаллов перренаты и пертехнетаты с катионами аденития и гуанития (изотермическое испарение растворов перрената магния и азотистых оснований в HCl). Проведено их рентгеноструктурное исследование (автодифрактометр Bruker KAPPA APEX II).

Кристаллографические данные для перренатов: $H_2Gua(ReO_4)_2$ (**I**): a = 5.2014(2), b = 15.7463(6), c = 14.9004(5) Å, β = 92.908(2) °, при 100 K, Z = 4, пр. гр. $P2_1/n$, $R1$ = 0.0199; $H_2Ade(ReO_4)_2$ (**II**): a = 16.0078(8), b = 5.0950(2), c = 16.2841(9) Å, β = 116.078(2) °, при 100 K, Z = 4, пр. гр. $P2_1/c$, $R1$ = 0.0176;

Кристаллографические данные для пертехнетатов: $HGua(TcO_4)$ (**III**): a = 5.4073(2), b = 7.2230(3), c = 12.5344(5) Å, α = 106.129(2), β = 91.945(2), γ = 104.688(2)°, при 100 K, Z = 2, пр. гр. P-1, $R1$ = 0.019; $HAde(TcO_4)$ (**IV**): a = 9.2587(3), b = 9.3129(3), c = 20.7470(6) Å, α = 77.576(1), β = 85.838(1), γ = 89.554(1)°, при 100 K, Z = 8, пр. гр. P-1, $R1$ = 0.0347.

В обоих перренатах молекулы азотистых оснований дважды протонированы, в пертехнетатах протонированы один раз.

Кристаллическую упаковку в структурах **I** и **II** можно представить как состоящую из катионных и анионных колонок. При этом в **I** каждая катионная окружена 6 анионными и каждая анионная 3 катионными. В обеих структурах отсутствует π-стэкинговое взаимодействие. Кристаллическая упаковка в **III** представлена слоями, расположенными в плоскости (111). В **III** H-связи типа N–H···N объединяют катионы в цепочки, к которым сбоку связями N–H···O присоединены пертехнетат-ионы. Эти цепочки соединяются в слои более слабыми водородными связями типа C–H···O и также между слоями. В **IV** кристаллическая упаковка представлена чередующимися катионными и анионными слоями параллельными плоскости (001).

Проведенное исследование показало, что различие в стехиометрии соединений приводит к формированию различных типов кристаллических упаковок в полученных соединениях. Обнаружено, что существенную роль в формировании всех структур играют H-связи. Вследствие различного протонирования азотистых оснований во вновь синтезированных соединениях рения и технеция наблюдалась различная стехиометрия, соотношение основания к перренату равно 1 к 2, а соотношение основания к пертехнетату равно 1 к 1. последнее соотношение приводит к более прочно связанным структурам.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ФОСФОРИЛИРОВАННОЙ ОКИСЛЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Огородников В.Э.[1], Соломевич С.О.[1], Черкасова А. В.[1],
Белькевич А.М.[1], Кузич А.А.[2], Юркштович Т.Л.[1], Бычковский П.М.[2]

[1]НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Республика Беларусь, Минск, Ленинградская 14, 220006

[2]Учебно-научно-производственное республиканское унитарное предприятие УНИТЕХПРОМ БГУ, Минск, Курчатова 1, 220045

Окисленная целлюлоза обладает рядом свойств, таких как биодеградируемость, гемостатическая активность, антибактериальное действие по отношению к ряду грамположительных и грамотрицательных бактерий, хорошая сорбционная способность и др. Сочетание этих свойств позволяет использовать окисленную целлюлозу в различных биомедицинских приложениях, таких как тканевая инженерия, заживление ран и доставка лекарств. Фосфорилирование окисленной целлюлозы потенциально может увеличить скорость деградации материала, а также улучшить его сорбционные свойства и пролонгировать время высвобождения лекарств. Цель работы — синтез фосфорилированных окисленных целлюлоз с различными степенями окисления и фосфорилирования и определение их физико-химических свойств.

Для фосфорилирования использовали хлопковую целлюлозу, а также окисленные целлюлозы с содержанием карбоксильных групп 5,5 и 18,7 %. Образцы модифицировали при помощи растворов оксида азота (IV) и смеси трибутилфосфата, ортофосфорной кислоты и оксида фосфора (V) в случае окисления и фосфорилирования, соответственно. При помощи ИК-спектроскопии подтверждено образование как карбоксильных, так и фосфатных групп полисахарида. Исследовано влияние степеней окисления и времени фосфорилирования на следующие свойства полисахарида: набухание, морфология, кристалличность и деградация *in vitro*. Влияние времени проведения реакции на содержание фосфора в продуктах представлено ниже на графиках. Из профилей графиков можно сделать заключение, что увеличение степени окисления целлюлозы уменьшает скорость образования фосфорных эфиров. Это связано с тем, что при увеличении степени окисления образца в нём остаётся меньше первичных гидроксилов, наиболее активных при этерификации. Максимальное содержание фосфора в синтезированных фосфатах составило 4,0, 2,4 и 2,5 ммоль/г в случае исходной, сильно- и слабоокисленной целлюлоз.

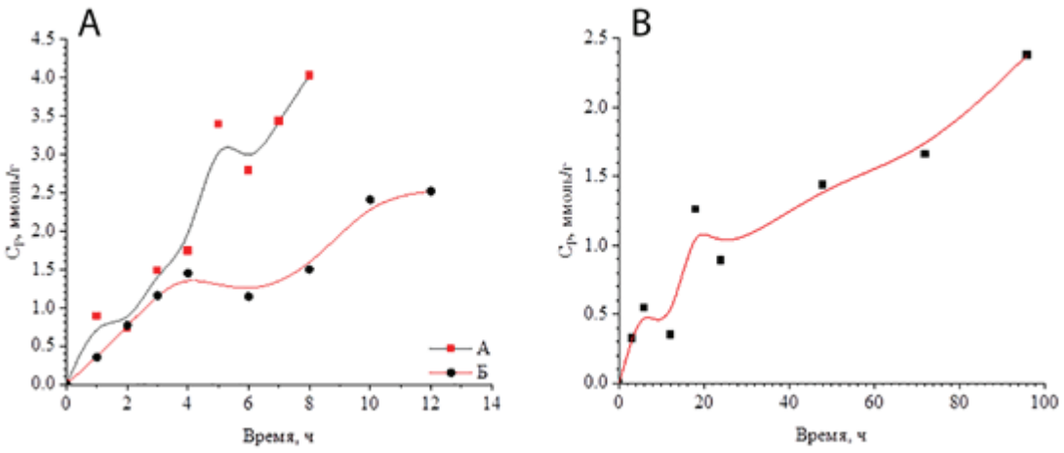


Рис. 1. (А) Кинетика фосфорилирования целлюлозы (А) и сильноокисленной целлюлозы (Б); (В) кинетика фосфорилирования слабоокисленной целлюлозы.

Результаты данной работы — первый шаг для дальнейшего изучения физико-химических свойств и потенциального использование полученных образцов в качестве основы для создания противоопухолевых препаратов.

ФАРМАКОКИНЕТИКА ДОКСОРУБИЦИНА И ИНДОМЕТАЦИНА, СОРБИРОВАННЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ

Огородников В.Э.[1], Соломевич С.О.[1], Дмитрук Е.И.[2], Черкасова А.В.[1], Павлов К.И.[3], Гудкова Е.И.[3], Юркштович Т.Л.[1], Бычковский П.М.[2]

[1]НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Республика Беларусь, Минск, Ленинградская 14, 220006

[2]Учебно-научно-производственное республиканское унитарное предприятие УНИТЕХПРОМ БГУ, Республика Беларусь, Минск, Курчатова 1, 220045

[3]Белорусский государственный медицинский университет, Республика Беларусь, Минск, пр. Дзержинского 83, 220116

Мировая обеспокоенность и повышенное внимание к онкологическим заболеваниям вызваны тенденцией роста заболеваемости раком. Традиционные методы противоопухолевой терапии часто не обеспечивают желаемого эффекта. Для решения проблемы интенсивно проводятся исследования в области создания систем доставки противоопухолевых препаратов веществ для локальной химиотерапии. В последнее время особое внимание уделяется производству полимерных функционально активных гидрогелей, а именно полимерных средств на основе полисахаридов, используемых для доставки лекарств ввиду их большей безопасности для организма человека и более низкой стоимости. Целью этой работы было исследование фармакокинетики доксорубицина и индометацина, иммобилизованных на гидрогелях полиэлектролитных комплексов хитозана и фосфата декстрана. Индометацин был использован в этом исследовании из-за способности к усилению противоопухолевому эффекта доксорубицина в результате хемосенсибилизирующий эффекта. Фармакокинетика была изучена на крысах-самцах Wistar (Rattus norvegicus f. domestica). Животные были случайным образом разделены на две группы (n=4) для подкожного введения гидрогеля с доксорубицином и индометацином, а также для суспензии, содержащей только доксорубицин и индометацин. Возраст животных на момент введения дозы составлял 2–4 месяца, а масса тела находилась в диапазоне 280–300 г. Температура воздуха поддерживалась в пределах 20–22°C, относительная влажность — 45–55 %. Введение осуществлялось подкожно, в холку животного с использованием иглы инъекционной многоразовой, диаметром 1,8 мм, длиной 40 мм. Концентрация доксорубицина составляла 5 мг/кг, в то время как концентрация индометацина — 2,5 мг/мл.

После подкожного введения суспензии доксорубицина и индометацина без гидрогеля было установлено, что максимальная концентрация доксорубицина составила 951,5 нг/мл и окончательное время выведения препарата из плазмы было 72 часа. Максимальная концентрация индометацина в плазме равная 523,1 нг/мл была у крыс на четвертый час после подкожного введения суспензии лекарственных препаратов и на протяжении 9 дней препарат находился в кровотоке. В случае использования гидрогеля, оба лекарственных вещества медленно высвобождались в кровоток. Концентрация доксорубицина в плазме продолжала увеличиваться в течение первых 72 часов после подкожного введения из полиэлектролитного комплекса и достигла максимального значения 134,2 нг/мл. Также показано, что на протяжении 15 дней препарат находился в кровотоке. Индометацин продолжал высвобождаться из гидрогелей на протяжении 17 недель, при этом максимальная концентрация составила 77,0 нг/мл и была достигнута на 5-й день.

Это первое исследование, которое продемонстрировало использование полиэлектролитных комплексов в качестве стратегии для долгосрочного устойчивого одновременного высвобождения доксорубицина и индометацина.

РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В НЕЙРАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТКАХ

Осипов А.А.

Федеральный исследовательский центр химической физики им Н.Н. Семёнова РАН, Москва, РФ

Нейральные стволовые клетки (НСК) являются источником всех нейронов и глиальных клеток в головном и спинном мозге во время эмбрионального развития организма. У взрослых млекопитающих НСК остаются активными в нескольких четко определенных областях мозга.

У грызунов НСК обнаружены в желудочково-субвентрикулярной зоне, выстилающей боковые желудочки, и в субгранулярной зоне зубчатой извилины в гиппокампе, где они производят нейроны, о чем впервые сообщил более 50 лет назад Джозеф Альтман. НСК грызунов активны на протяжении всей жизни и непрерывно продуцируют новые нейроны, которые интегрируются в уже существующую нейронную сеть, а также астроциты и олигодендроциты, тем самым обеспечивая высокую степень пластичности, которая необходима для функционирования этих цепей. Активность НСК в головном мозге взрослого человека, остается открытым вопросом.

Производство новых нейронов НСК у взрослых людей зависит от различных физиологических стимулов и регулируется на нескольких этапах нейрогенной линии.

Показано, что НСК обладают более высокой радиочувствительностью по сравнению с дифференцированными клетками. Предполагается, что повреждение и гибель НСК играет важную роль в патогенезе радиационно-индуцированного снижения когнитивных функций. Однако, механизмы формирования реакции НСК на воздействие ионизирующего излучения изучены недостаточно.

Двунитевые разрывы (ДР) составляют относительно небольшую часть этих повреждений, но именно они являются основным триггером, определяющим дальнейшую судьбу облученной клетки. Репарация примерно 8 из 10 радиационно-индуцированных ДР ДНК происходит с помощью относительно быстрого, но некорректного механизма негомологичного воссоединения концов с частым образованием микроделеций и хромосомных перестроек. ДР ДНК, отрепарированные некорректно, приводят к гибели клеток, инактивации генов супрессоров опухолей или активации онкогенов. Накопление микроструктурных хромосомных нарушений, возникших вследствие некорректной репарации ДР ДНК, играет ведущую роль в процессах онкотрансформации и клеточного старения. Поэтому особенности образования и репарации радиационно-индуцированных ДР ДНК в НСК клетках особенно важны для понимания механизмов формирования радиационных эффектов в этих клетках.

В докладе будут рассмотрены собственные и литературные данные об особенностях формирования радиационных эффектов в НСК с акцентом на образование и репарацию ДР ДНК.

ТОЧНОСТЬ КЛАСТЕРНО-КОНТИНУУМНОГО ПОДХОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СОЛЬВАТАЦИИ ИОНА NA^+

Отлётов А.А., Миненков Ю.В.

ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва

Квантово-химическое моделирование кластеров «ион-растворитель» (микросольватация) является необходимым для понимания фундаментальных аспектов процесса сольватации. Первый этап таких исследований предполагает идентификацию наиболее стабильных пространственных структур вида $M(Solv)n^{\pm}$, где Solv — молекула растворителя. Систематический конформационный поиск для подобных систем возможен лишь при небольших значениях n, что создаёт принципиальные сложности. Одним из вариантов решения являются активно продвигаемые автоматизированные методы конформационного поиска S. Grimme, основанные на мета-динамике и приближениях GFN*n*-xTB/GFN-FF. Однако, в общем случае такой подход не гарантирует получение корректной выборки наиболее стабильных структур. Так, для кластеров $Na(ДМСО)n^+$ полуэмпирический метод GFN2-xTB предсказывает равновесное расстояние Na–O на 0.3 Å короче, чем надежный DFT метод PBE0-D3(BJ)/def2-tzvp. Наличие значительных структурных искажений свидетельствует о некорректной поверхности потенциальной энергии и ставит под сомнение результаты конформационного поиска. Для разрешения подобных сложностей предлагается *альтернативный* подход для конформационного поиска. Первоначальный набор конформаций для систем $Na(Solv)n^+$ автоматически генерировался с помощью программы ABCluster. Для ряда растворителей отсутствовали надежные оценки зарядов на атомах, необходимых для вычисления потенциальной энергии в рамках встроенного силового поля CHARMM. В этих случаях их значения по методу Хиршфельда были получены с помощью программы Природа в приближении PBE/λ1. Затем, все уникальные сгенерированные конформации кластеров $Na(Solv)n^+$ были оптимизированы в приближении PBE/λ1. Полные энергии оптимизированных структур были дополнены поправкой на дисперсионные взаимодействия (D3) с помощью программы DFT-D3. Далее оптимизированные конформации были отсортированы по их полным энергиям DFT-D3 энергиям. На заключительном этапе конформационного поиска были отобраны самые стабильные структуры.

С помощью данного алгоритма нами были найдены низкоэнергетические конформации ряда кластеров $Na(Solv)n^+$. Это послужило основой для надежного предсказания термодинамических характеристик процесса сольватации ионов в рамках кластерно-континуумного подхода.

СОВРЕМЕННЫЕ ПРИНЦИПЫ ИНТЕГРАЦИИ ХИМИИ И БИОЛОГИИ НА ПРИМЕРЕ БАКТЕРИЦИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Павлова А.Ю., Лобанов А.В.

Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия

Уже на протяжении более 100 лет происходит изучение фталоцианиновых комплексов. Они широко применяются в качестве катализаторов, красителей сине-зеленых оттенков, молекулярных полупроводников, фотостабилизаторов. Однако активное развитие исследований в области биомедицины с применением фталоцианинов переходных металлов, демонстрирующих взаимосвязь химии и биологии, происходит только с середины 80-х годов прошлого века. На сегодняшний день данный метод является один из самых перспективных при лечении заболеваний, связанных с патогенными бактериями.

Преимущества использования данных соединений в лечении патологий заключаются в длинноволновом поглощении (максимум поглощения должен составлять 630-730 нм), высоких биоцидных свойствах (использовании в качестве фотосенсибилизаторов), низкой токсичности и простоте функционализации основного скелета. Однако одним из существенных недостатков фталоцианинов является возможность постепенного уменьшение фотосенсибилизирующей способности за счет повышенной склонности к образованию агрегатов. Снижение количества агрегатов добиваются путем введения дополнительных объемных групп (неплоских заместителей), к центральным металлам, а также на периферию макроцикла. Так, наличие экстралигандов у комплексов, содержащих Al, Ge, Sn, приводит к подавлению агрегаций. При этом введение дополнительных заместителей не только способствует уменьшению потенциала агрегации, но и увеличивает растворимость соединений, повышая фотоактивность. Так, например, увеличению фотоактивности способствует наличие 4-(1-метил-1-фенилэтил) феноксигрупп на периферии макромолекул фталоцианинов. Особо хотелось бы подчеркнуть, что некоторые агрегаты фталоцианиновых комплексов проявляют более характерные биоцидные свойства по сравнению с мономолекулярной формой. Например, это характерно для комплексов Fe и Mn.

Возможность фталоцианиновых комплексов оказывать бактерицидный эффект определяется способностью проявлять флуоресценцию в красной области спектра, а также способностью образовывать синглетный кислород. Данные показатели будут зависеть как от структуры фталоцианина (природы и положения заместителей, природы металла), так и от типа растворителя. В связи с данными особенностями установлен ряд зависимостей. Зависимость от природы и объема заместителей может быть обусловлена возникновением ассоциативных процессов. Фталоцианины, у которых заместители небольшие по размеру и объему, уменьшают квантовые выходы флуоресценции и снижают образование синглетного кислорода (одни из самых низких показателей имеют фталоцианины с нитрогруппами). Зависимость от природы металла проявляется во влиянии тяжести атома на фотофизические свойства. Так квантовый выход флуоресценции является наивысшим у фталоцианина, содержащего более легкий атом металла, в то время как способность образовывать синглетный кислород — у фталоцианина, содержащего наиболее тяжелый атом металла (за счет увеличение доли безызлучательного перехода в триплетное состояние). Например, при сравнении квантового выхода флуоресценции у комплексов, содержащих Al и Zn, у последнего наблюдаются более высокие показатели.

Биоцидные свойства фталоцианиновых комплексов переходных металлов могут быть рассмотрены в рамках дополнительных занятий по биологии и химии для профильных 10 и 11 классов. Так, возможно проведение нескольких уроков, на которых школьникам предлагается рассмотреть макроциклы, и, в частности, биоцидную активность фталоцианинов железа.

ГИПЕРОКСИГЕНАЦИЯ КАТОДНОЙ КАМЕРЫ МИКРОБНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА В КАЧЕСТВЕ ВАРИАНТА УВЕЛИЧЕНИЯ ЕГО МОЩНОСТИ

Павлова П.А.[1], Лазукин А.А.[2]

[1]*ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»*
[2]*Университет ИТМО*

Возможность использования альтернативных источников энергии, особенно в труднодоступных местах, является актуальным вопросом для многих отраслей в настоящее время. Для решения проблем энергетики могут использоваться некоторые электрогенные микроорганизмы в особых устройствах — микробных топливных элементах (МТЭ). Микробный топливный элемент — биотехнологическое устройство, позволяющее использовать

электричество, вырабатываемое микроорганизмами в ходе окислительно-восстановительных реакций. Главное направление развития МТЭ на данный момент представляет собой изучение способов увеличение мощности, однако большинство исследований направлены на модификацию анодной(анаэробной) камеры устройства и меньшее значение уделяется изменению катодной камеры.

Целью работы является изучение влияния модификаций катодной камеры на мощность МТЭ. В качестве экспериментальных образцов использовались МТЭ двухкамерного типа с протон селективной МФ-4СК мембраной. В результате отрыва электронов от органических молекул и передачи их на внешний акцептор (анод) образуются протоны. Далее протоны под разностью ОВП потенциалов диффундируют в катодную зону, где, вступая в реакцию с электроном и кислородом образуют воду, и формируют ЭДС. Так, ускорение реакций на катоде в теории может значительно увеличить ток протонов, ЭДС и эффективность всей системы. Одним из способов интенсификации катодных реакций может быть гипероксигенация катода. Так, в ходе эксперимента в анодную камеру были помещены образцы почвы из г. Скамара и г. Шарлык с питательной средой LB, в катодную камеру был добавлен раствор перекиси водорода с концентрацией перекиси 3%. В результате можно наблюдать значительную интенсификацию электрогенеза и мощности МТЭ. (рис.1).

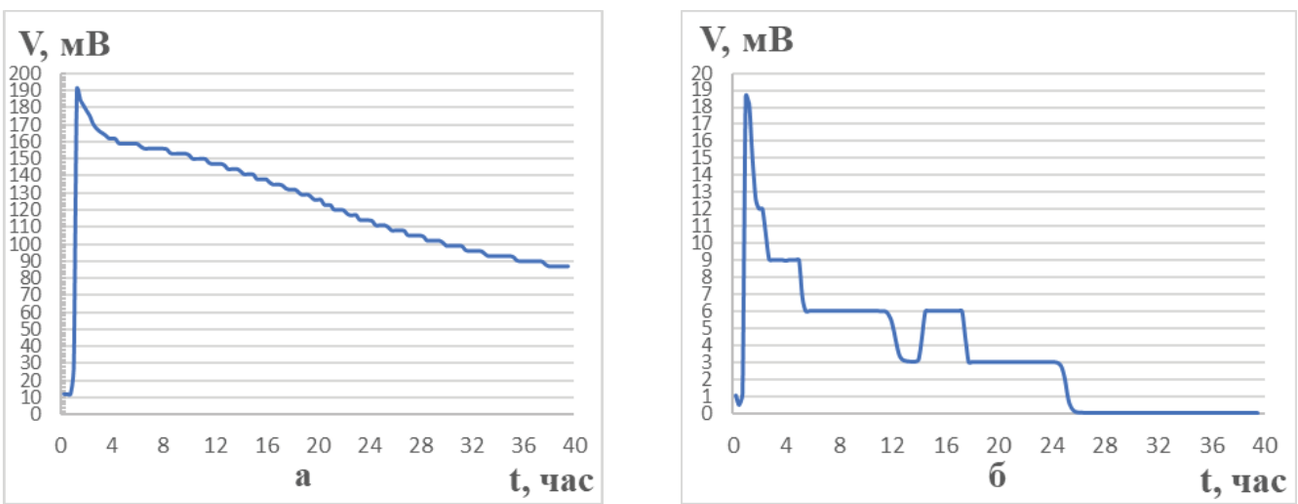


Рис. 1. Графики изменения электрогенеза МТЭ.
А — с изменением катодной камеры в г. Скамара. Б — без изменений катодной камеры в г. Скамара.

В результате исследования было выявлено, что модификация катодной камеры в следствие гипероксигенации электрода перекисью водорода может значительно влиять на увеличение мощности МТЭ, в данном случае в 8 раз.

НЕЙРОННАЯ АКТИВНОСТЬ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА С ВЫРАЖЕННОЙ КЛИНИЧЕСКОЙ АСИММЕТРИЕЙ

Павловский Ф.Н.[1], Гамалея А.А.[2], Томский А.А.[2], Седов А.С.[1]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия;*
[2]*Центр нейрохирургии им. ак. Н.Н. Бурденко, Москва, Россия*

Субталамическое ядро (STN) является одной из самых распространённых структур-мишеней при хирургическом лечении болезни Паркинсона (БП). Существуют данные о наличии когерентности между STN и областями SMA/M1 коры в верхнем бета-поддиапазоне (21-30 Гц). Некоторые исследователи связывают активность STN в нижнем бета-поддиапазоне (13-20 Гц) с передачей сигналов по непрямому, а в верхнем — по гиперпрямому пути.

Целью данной работы было изучение фоновой активности STN у больных с выраженной клинической асимметрией. Тяжесть проявления симптомов БП оценивал невролог по шкале UPDRS. В исследование были включены 7 пациентов, которым проводили микроэлектродную регистрацию (MER) одиночной активности и мультиканальную регистрацию LFP субталамического ядра во время нейрохирургических операций по вживлению электродов для хронической стимуляции глубинных структур мозга (DBS).

Мы обнаружили, что в STN, находящемся в “более аффектном” (соответствующем большему значению тяжести симптомов по UPDRS) полушарии, мощность осцилляций в верхнем бета-поддиапазоне значительно уменьшена. Аналогичный эффект был с меньшей достоверностью показан и для нижнего бета-поддиапазона. Данный эффект требует дальнейшего изучения в связи с озвученной ранее гипотезой о функциональной роли этих осцилляций. Различий в тета-, альфа- и гамма-диапазонах обнаружено не было.

Анализ одиночной активности STN показал различия только для пачечно-паузных (burst-like), но не тонических нейронов (клетки были поделены на типы при помощи метода иерархической кластеризации). Так, было показано, что в “более аффектном” STN активность burst-like нейронов характеризуется увеличенным коэффициентом вариации (cv), что, наряду с другими показателями, говорит о более пачечно-паузном характере активности. Частота импульсации (firing rate) при этом значимо не различалась между полушариями. Мы предполагаем, что патологическое состояние STN характеризуется переходом по меньшей мере части нейронов от регулярного к пачечно-паузному и ритмическому характеру активности.

БИСТАБИЛЬНАЯ ДИНАМИКА ДЮФФИНГА В ОЛИГОМЕРАХ ПИРИДИН-ФУРАНА

Петровский В.С., Маркина А.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки федеральный исследовательский цент химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

Интенсивное развитие наноустройств, действующих как системы с двумя состояниями, побудило к поиску наноразмерных молекулярных структур, динамика которых аналогична динамике бистабильных механических систем, таких как арка Эйлера и осциллятор Дюффинга. Особый интерес представляют молекулярные структуры, способные к спонтанным колебаниям и стохастическому резонансу. В этом докладе будет рассказано о моделировании коротких пиридин-фурановых пружин размером в несколько нанометров, демонстрирующих бистабильную динамику. Спонтанные вибрации достигается при приложении к одному из концов пиридин-фурановой пружины (Рис. 1b-c) постоянной силы, переводящей систему в бистабильное состояние. Другой конец пружины при этом зафиксирован.

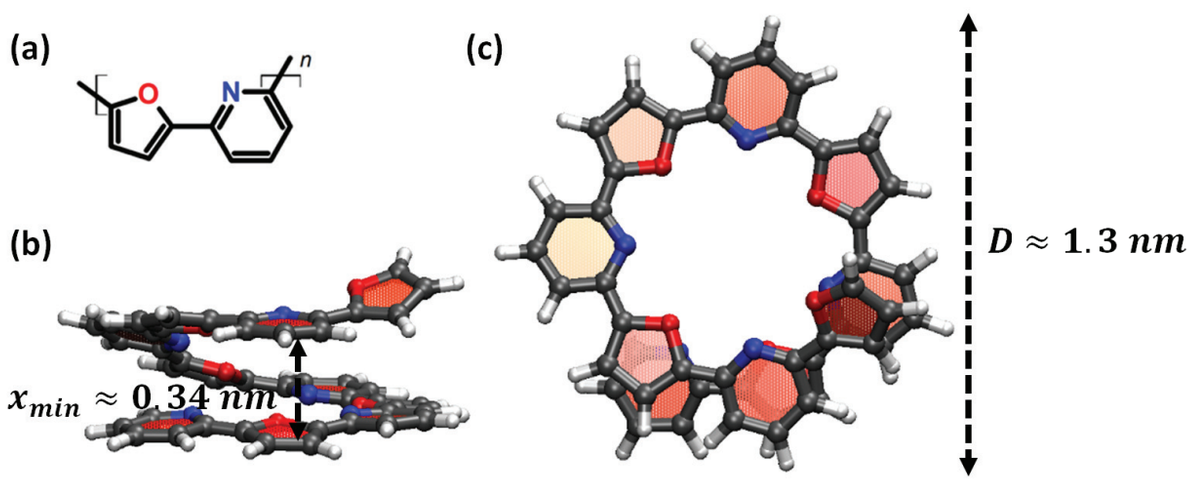


Рис. 1. (a) Мономер пиридин-фурана (ПФ) в цис-конформации.
(b-c) Спиральный олигомер ПФ5 в равновесном состоянии [1].

Для перехода в режим стохастическое резонанса необходимо лишь приложить слабое периодическое поле. Данные эффекты продемонстрированы и для случая, когда оба конца олигомера зафиксированы. Сами же переходы инфицированы тепловыми флуктуациями растворителя. Теоретическое описание результатов моделирование сделано в рамках модели осциллятора Дюффинга.

ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДИФИКАЦИЯ ПЛЕНОК ЧАСТИЧНО ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА РАЗНОЙ СТЕПЕНИ МОДИФИКАЦИИ

Петякин Н.В., Небогатикова Н.А.

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

В ИФП СО РАН несколько лет назад был предложен метод фторирования графеновых суспензий при комнатной температуре с использованием 2-3% плавиковой кислоты. Необходимо развитие методов управления свойствами получаемых диэлектрических материалов. Облучение ионами высоких энергий может использоваться для локальной модификации образцов, например для создания массивов квантовых точек графена в матрице фторграфена и локального термического отжига пленок за счет электронного канала передачи энергии от ионов к облучаемому материалу.

Путем нанесения фторированной суспензии на подложку Si с ориентацией (100) и последующего полного ее высыхания был получен ряд образцов тонких пленок частично фторированного графена. Образцы различались между собой временем (степенью) фторирования (4-28 дней). Часть полученных образцов были облучены высокоэнергетическими ионами Xe с энергией 167 МэВ. Доза облучения составляет ~$3\cdot10^{11}$ ионов/ $см^2$. Исследование морфологии образцов проводилось методом атомно-силового микроскопии (АСМ), методом вольт-фарадных характеристик (ВФХ) были определены встроенный и захватываемый пленкой заряды, а также методом вольт-амперных характеристик (ВАХ) были исследованы механизмы проводимости.

Измеренные ВАХ для пленок и до, и после облучения достаточно хорошо описываются линейной зависимостью при их построении в координатах log-log. Это позволяет предположить характер проводимости — проводимость ограниченная пространственным зарядом. Также обнаружен рост вертикальной проводимости пленок при приложении постоянного напряжения после облучения образцов примерно на 1 порядок, например с 10^{-3}-10^{-2} до 10^{-2}-10^{-1} А/$см^2$ для пленки фторированной 18 дней. Это может быть связано с локальным дефторированием пленок в области треков ионов.

Исследование пленок методом АСМ выявило, что пленки состоят из двух слоев, имеющих различную морфологию. Частицы с размерами ~0.2 мкм в диаметре и высотой ~8нм образуют равномерный, плотный нижний слой. Верхний слой начинает формироваться при фторировании в течение 7 дней и состоит из более крупных частиц (диаметр ~0.5 мкм, высота ~40 нм). Анализ АСМ не выявил принципиального изменения морфологии пленок при воздействии облучения. Анализ ВФХ показал, что до облучения пленки обладали преимущественно отрицательным встроенным зарядом ($|Q_f|$ ~ 3-$7\cdot10^{10}$ 1/$см^2$). Было выявлено, что облучение пленок приводит к формированию в них центров захвата положительного заряда, что приводит к смещению значений встроенного заряда в положительную область. Для каждого времени фторирования была проделана оценка количества таких центров на единицу площади (~$5\cdot10^{10}$ 1/$см^2$). Захватываемый пленками заряд (2-$7\cdot10^{10}$ 1/$см^2$) увеличивается по мере увеличения времени фторирования и слабо изменяется после облучения для пленок фторированных не более 11 дней. При последующем увеличении времени фторирования захватываемый заряд уменьшается, а также наблюдается его уменьшение при облучении в ~3 раза (до 0,5-$3\cdot10^{10}$ 1/$см^2$). Соотнеся поведение захватываемого заряда с данными АСМ, можно предположить, что центрами захвата зарядов являются границы частиц верхнего слоя пленки.

Показано, что облучение пленок фторграфена ионами высоких энергий перспективно в качестве управления диэлектрическими свойствами пленки фторграфена.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-72-10046.

РАЗДЕЛЕНИЕ ВКЛАДОВ ФОТОИНДУЦИРОВАННЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ $LINBO_3$:FE С ПОМОЩЬЮ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Пиляк Ф.С.[1], Куликов А.Г.[1], Писаревский Ю.В.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

Возможность управления функциональными свойствами кристаллических материалов посредством фотоиндуцированных деформаций, представляет большой интерес для задач стрейнтроники. При освещении могут одновременно наблюдаться различные по величине и времени формирования типы деформационных процессов. Каждый из них может найти свое применение, в связи с чем возникает потребность в разделении и оценке величин их вкладов.

В данной работе при помощи методики рентгеновской дифрактометрии с субсекундным временным разрешением разделены вклады конкурирующих эффектов в деформацию кристаллической решетки $LiNbO_3$:Fe (концентрация примеси 0,02%), возникающих при облучении лазером. Наиболее быстрая экспериментально наблюдаемая деформация составляет $3{,}5\cdot10^{-5}$ и может быть обусловлена фототоком поляронов, а ее предполагаемые времена формирования < 1 мс. Последующий более медленный процесс вызван комбинацией фотовольтаического и пьезоэлектрического эффектов (т.н. пьезофотовольтаи-

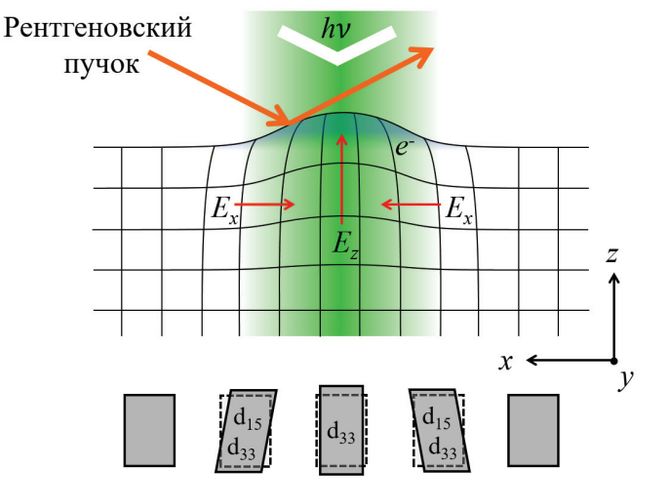


Рис. 1. Принципиальная схема наблюдаемых деформаций за счет компонент фотоиндуцированного электрического поля E_z и E_x, возникающих в кристалле в результате освещения и активации пьезоэлектрических модулей d_{33} и d_{15}.

ческий эффект), имеет величину $1{,}4 \cdot 10^{-5}$ и возникает за времена Максвелла (≈ 20 с). Экспериментальные результаты хорошо соотносятся с математическими расчетами деформаций с учетом электрических полей, формируемых объемным фотовольтаическим эффектом. Наиболее медленная (> 30 с) из наблюдаемых деформаций кристаллической решетки обусловлена суперпозицией тепловых эффектов (пироэлектрического эффекта и теплового расширения) и имеет величину $1{,}5 \cdot 10^{-4}$. Численные оценки их вкладов дают значения $6{,}3 \cdot 10^{-5}$ и $1{,}12 \cdot 10^{-4}$ соответственно.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части подготовки образцов кристаллов и в рамках гранта № 075-15-2021-1362 в части разработки методического подхода и проведении исследований, а также при поддержке РФФИ (проект 19-29-12037 мк) в части обработки экспериментальных данных.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПО СУБЪЕКТАМ РФ ИНФЕКЦИИ, ВЫЗВАННОЙ SARC-COV-2

Ботин А.С.[1,2], **Плоскирев А.Е.**[3]

[1]ГБУЗ НИИ Скорой помощи им. Н.В. Склифосовского ДЗМ, Москва
[2]Институт биохимической технологии и нанотехнологии РУДН, Москва
[3]Федеральный Исследовательский Центр Химической Физики РАН, Москва

Для оценки распространения SARC-CoV-2 используются различные модели и методы. Предсказательные модели на основе анализа ретроспективных данных не позволяют дать точную оценку, а методы теории искусственного интеллекта не дают оценку эффективности применяемых ограничительных мероприятий. Для оценки эффективности применяемых методов борьбы с распространением необходима модель, в которой учитываются влияния данных методов на факторы распространения. Целями данной работы было описание модели ретроспективных данных, которая бы отражала транспортные потоки по субъектам РФ с учетом ограничительных мер. Этапами работы были определение характеристик и взаимосвязей между ними в качестве модели и проверка точности составленной модели на выборке регионов, с характерной динамикой распространения инфекции. Основной характеристикой было выбрана транспортная связь субъектов с учетом организации противоэпидемических мероприятий на транспорте и в субъекте. Для составления модели используется графовое представление связей, приведенное на рисунке 1 для трех регионов, в которой каждый узел — субъект РФ. Ребра графа имеют направление и кратные. Вес ребер характеризует пассажиропоток с учетом введенных ограничений. Петли графа для каждого региона описывают распространение инфекции в субъекте.

Основная характеристика — коэффициенты эффективности противоэпидемических мероприятий. Коэффициенты для петель — мероприятия по ограничению передвижений внутри региона, для ребер — транспортные ограничения связи субъектов.

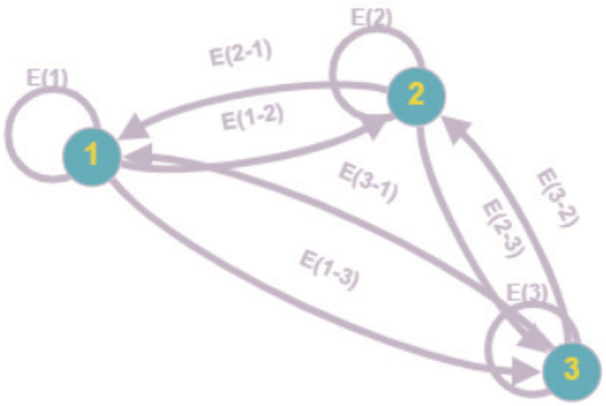


Рис. 1. Граф описывающий модель распространения для трех регионов — 1, 2 и 3.
На графе приведены ребра и петли, вес которых равен E(n-k) или E(n) соответственно.
E — параметр, описывающий совокупную эффективность ограничительных мероприятий.

Модель описывается как изменяющаяся во времени, для ретроспективной оценки ограничений и возможного прогнозирования эпидобстановки субъекте РФ на 7-14 дней.

Для проверки модели были выбрано время и субъекты, в которых присутствовали уникальные среди регионов противоэпидемические мероприятия и, как итог, прирост больных был меньше, чем в регионах, в которых их не использовали.

Результатом апробации модели на выбранных субъектах стало подтверждение своевременности введения ограничений на транспорте и перемещений внутри регионов.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ И КООРДИНАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОРФИРИНОВ С АСИММЕТРИЧНОЙ СИСТЕМОЙ ЗАМЕЩЕНИЯ

Плотникова А.О.[1], Иванова Ю.Б.[2], Пуховская С.Г.[1]

[1]Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
[2]Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

Порфирины и металлопорфирины широко распространены в природе и имеют большое биологическое значение. Многообразие соединений данного класса обусловлено уникальными свойствами порфиринов. Возможность варьирования природы периферических заместителей и центрального атома металла-комплексообразователя позволяет создавать соединения с необходимыми, заданными свойствами. Асимметрия архитектуры замещения привносит свои специфические проявления во все физико-химические свойства соединений.

В настоящей работе представлены результаты исследования спектральных, координационных и флуоресцентных свойств асимметрично замещенных производных 5,10,15,20-тетрафенилпорфирина (H_2TPP): 5-(4'-аминофенил)-10,15,20-трифенилпорфин (H_2P1), 5-(4'-глицинациламино-фенил)-10,15,20-трифенил-порфин (H_2P2), 5-(4'-N-третбутокси-карбонил-глицинаминофенил)-10,15,20-трифенилпорфин (H_2P3), которые получены путем присоединения заместителей в пара-положение одного из фенильных фрагментов.

Было проведено спектрофотометрическое исследование несимметрично-замещенных производных H_2TPP в системе АН — $HClO_4$. Получены кинетические параметры реакции образования цинковых комплексов в сравнении со структурным аналогом H_2TPP. Были сняты спектры флуоресценции для молекулярных и протонированных форм исследованных соединений.

В докладе обсуждается влияние химической модификации структурой части тетрафенильного лиганда на электронооптические, кислотно-основные и комплексообразующие и флуоресцентные свойства макрогетероциклических лигандов.

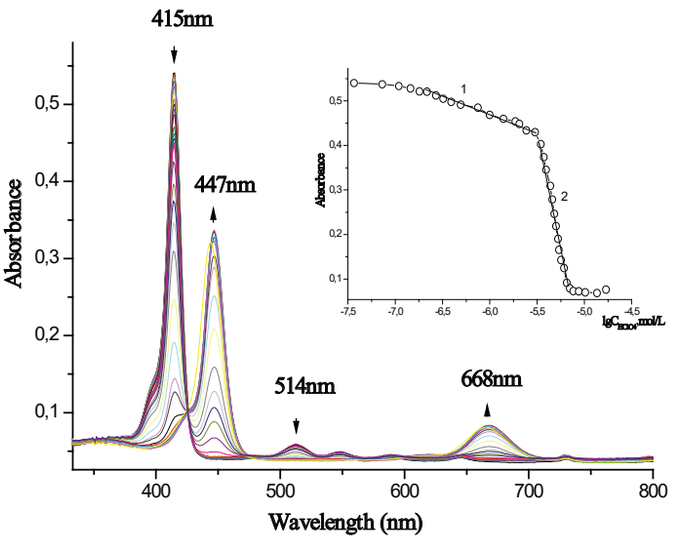


Рис. 1. Изменение ЭСП (А) и кривая спектрофотометрического титрования (λ 415 нм) (В) для H_2P2 в системе АН — $HClO_4$, (Спорф 6.05·10-6 моль/л; C_{HClO4} 0÷1.70·10^{-5} моль/л), Т = 298 К.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ТИОМОЧЕВИННЫМИ И ТИОСУЛЬФАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ С АЛЬБУМИНОМ

Покидова О.В.[1], Емельянова Н.С.[1], Кормухина А.Ю.[2], Новикова В.О.[1], Куликов А.В.[1], Санина Н.А.[1,2,3]

[1]Институт проблем химической физики, РАН, г. Черноголовка, Россия
[2]Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва
[3]Научно-образовательный центр «Медицинская химия» Московского государственного областного университета, г. Мытищи

Нитрозильный комплекс железа $[Fe(SC(NH_2)_2)_2(NO)_2]_2[Fe_2(S_2O_3)_2(NO)_4]$ представляет интерес в качестве потенциального средства для лечения сердечно-сосудистых заболеваний. Согласно литературным данным, он увеличивает жизнеспособность клеток фибробластов и демонстрирует цитопротекторные свойства. Известно, что при введении низкомолекулярных нитрозильных комплексов в кровяное русло, 90% будет связываться с белками плазмы, преимущественно с сывороточным альбумином. В связи с этим, целью настоящей работы явилось проанализировать взаимодействие данного перспективного комплекса с бычьим сывороточным альбумином (БСА) в аэробных условиях. На основании экспериментальных данных и теоретических расчётов мы полагаем, что в данных условиях фрагмент $[Fe(NO)(NO_2)]^+$ (продукт распада исходного комплекса с кислородом) может координироваться в гидрофобном кармане белка. Константа связывания комплекса с белком, измеренная по тушению собственной флуоресценции БСА, составляет 7,2·10^5 M^{-1} (рисунок 1а, б). Кроме того, с помощью реакции Грисса установлено, что комплекс в присутствии БСА медленнее генерирует NO, что свидетельствует о его стабилизации на поверхности белка за счет слабых межмолекулярных взаимодействий.

Таким образом, БСА может активно взаимодействовать с НКЖ и его продуктами аэробного распада и модулировать свойства комплекса как потенциального препарата в процессе его биотрансформации.

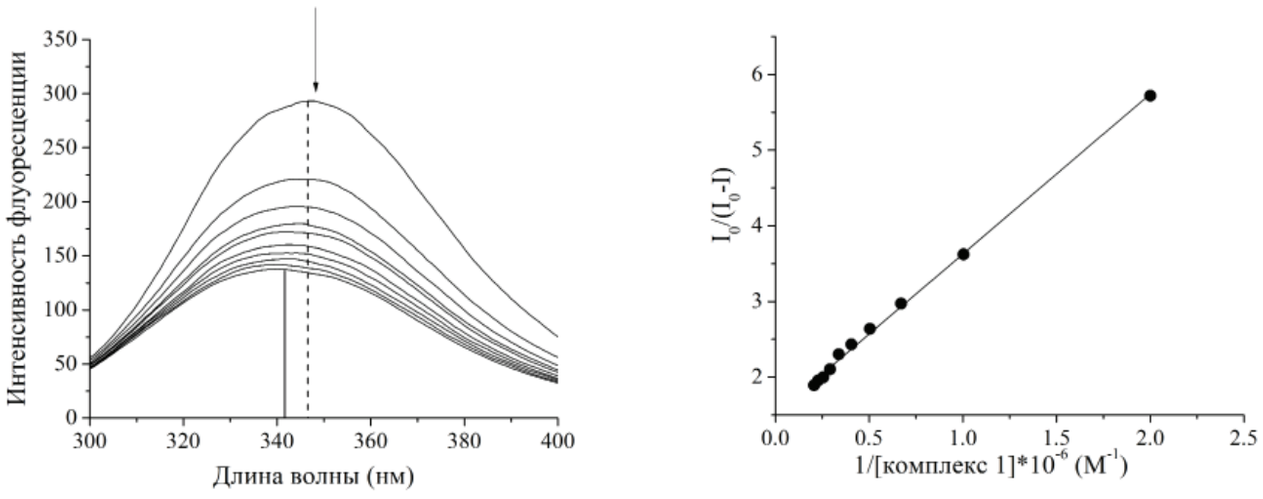


Рис. 1. (а) Тушение собственной флуоресценции БСА ($1\cdot10^{-6}$ М) при добавлении комплекса ($(0\text{-}7.19)\cdot10^{-6}$ М), λ_{ex}=290 нм, Трис-HCl буфер, pH 7.0, 23 °C. **(б)** Кривая Штерна-Фольмер для системы БСА-комплекс 1.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента № МК-1634.2021.1.3 и по теме Государственного задания, № гос. регистрации № АААА-А19-119071890015-6.

НАНОДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ЦЕРИЙ-СОДЕРЖАЩИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТОЧЕК ДЛЯ ЦЕЛЕЙ БИОИМИДЖИНГА

Попов А.Л.[1], Колманович Д.Д.[1], Столяров А.Ф.[1], Чукавин Н.Н.[1,2], Иванов В.К.[3]

[1]Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия
[2]Московский областной государственный университет, Москва, Россия
[3]Институт общей и неорганической химии РАН им. Н.С. Курнакова, Москва, Россия

Нанотехнологический подход позволяет получать новые функциональные материалы, перспективные в терапии и диагностике социально-значимых заболеваний. Одним из наиболее перспективных агентов для биоимиджинга являются углеродные наноточки (Qdots), которые обладают высоким квантовым выходом и низкой токсичностью, в отличие от кадмий- или селен-содержащих квантовых точек. Комбинация различных элементов в составе нанокомпозитов способна обеспечить мультифункциональность таких тераностических материалов, придавая им новые физико-химические свойства, а также определенную терапевтическую активность.

В качестве такого компонента, обладающего выраженной терапевтической активностью, нами использован церий. В рамках представленной работы гидротермальным методом синтезированы церий-содержащие углеродные наноточки (Ce-Qdots) путем термолиза раствора мочевины и лимонной кислоты в присутствии нитрата церия и полиэтиленполиамина (4 часа в автоклаве при температуре 240°C).

Функционализация квантовых углеродных наноточек с помощью церия придает им редокс-активность, что обеспечивает биологическую активность при попадании в клетку. Полученные Ce-Qdots обладают ультрамалыми размерами (2 до 4 нм), высокой степенью монодисперсности, а также яркой фотолюминесценцией в широком спектре.

Анализы цитотоксичности (Ce-Qdots) методом МТТ-теста на культуре МСК человека показал, что (Ce-Qdots) в концентрациях выше 3 мг/мл не являются токсичными и проявляют превосходную биосовместимость. Методом флуоресцентной микроскопии с использованием функции Z-stack изучен процесс эндоцитоза наноточек, который подтвердил высокую эффективность проникновения в МСК человека. Показано, что ультрамалые размеры позволяют эффективно поглощаться клетками и локализуются преимущественно в цитоплазме и лизосомах, а высокий квантовый выход и широкий спектр эмиссии обеспечивают визуализацию сравнимую с коммерческими красителями (например, SYTO9).

Наличие в структуре нанокластера Ce-Qdots церия в двух валентных состояниях (Ce^{3+}/Ce^{4+}) обеспечивает его функциональную активность, которая проявляется в способности разлагать пероксид водорода, предотвращая развитие окислительного стресса. Таким образом, разработанная тераностическая система обладает диагностической и терапевтической функцией, и способна выступать как единая наноплатформа для визуализации локальных областей редокс-активнсти в клетке.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 20-74-00086.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИТЕЛЛУРИДА РУТЕНИЯ

Попов Е.А.[1], Полотнянко Н.А.[1], Тюрин А.В.[2], Чареев Д.А.[1,3]

[1]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
[2]Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия
[3]Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, Россия

Надежные термодинамические характеристики необходимы для физико-химического моделирования условий образования месторождений платиноидов, к которым относится и рутений. Анализ литературных данных показал, что свойства $RuTe_2$ недостаточно изучены, а опубликованные значения термодинамических величин не всегда согласуются между собой. Поэтому получение новых термодинамических функций для кристаллического дителлурида рутения, являющегося синтетическим аналогом минерала, представляет несомненный интерес для исследования.

Образец получали методом «сухого» синтеза в вакуумированной кварцевой ампуле из простых веществ при температуре 550°C в течение 25 дней, после чего вещество извлекали, перетирали, запаивали в кварц и выдерживали при температуре 750°C в течение 3-х недель. Избыток теллура (10%) конденсировался на холодной части ампулы и легко отделялся. Порошок $RuTe_2$ исследовали методом рентгеновской порошковой дифрактометрии (Bruker D8 ADVANCE, излучение CuKα, Fe фильтр) и методом локального рентгеноспектрального микроанализа (электронный микроскоп TESCAN Vega II XMU). Результаты показали отсутствие примесных элементов и других фаз.

Изобарная теплоемкость C_p была изучена методами адиабатической (БКТ-3) и дифференциальной сканирующей калориметрии (Netzsch STA 449F1 Jupiter®) в общей сложности от 80 до 965 К. Отметим хорошее согласование величин теплоемкости, полученных с помощью различных калориметрических методов.

Использование полученных экспериментальных данных при температуре выше 298 К позволило рассчитать коэффициенты уравнений Майера-Келли (1) и Ходаковского (2) (в Дж/(моль·К):

$C_p = (76.1 \pm 0.7) + (1.8 \pm 0.3) \cdot 10^{-2}T - (3.4 \pm 0.2) \cdot 10^{5}T^{-2}$ (1),
$C_p = 3Rn(1 - (3.3 \pm 0.3) \cdot 10^{-3}T^{-2}) - (3.4 \pm 1.7) \cdot 10^{4}T$ (2).

Для изученного интервала температур были определены стандартные термодинамические функции: изобарная теплоёмкость Cp° (T), изменение энтальпии H°(T)-H°(0), абсолютная энтропия S°(T), приведенная энергия Гиббса Ф°(T) = –[G°(T)–H°(0)]/T), значения функций при 298.15 К приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения термодинамических функций для RuTe2 при 298.15 К

T, К	C_p°, Дж/(моль·К)	S°, Дж/(моль·К)	H°(T)-H°(0), кДж/моль	Ф°, Дж/(моль·К)
298.15	72.24±0.14	95.83±0.19	14.67±0.03	46.62±0.09

Используя величину $S^o(298.15)$ (табл. 1), справочные данные по абсолютной энтропии рутения и теллура, а также значение энтальпии образования $\Delta_f H^o(298.15)$ для $RuTe_2$ из литературного источника, мы оценили энергию Гиббса образования $\Delta_f G^o(298.15)$, равную -132.9 кДж/моль. Полученные в настоящей работе термодинамические данные в дальнейшем можно применять при изучении системы Te-Ru для решения различных фундаментальных и прикладных задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта «Синтез и термодинамические свойства минералов, содержащих благородные металлы» (№ 22-23-00893).

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТОДОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ГИДРОАЭРОЗОЛЕ

Порошин М.А., Евдокимов Н.Д., Сафандеев В.В., Белоедова Н.С.

Федеральное бюджетное учреждение науки «Федеральный научный центр гигиены им. Ф.Ф. Эрисмана» Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека

Токсикологические исследования играют значительную роль в сфере защиты здоровья человека и окружающей среды. В рамках таких исследований возможно определение как расчетных показателей ($ЛК_{50}$, $ЛК_{10}$, $ЛД_{50}$, $ЛД_{10}$ и пр.), так и установление класса опасности химических веществ (далее — ХВ) при разных путях их поступления. Наиболее значимым является ингаляционный путь поступления ХВ. Влияние ХВ на организм при таком пути поступления зависит от характера трудовой деятельности, концентрации ксенобиотиков в окружающей среде и мероприятий, направленных на предотвращение интоксикации ими.

В аккредитованном испытательном лабораторном центре ФБУН «ФНЦГ им. Ф.Ф. Эрисмана» Роспотребнадзора научные сотрудники рассчитывают показатели летальности и устанавливают класс опасности ХВ при ингаляционном пути их поступления с помощью систем экспонирования по типу «только нос». Ключевую роль в определении этих параметров играет концентрация ХВ в гидроаэрозоле.

Целью работы являлась сравнительная характеристика двух подходов, используемых для оценки концентрации ХВ в гидроаэрозоле. Для оценки концентрации ХВ были использованы два подхода. Первый — гравиметрический, был основан на точном измерении массы ХВ на каждой из семи ступеней каскадного импактора Андерсена. Конструкция импактора такова, что на каждой ступени оседали частицы ХВ, обладающие только определёнными аэродинамическими размерами. Совокупная концентрация ХВ в гидроаэрозоле рассчитывалась суммацией разности масс каждой ступени импактора до и после эксперимента.

Второй — нефелометрический — подход, был основан на регистрации фотоприемником рассеянного частицами ХВ излучения при помощи анализатора концентрации. Анализатор позволял регистрировать значения концентрации ХВ непрерывно, т.е. в режиме «реального времени».

В ходе ряда экспериментов было установлено, что гравиметрический подход помимо определения концентрации был способен также оценить распределение размеров частиц по фракциям. Однако, данный подход оказался временнозатратным и трудоемким. В отличие от гравиметрического, несомненными преимуществом нефелометрического подхода являлось малое время подготовки анализатора к работе и его непрерывный контроль за концентрацией частиц ХВ в гидроаэрозоле. К сожалению, второй подход не позволял рассчитать медиану среднего аэродинамического размера частиц и ее стандартного геометрического отклонения.

Таким образом, выбор в пользу использования в исследованиях каскадного импактора или анализатора концентрации зависит от приоритетности стоящих перед научными сотрудниками задач: необходимости оценки распределения частиц ХВ в гидроаэрозоле по фракциям, скорости вычисления концентрации и кратности отбора проб частиц ХВ в гидроаэрозоле. Для первой задачи предпочтительнее использовать каскадный импактор, для других — анализатор концентрации. По нашему опыту, при проведении токсикологических исследований, желательно совмещать оба подхода. В выполненных работах, нам удалось методически объединить эти подходы и внедрить их в рутинную практику в соответствии с требованиями тестов ОЭСР.

РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УРОВНЯ ЛОЖНОПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ СООТНЕСЕНИЙ ПЕПТИДНЫХ СИГНАЛОВ В МАСС-СПЕКТРАХ ПЕРВОГО И ВТОРОГО УРОВНЕЙ В ПРОТЕОМИКЕ

Постоенко В.И.[1,2], Иванов М.В.[2], Бубис Ю.А.[2], Левицкий Л.И.[2], Горшков М.В.[2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе, Федеральный исследовательский центр химической физики РАН им. Н.Н. Семенова

Протеомный анализ в скорострельной протеомике основан на использовании хроматомасс-спектрометрии. Сначала белки расщепляются на пептиды при помощи гидролиза с использованием специфических протеаз или химических агентов. Смесь пептидов проходит через хроматографическую колонку, ионизируются и поступает в масс-спектрометр, где регистрируются масс-спектры первого (MC1) и второго уровней (MC2). Спектры MC1 содержат информацию о значениях отношения массы к заряду и интенсивностей ионов пептидов. В то же время, спектры MC2 предоставляют подобную информацию для ионов фрагментов пептидов. Эти спектры используются для идентификации пептидов и, соответственно, белков. Одной из стадий анализа данных является сопоставление масс-спектров MC2 от идентифицированных пептидов с пептидными изотопными кластерами, детектируемыми в масс-спектрах MC1. Информация о кластерах пептидов напрямую используется в количественном анализе белков (интенсивность пиков в кластере является количественной метрикой белка), а также в дополнительной идентификации пептидов без использования масс-спектров фрагментации (так называемый match-between-runs подход).

В работе рассматривается проблема влияния ошибочного сопоставления спектров MC2 с изотопными кластерами спектров MC1 на количественный анализ протеомных данных. Задачей данной работы была оценка масштаба проблемы в существующих подходах, а также разработка нового подхода к независимому подтверждению получаемых сопоставлений. В рамках данной работы был реализован собственный алгоритм подтверждения получаемых сопоставлений на языке программирования Python, улучшающий точность определения ложноположительные сопоставлений. Разработан подход, позволяющий повысить эффективность количественного анализа с параллельным использованием нескольких программ для детектирования пептидных кластеров.

Для оценки качества работы алгоритмов использовалось несколько наборов данных, в числе которых образцы клеточной линии глиобластомы человека под воздействием интерферона и смеси протеомов клеточной линии HeLa и E.coli различных концентраций. На тестовых данных линии HeLa и E.coli в известных концентрациях алгоритм путем более точного определения ложных сопоставлений повысил количество дифференцированно экспрессированных белков, при этом число ложных не превысило заданного уровня достоверности. Последу-

ющее применение данного алгоритма на экспериментальных данных глиобластомы человека также позволило добиться существенного (до двукратного) увеличения числа дифференцированно экспрессированных белков, по сравнению с использованием стандартного алгоритма.

ГЕНЕРИРОВАНИЕ РАДИКАЛОВ ПРИ УЧАСТИИ ХОЛИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Потапова Н.В., Касаикина О.Т.

ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

Производные холина, включающие четвертичный аммониевый катион (R_4N^+), играют важную роль в живых организмах и являются основой для многих лекарственных препаратов. Эти соединения включают несколько групп: соли, содержащие R_4N^+ (холин, ацетилхолин и L-карнитин), и фосфотидилхолины, в которых R_4N^+ связан цвиттерионной связью с фосфатной группой (глиатилин, цитиколин и фосфатидилхолин). Ранее нами было показано, что гидропероксиды (ROOH) в сочетании с катионными поверхностно-активными веществами (ПАВ) и ацетилхолином (ACh) каталитически распадаются на радикалы с выходом в объем органического растворителя пероксильных радикалов RO_2•, способных инициировать такие радикальные процессы, как окисление углеводородов и липидов, полимеризация в объеме и с поверхности. Распад гидропероксидов происходит в смешанных микроагрегатах по схеме:

$$m\text{ROOH} + n\text{ACh} \leftrightarrow \{m\text{ROOH}\ldots n\text{ACh}\} \rightarrow \text{RO2}\bullet$$

В данной работе сопоставлено действие производных холина на распад ROOH в органической среде. Оказалось, что L-карнитин (LCh) и холин (Ch), как и ACh, образуют смешанные агрегаты с ROOH, в которых имеет место каталитический распад ROOH на радикалы. Методом динамического светорассеяния показано, что ACh и Ch диспергируются только в сочетании с ROOH, а LCh самостоятельно образует микроагрегаты, размер которых ~ 100 нм практически не изменяется в присутствии ROOH.

Изучена адсорбция Ch, ACh и LCh на микрокристаллической целлюлозе, и полученные порошки испытаны в качестве катализаторов распада ROOH (гидропероксид кумила) для инициирования радикальной полимеризации стирола. Измерения скорости полимеризации и оценка скорости инициирования полученными гетерогенными катализаторами показали, что Ch, ACh близки по активности в генерировании радикалов, а L-карнитин, хемосорбированный на целлюлозе, практически не влияет на скорость инициирования радикалов при распаде ROOH.

LCh, в отличие от Ch, ACh, является внутренней солью, в которой катион R_4N^+ блокирован собственным карбоксил-анионом, т.е. LCh не имеет внешнего противоиона. Возможно, LCh образует сетку на поверхности носителя, недоступную для ROOH, и поэтому не влияет на распад ROOH. Сходные результаты были получены при изучении окислительной конденсации ненасыщенных липидов на плоской поверхности кремниевых пластинок, инициированной распадом ROOH в адсорбированном монослое производных холина. Такие пластинки с иммобилизованными на них ACh, Ch и LCh погрузили на 2 часа в раствор ROOH и ненасыщенного липида — яичного фосфатидилходина (PCh), в состав которого входит около 60% остатков линолевой кислоты. Анализ полученных пластинок методом сканирующей электронной микроскопии (SEM) показал, что в среде, содержащей PCh и ROOH, на поверхности пластинок, предварительно обработанных ACh, Ch, выросли «холмики» сшитых фосфолипидов, а на пластинке с иммобилизованным LCh «холмики» не обнаружены.

Цвиттерионный фосфатидилхолин (PC) является природным поверхностно-активным веществом (ПАВ) и в сочетании с ROOH образует смешанные мицеллы, но, в отличие от катионных ПАВ, не катализирует радикальный распад ROOH. Взаимодействие фосфатидилхолина с солями Ca^{2+} и Mg^{2+} приводит к высвобождению холинового фрагмента, и полученная система подобно ACh способна катализировать радикальный распад ROOH и инициировать радикально-цепные процессы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №20-03-00753.

ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОСТИ СЕМИСПИРАЛЬНЫХ РЕЦЕПТОРОВ В КЛЕТКАХ ГРАНУЛЕЗЫ МЫШИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКИ КОДИРУЕМЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БИОСЕНСОРОВ

Почетная П.А.[1], Алешина Н.М.[1], Никишин Д.А.[1,2]

[1]Институт биологии развития им. Н.К. Кольцова РАН

[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Гуморальная регуляция роста фолликулов в яичнике является актуальной фундаментальной научной проблемой. Механизм действия многих факторов связан с семиспиральными рецепторами (GPCR). В связи с этим, определение функциональной активности GPCR является ключевой задачей в исследовании сигнальных путей в регуляции физиологического статуса фолликулярных клеток. Бета-аррестин является основным регулятором ак-

тивности GPCR. После связывания с лигандом бета-аррестин присоединяется к рецептору, что обеспечивает его десенситизацию. В дальнейшем, бета-аррестин играет роль адаптера к клатрину, что приводит к интернализации GPCR.

Для исследования GPCR был создан биосенсор, кодируемый плазмидой pmKate-barr2. Для эффективного клонирования ген β-аррестина был обработан по сайтам рестрикции Nhe I и Age I. Гены были сшиты с помощью лигирования. Для увеличения числа копий плазмиды был применен метод трансформации с использованием heat-shock. Далее бактерий посеяли на чашки с агаром и канамицином. Из полученных культур выделили плазмиды с концентрацией 541 нг/мкл. Следующим этапом работы было выделение первичной культуры и трансфекция. Для трансфекции были взяты клетки гранулезы мыши. Для проверки происхождения культуры к клеткам гранулезы был проведен анализ real-time PCR на соответствующие маркеры. В ходе липофекции в разные клетки были вставлены плазмиды YFP, mKate-barr и GFP-barr. К клеткам, накапливающим barr2-GFP и mKate-barr был добавлен ГСЖК, а к накапливающим YFP — агонист рецептора серотонина HTR2. Было проведено два эксперимента — с краткосрочным и шестичасовым воздействиями гормонов.

Результаты электрофореза показали, что нам действительно удалось получить ДНК β-аррестина-2 из живого материала и создать гибридный белок barr2-mKate2. Проверка чистоты первичной культуры показала очевидные отличия в экспрессии маркеров клеток гранулезы и теки. Что касается трансфекции, то клетки действительно получили плазмиды и экспрессировали биосенсоры. Для проверки активности биосенсоров был проведен эксперимент с лигандами в реальном времени. Для клеток, экспрессирующих barr2-GFP, был использован ГСЖК. Через 10 секунд после добавления изменений не наблюдалось. Через 2 минуты проявились отростки в углах клеток. Наконец, через 5 минут после добавления отростки клеток стали толще. К клеткам, экспрессирующим PH-YFP, добавляли коктейль серотониновых лигандов 5HT. Через 10 секунд биосенсор располагался около мембраны. В завершении эксперимента, через 7 минут от периферии клеток начали отходить желтые пузырьки. Для анализа работы barr2-mKate2 к клеткам добавляли ГСЖК. На контрольной культуре β-аррестин находился в цитоплазме и на периферии в равном количестве. Однако, в тех клетках, на которые воздействовал гормон, появилось множество лобоподий, а также везикулы с биосенсором. Таким образом, при длительном воздействии лигандов в клетках гранулезы наблюдаются признаки десенситизации семиспиральных рецепторов и их интернализации, что говорит об активации соответствующих сигнальных механизмов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-04-00303.

ПОЛУЧЕНИЕ ХЛОРСОДЕРЖАЩЕГО ДИЕНОВОГО КАУЧУКА МЕТОДОМ МЕХАНОХИМИЧЕСКОЙ ГАЛОИДНОЙ МОДИФИКАЦИИ, ИНИЦИИРОВАННОЙ ДАВЛЕНИЕМ НАБУХАНИЯ

Правада Е.С.[1], Андриасян Ю.О.[1], Карпова С.Г.[1], Попов А.А.[1, 2]

[1] ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН, Р.Ф., г. Москва, ул. Косыгина, д. 4
[2] РЭУ им. Г.В. Плеханова, Р.Ф., г. Москва, ул. Стремянный пер., 36

Механохимическая галоидная модификация, инициированная давлением набухания, была разработана Андриасяном Ю.О. и является перспективным направлением получения галогенсодержащих эластомеров. В данной работе представлены результаты модификации раствором хлорсодержащего модификатора полиизопренового каучука марки СКИ-3, структура которого схожа с хлоропреновым каучуком, широко используемым в адгезионных композициях, но не производимым на территории РФ. Для модификации был взят хлорсодержащий модификатор М1 ($C_{30}H_{28}Cl_{24}$) и смесь растворителей (бензол, нефрас 80/120).

Все резиновые смеси были приготовлены по стандартной рецептуре для СКИ-3: Н (немодифицированная), М-1 (содержащая технический углерод К-354), М-2 (с техническим углеродом К-354 в качестве усилителя) и М-3 (с добавлением оксида магния для установления металлооксидного механизма вулканизации и технического углерода К-354 в качестве усилителя). При их исследовании было обнаружено, что технический углерод К-354 не инициирует распад галогенсодержащего модификатора, оксид магния ингибирует процесс вулканизации, подтверждая протекание металлооксидной вулканизации, а также определены оптимальные температура и время вулканизации для каждого каучука.

Методы ЭПР и ИК-спектроскопии подтвердили присоединение хлора к полиизопрену. Исследование физико-механических и адгезионных свойств показало их небольшое ухудшение прочностных характеристик в результате процесса механохимической галоидной модификации. Стойкость полиизопрена к воздействию алифатических растворителей (нефрас 80/120) и термоокислительной деструкции повысилась в связи с увеличением полярности каучука.

Таким образом, можно сделать выводы, что:

- Изучение структуры модифицированного каучука 1,4-полиизопрена с применением ИК-спектроскопии и ЭПР указывает, что галоген присоединяется к макромолекуле в α-положении по двойной связи, вследствие чего дезактивируется последняя.
- Анализ полученных результатов показывает, что инициирование распада галогенсодержащего модификатора можно осуществить без применения технического углерода (К-354).

- Введение галогена в изопреновый каучук приводит к повышению его устойчивости к термоокислительной деструкции и маслобензостойкости.
- Проведенные исследования указывают, что можно получить хлорсодержащий диеновый эластомер с широким диапазоном содержания галогена.
- Механохимическая галоидная модификация, инициированная давлением набухания, приводит к понижению когезионной прочности хлорированного полиизопрена.

ЗВЕЗДООБРАЗНЫЕ БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ЛАКТИДА ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Пучков А.А.[1,2], Седуш Н.Г.[1,2]

[1]*Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН, Москва, Россия*
[2]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

В последнее время большое внимание уделяется разработке полимерных материалов, которые бесследно исчезают после выполнения своей функции. В рамках биомедицины перспективным классом соединений являются алифатические сложные полиэфиры, среди которых полилактид играет значительную роль. Благодаря высоким физико-механическим свойствам, биоразлагаемости и биосовместимости этот полимер широко исследуется научными группами по всему миру и находит свое применение в качестве материала для раневых покрытий, хирургических имплантатов, клеточных матриксов и систем адресной доставки и пролонгированного высвобождения лекарственных средств. Для направленного регулирования физико-химических свойств полилактида актуальным направлением является синтез олигомеров и полимеров разветвленного строения. Такие соединения характеризуются рядом преимуществ по сравнению с линейными аналогами, а именно: более высокой концентрацией концевых групп, более низкими значениями температуры плавления и стеклования, а также степени кристалличности полимеров, что приводит к более высокой скорости биодеградации.

В данной работе были синтезированы звездообразные 3-х, 4-х и 6-ти лучевые поли-L- и поли-D,L-лактиды и их амфифильные блок-сополимеры с метиловым эфиром полиэтиленгликоля со средней степенью полимеризации полилактидных лучей от 10 до 100 мономерных звеньев. С помощью ^{1}H-ЯМР спектроскопии была подтверждена молекулярная структура звездообразных полилактидов. Звездообразность синтезированных соединений была также подтверждена с помощью гель-проникающей хроматографии с использованием мультидетекторной системы. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии установлено влияние молекулярной архитектуры на термические свойства звездообразных поли-L-лактидов. Для изучения влияния гидрофильно-гидрофобного баланса, а также структуры амфифильных блок-сополимеров на размер образующихся наночастиц, методом замены растворителя были получены водные суспензии на основе звездообразных блок-сополимеров. Методами малоуглового рентгеновского рассеяния и динамического светорассеяния установлено, что звездообразные амфифильные блок-сополимеры способны образовывать в водной среде стабильные наночастицы с гидродинамическим диаметром от 10 до 59 нм. Морфология наночастиц была исследована с помощью просвечивающей электронной микроскопии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект №18-73-10079-П).

ОРГАНОКАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ЛИНЕЙНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ НОСИТЕЛЕЙ ПРОТИВОРАКОВЫХ ПРЕПАРАТОВ

Пучкова Ю.А.[1], Иваненко А.Д.[1,2], Седуш Н.Г.[1,2]

[1]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
[2]*Московский физико-технический институт, Москва, Россия*

Одним из основных направлений изучения самоорганизации линейных амфифильных блок-сополимеров, содержащих гидрофильный полиэтиленоксидный блок и гидрофобный полилактидный блок является разработка не только профилактических, но и эффективных терапевтических лекарственных комплексов для лечения и инфекционных (ВИЧ, туберкулез и др.), и неинфекционных (рак), а также аутоиммунных заболеваний и аллергии. Первым этапом в создании таких систем является получение стабильных нетоксичных монодисперсных наночастиц заданного размера, характеристики которых сохраняются в процессе лиофилизации и последующего ресуспендирования. Получение частиц в виде лиофилизата для инъекционного введения является необходимым условием для сохранения фармакологической активности лекарственного средства, его концентрации в носителе и осуществления заданной схемы высвобождения. Целью работы является исследование самоорганизации в водной среде линейных блок-сополимеров D,L-лактида и этиленоксида для создания на их основе частиц для

адресной доставки противораковых препаратов. Полимеризацией с раскрытием цикла лактида в присутствии органического безметаллового катализатора DBU были синтезированы амфифильные двойные и тройные блок-сополимеры лактида и этиленкосида, отличающиеся соотношением блоков. Индексы полидисперсности полученных сополимеров не превышали 1.2. Методом наноосаждения были получены водные суспензии наночастиц на основе синтезированных блок-сополимеров. Установлено, что суспензии монодисперсны и стабильны, средний размер и дзета-потенциал частиц составляют 20-30 нм и -15±5 мВ, морфология сферическая. Методом лиофильной сушки водных суспензий были получены лиофилизаты наночастиц. Установлено, что характеристики частиц на основе двойных блок-сополимеров с длиной гидрофобного блока 10 и 30 звеньев после ресуспендирования лиофилизатов полностью совпадают с исходными. Способность к полному ресуспендированию, наряду с размером и стабильностью частиц на основе двойных блок-сополимеров лактида и этиленоксида делают их перспективными для создания наносомальных лекарственных форм адресного действия.

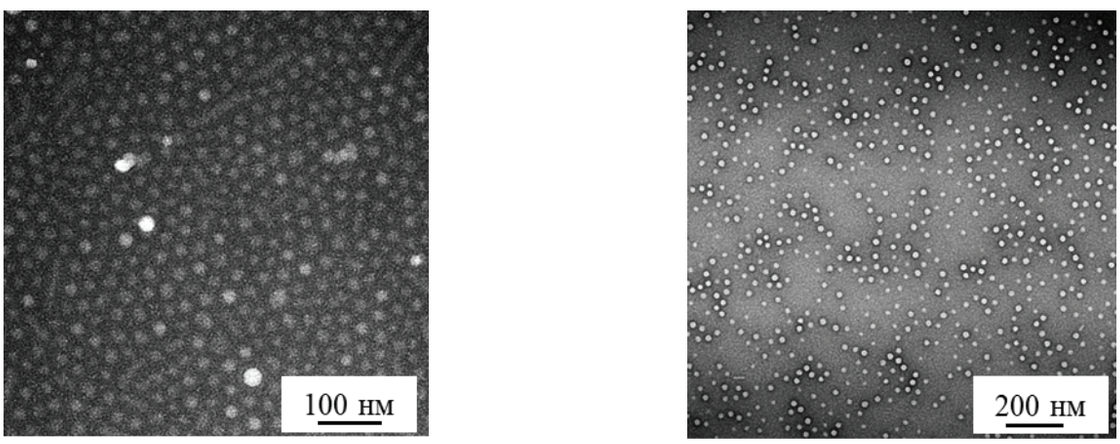


Рис. 1. Снимки просвечивающей электронной микроскопии водных суспензий на основе двойного (а) и тройного (б) блок-сополимера, с длиной полилактидного блока 60 звеньев.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ АГЕНТЫ BIS(BODIPY)

Равчеева Е.А.[1,2], Калягин А.А.[1], Антина Л.А.[1].

[1]*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*
[2]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

Среди большого числа бордипиррометеновых красителей (BODIPY) особый интерес представляют ковалентно связанные BODIPY димеры, свойства которых во многом выгодно отличаются от мономерных аналогов.

Цель исследования заключалась в сравнительном анализе структуры и спектральных характеристик серии новых bis(BODIPY) люминофоров: декаметилзамещенного (**1**), октаметилзамещенного (2), β,β′–дибром октаметилзамещенного (3) 3,3′-bis(BODIPY) в растворах органических растворителей.

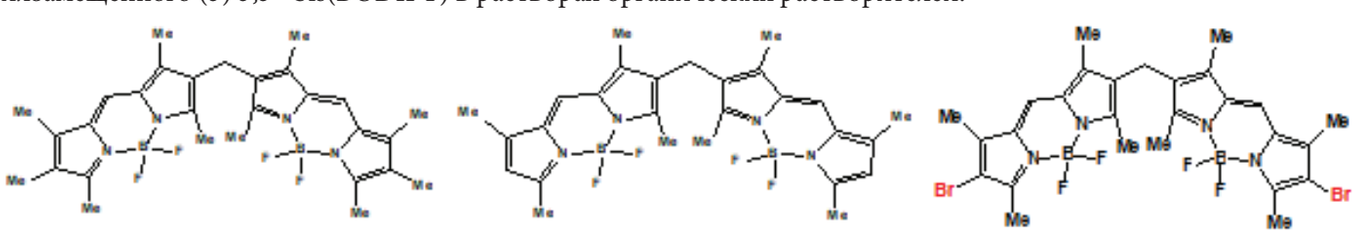


Рис.1. Объекты исследования.

Благодаря особенностям строения, флуоресцентные свойства димеров bis(BODIPY) оказались чрезвычайно чувствительны к природе среды. Если в неполярных средах наблюдается практически стопроцентная интенсивность флуоресценции комплексов, то в полярных, протоно- и электронодорных растворителях, происходит практически полное тушение флуоресценции вследствие как универсальной сольватации, так и специфических взаимодействий красителей с молекулами электроно- и протонодороных растворителей. Величина времени жизни флуоресценции также зависит от природы растворителя и изменяется в диапазоне от 0.9 до 3.5 нс. Учитывая биосовместимость борфторидных комплексов дипиррометенов, полученные bis(BODIPY) люминофоры можно рекомендовать для разработки на их основе флуоресцентных зондов полярности среды. Это особенно значимо, поскольку полярность играет ключевую роль в химии и биологии, ее изменения в клеточных структурах сви-

детельствует о возможном протекании патологических изменений в организме и может способствовать ранней диагностике таких заболеваний как болезнь Альцгеймера, диабет, цирроз печени и рак.

Величина квантового выхода флуоресценции комплекса (**3**) в среднем на 30% ниже, по сравнению с соединениями (**1**) и (**2**). Введение в структуру молекулы атомов галогена приводит к генерации синглетного кислорода (квантовый выход синглетного кислорода ~20% в бензоле, толуоле и ~5% в этаноле), интенсивность которой также зависит от природы растворителя. Исследуемые соединения показали достаточно высокую фотостабильность в растворах органических растворителях при облучении УФ светом (λ=365 нм). Это позволяет рекомендовать соединение **(3)** в качестве мягкого агента ФДТ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Ивановской области в рамках научного проекта № 20-43-370011.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ГИББСА СОЛЬВАТАЦИИ КАТИОНА NA^+ В ДМСО ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Розов Т.П.[1,2], Отлётов А.А.[2], Миненков Ю.В.[2]

[1]Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва
[2]ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва

Взаимодействие ионов с растворителем является движущей силой многих физико-химических процессов, включая циклы заряда–разряда аккумулятора, разделение смесей, органический синтез, растворение и фармакологическую динамику лекарственных препаратов.

В данной работе определена свободная энергия Гиббса сольватации (ΔG_{solv}) иона Na^+ в диметилсульфоксиде (ДМСО) с помощью кластерно-континуумной модели. В рамках этого подхода молекулы/ионы растворенного вещества окружаются несколькими молекулами растворителя с образованием кластера, имитирующего специфические взаимодействия растворенного вещества и растворителя. Затем кластер помещается в диэлектрический континуум для имитации неспецифических взаимодействий с растворителем.

Расчеты были выполнены на основе двух термодинамических циклов, отличающихся представлением начального состояния молекул растворителя. В рамках *мономерного* цикла растворитель описывается в виде отдельных молекул, в рамках *кластерного* — в виде соответствующих ассоциатов молекул. Полученные теоретические значения ΔG_{solv} сравнивались с экспериментальной оценкой -92.7 ккал/моль из справочника Y. Marcus. Энергии Гиббса сольватации, вычисленные с помощью мономерного цикла, лучше согласуются с экспериментальной величиной, что подтверждает сделанные ранее выводы для системы Li^+ — ДМСО.

В то же время, следует отметить, что предсказанные с помощью мономерного цикла значения ΔG_{solv} оказываются чувствительными к компонентам квантово-химического приближения. Во-первых, критически важным оказался эффект от экстраполяции DLPNO-CCSD(T) электронных энергий на бесконечный базисный набор. Во-вторых, разброс предсказанных ΔG_{solv} в зависимости от конкретной континуумной модели сольватации составляет ~10 ккал/моль. В-третьих, колебательная термодинамическая поправка, необходимая для перехода к энергии Гиббса, варьируется в пределах 10 ккал/моль в зависимости от протокола обработки гармонических колебательных частот ниже 30 $см^{-1}$.

Использование приближения DLPNO-CCSD(T) и модели сольватации SMD со стандартной обработкой низких частот колебаний приводит к энергии Гиббса сольватации ΔG_{solv}=–100.1 ккал/моль. При использовании подхода Ш. Гримме для оценки колебательной энтропии для низких частот полученная ΔG_{solv} = -93.4 ккал/моль хорошо согласуется с экспериментальными данными.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ АНИОН-РАДИКАЛЬНЫХ И ДИАНИОННЫХ СОЛЕЙ ТРАНС-ПЕРИНОНА

Романенко Н.Р., Фараонов М.А., Конарев Д.В.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, РФ

Полициклические π-сопряженные молекулы традиционно используются в качестве красителей и пигментов. Однако в последнее время подобные соединения рассматриваются как эффективные полупроводниковые материалы в солнечных элементах, светодиодах и т.д.

В ходе данной работы нами было исследовано восстановление молекул органического красителя транс-перинона в различных экспериментальных условиях.

Впервые были получены и охарактеризованы радикал-анионная {криптанд(K^+)}[перинон$^{\bullet-}$] (**1**) и дианионная $\{PPN^+\}_2$[перинон$^{2-}$]·$2C_6H_4Cl_2$ (**2**) соли транс-перинона в виде монокристаллов. Соли имеют слоистое строение.

Радикал-анионы перинон$^{\bullet-}$ образуют димеры с сильным π–π взаимодействием в **1**, тогда как дианионы перинон2– в 2 полностью изолированы друг от друга. Димеры [перинон$^{\bullet-}$]$_2$ имеют триплетное возбужденное состояние при температурах выше 50 К с сильным магнитным взаимодействием спинов (J/kB = — 38 К).

Помимо этого, были получены кристаллы смешанной соли {криптанд(K$^+$)}[(перинон)$_{0.5}$(Ga^{III}ClPc)]–·3C$_6$H$_4$Cl$_2$ (**3**), содержащей два анионных хромофора — транс-перинон и фталоцианин галлия. Радикал-анионы перинон$^{\bullet-}$ изолированы, в то время как фталоцианины образуют димеры {Ga^{III}ClPc}$_2^{\bullet-}$ с сильным π–π взаимодействиями. Димер содержит один спин S = 1/2, также в димерах наблюдаются довольно сильные магнитные взаимодействия с Θ = — 24 К.

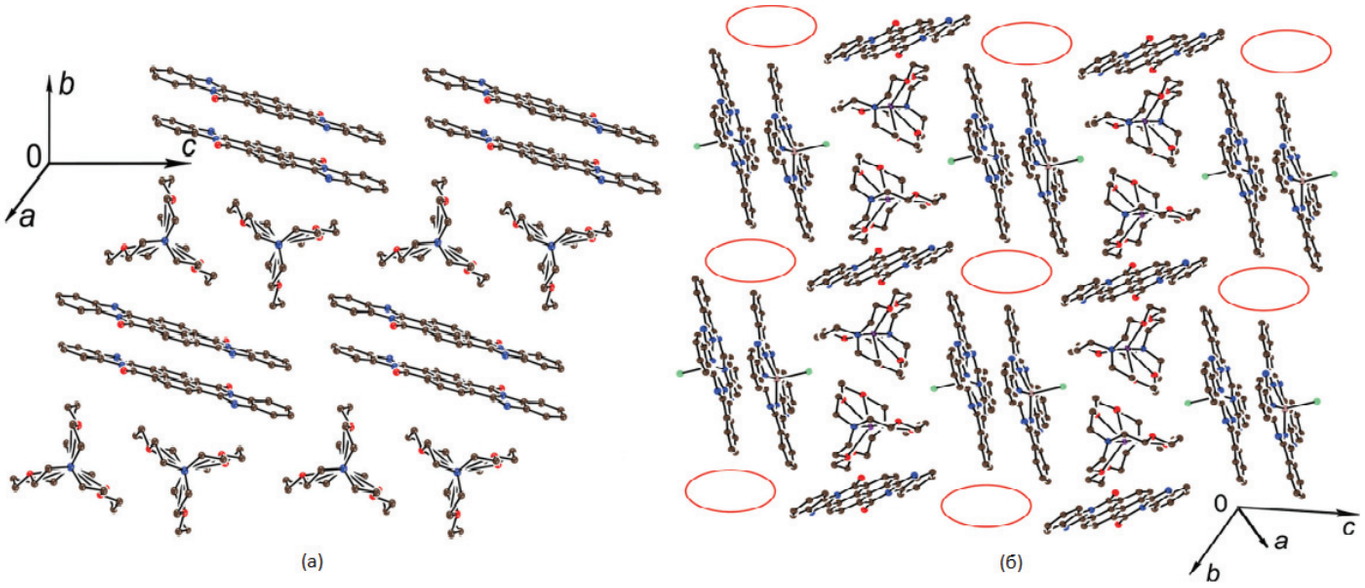


Рис. 1. Кристаллическая структура соли {криптанд(K$^+$)}[перинон$^{\bullet-}$] (а) и {криптанд(K$^+$)}[(перинон)$_{0.5}$(Ga^{III}ClPc)]$^-$·3C$_6$H$_4$Cl$_2$ (б).

Таким образом, были получены и охарактеризованы анионные соли транс-перинона. Транс-перинон показал себя перспективным соединением для получения координационных комплексов с металлами или соединений, содержащих другие хромофоры.

Исследования частично поддержаны Государственным заданием № АААА-А19-119092390079-8.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В МИКРОКАПЛЕ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ НА ПОВЕРХНОСТИ

Рощин Д.Е., Патлажан С.А.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

В течение последних нескольких десятилетий активно развивается такая междисциплинарная область, как микрофлюидика. В рамках данного направления становится возможным точное манипулирование микрообъемами жидкости, в том числе формирование разнообразных дисперсных систем из несовместимых жидкостей со свойствами, которые раньше были недостижимыми, например абсолютно монодисперсных эмульсий или многокомпонентных композитных капель с точно заданными размерами каждого из слоев. Благодаря возможности создавать различные гетерогенные системы с точно заданными свойствами, появились новые способы синтеза полимерных частиц и микрокапсул, служащих для целевой доставки лекарственных средств, инкапсуляции клеток для биологических исследований и многих других важных лабораторных, а в перспективе и промышленных приложений. В связи с этим актуальной стала задача о моделировании процессов полимеризации в микрообъемах жидкости.

В данной работе рассмотрен процесс полимеризации в микрокапле из мономера, погруженного в несовместимую с ним среду. В окружающей среде растворен инициатор (нерастворимый в мономере), распадающийся на инициирующие радикалы, которые, сталкиваясь с поверхностью капли мономера, инициируют процесс радикальной полимеризации. Построена математическая модель, распространяющая метод моментов, который широко использовался для кинетического моделирования процессов радикальной полимеризации, на случай пространственно-неоднородного распределения компонентов. Рассматривались процессы зарождения, роста и обрыва цепи без учета переноса цепи на какой-либо из компонентов системы. В рамках данной модели учитыва-

лось изменение коэффициентов диффузии каждого из компонентов от изменяющейся в процессе полимеризации вязкости среды внутри капли и среднего размера формирующихся полимерных цепей.

В качестве варьируемых параметров были выбраны радиус микрокапли и концентрация инициатора в окружающей среде. В результате было обнаружено, что в зависимости от комбинации этих параметров могут формироваться как полимерные микрочастицы (конверсия мономера оказывается полной по всему радиусу капли), так и капсулы, в которых слой полимера локализован возле границы. Было найдено, что толщина такого слоя увеличивается при уменьшении радиуса капли и при увеличении концентрации инициатора в окружающей среде. При рассмотрении временной зависимости средней конверсии в микрокапле обнаружены кривые сложной формы, характерные для полимеризации до глубоких степеней превращения.

В перспективе полученные данные могут быть использованы для разработки метода формирования полимерных микрочастиц и микрокапсул более простым способом, не задействующим поверхностно-активные вещества и дополнительные внешние источники энергии помимо необходимых для инициирования полимеризации.

Работа выполнена при финансовой поддержке госбюджета (госзадание ФИЦ ХФ РАН по теме 0082-2019-0005).

МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ НЕСТАБИЛЬНОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ЛИТИЯ

Рулев А.А.[1,2], Кондратьева Е.О.[1]

[1]*Лаборатория химических источников тока ФИЦ ХФ РАН*
[2]*Факультет наук о материалах МГУ*

Проблема морфологической нестабильности лития является одним из ключевых препятствий для создания высокоемких литий-металлических аккумуляторов. Несмотря на то, что эта проблема известна достаточно давно, на данный момент не существует ни удовлетворительно работающих способов ее подавления, ни общепризнанного механизма, объясняющего такую морфологическую нестабильность.

Данная работа посвящена установлению механизма развития морфологической нестабильности лития, а также предложению возможных путей ее решения. Осаждение лития изучалось различными методами микроскопии, в том числе in situ оптической микроскопией. Эксперименты проводились на максимально идеализированных модельных системах, что позволило обнаружить некоторые феномены, которые не наблюдались ранее. Так, было показано, что вначале литий осаждается без образования вискеров, и продолжительность этого периода может быть весьма высокой. На основе этих наблюдений был предложен механизм, представленный на рисунке:

Данный механизм подразумевает, что причиной роста литиевых вискеров является накапливающееся в результате осаждения лития механическое напряжение, а транспорт атомов лития к основанию растущего вискера реализуется путем поверхностной диффузии. Таким образом, предложенный механизм является существенным дополнением к существующему механизму роста оловянных вискеров, и предлагает некоторые пути к созданию металлического литиевого анода.

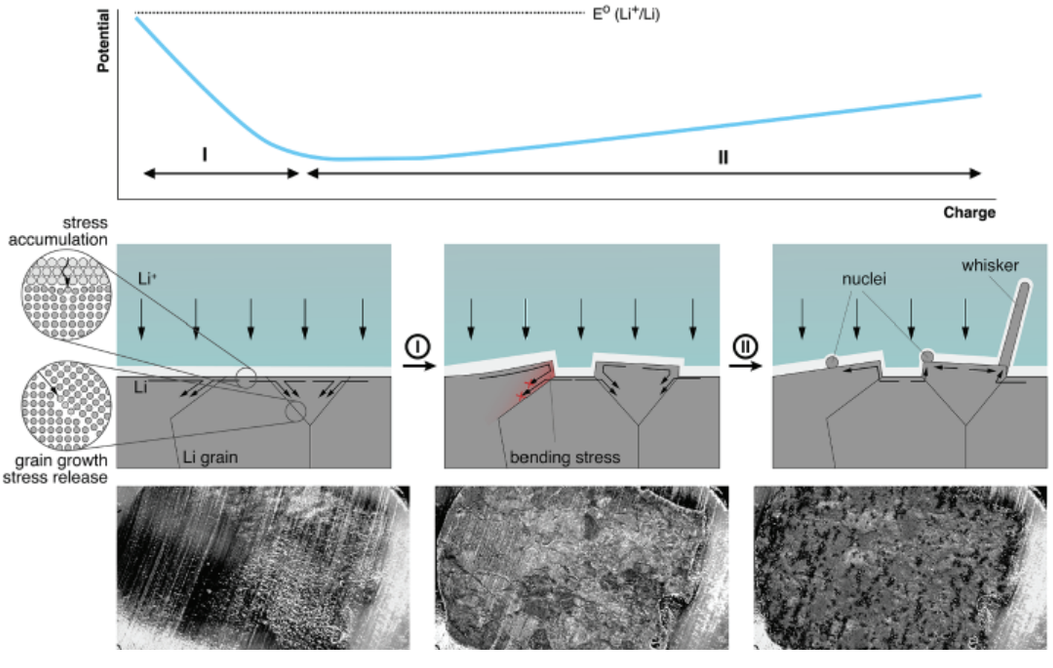


Рис. 1. Схема развития морфологической нестабильности лития при его электроосаждении и оптические микрофотографии поверхности литиевого электрода в процессе осаждения.

ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР В ОБЪЕМЕ И НА ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Рупасов А.Е.[1,2], Данилов П.А.[1], Смирнов Н.А.[1,2], Кудряшов С.И.[1], Заколдаев Р.А.[2]

[1]*Физический институт им. П.Н. Лебедева, 119991 Москва, Россия*
[2]*Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Россия*

Взаимодействие фемтосекундных лазерных импульсов с диэлектриками представляет большой интерес с точки зрения фундаментальной физики и приложений. При взаимодействии интенсивных лазерных импульсов с диэлектриком в объеме материала могут образовываться постоянные структуры, возникающие за счет ближнепольного рассеяния и плазмоники. Объемные структуры в данном случае представляют собой дефекты из субволновых периодических структур, напоминающих LIPSS (лазерно-индуцированные периодические поверхностные структуры) с измененным показателем преломления. К наиболее перспективным технологиям относятся запись информации, оптические элементы, волноводы, дифракционные решетки и др.

На сегодняшний день механизм образования объемных периодических структур в диэлектрических материалах до конца не ясен. Вопрос об образовании электронно-дырочной плазмы и взаимодействии с электромагнитными полями вблизи фокальной плоскости остается открытым. В прозрачном материале отсутствует линейное поглощение падающего лазерного излучения. Остается также вопрос о механизмах дефектообразования, в случае кремнеземных материалов механизмы образования могут быть связаны с фотоиндуцированными разрывами напряженных мостиковых связей Si-O-Si, в результате за счет миграции кислорода и кремния в область лазерного взаимодействия материал уплотняется. Во флюорите механизмы могут быть связаны с парами Френкеля, где ион F- мигрирует через кристаллическую решетку. Поэтому фундаментальный механизм массопереноса, предшествующий формированию объемных нанопреломляющих нанопокрытий в кремниевых диэлектриках, необходим для широкой настройки и оптимизации оптических характеристик таких нанофотонных структур.

Таким образом, в данной работе мы сообщаем об ультракороткой лазерной генерации структур с двойным лучепреломлением в объеме флюорита. Структуры были получены путем облучения лазерными импульсами различной длительности, энергии импульса и длины волны 515 и 1030 нм. Измерялись фазовые сдвиги, размеры (продольная протяженность) полученных структур в объеме флюорита.

Эти и другие дополнительные исследования проливают свет на последующие микроскопические процессы, лежащие в основе формирования объемных двулучепреломляющих структур во флюорите и в других диэлектриках.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-71-10103).

НОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ПРЯМОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ТОПЛИВА В КИНЕТИЧЕСКУЮ ЭНЕРГИЮ ДВИЖЕНИЯ ЗАБОРТНОЙ ВОДЫ

Садыков И.А., Авдеев К.А., Аксенов В.С., Фролов С.М., Шамшин И.О.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

Современные движители катеров и судов на основе гребных винтов обладают рядом недостатков. К ним относятся: а) кавитационное разрушение винтов при скоростях выше 50-60 узлов (90-110 км/с); б) потери в системах двигатель внутреннего сгорания — редуктор — вал — винт и в) наличие подвижных частей. В настоящее время в ФИЦ ХФ РАН разрабатываются новые технологии прямого преобразования химической энергии топлива в кинетическую энергию движения забортной воды при сжигании углеводородного топлива в дефлаграционном и детонационном режимах. Прямое преобразование энергии топлива в движение водного транспортного средства происходит благодаря передаче импульса водной среде от ударных и детонационных волн с образованием реактивной струи, образующей тягу. Такие технологии позволят приводить катера и суда в движение без традиционных гребных винтов в отсутствие каких-либо скоростных ограничений, вызванных явлением кавитации.

Предложены два новых принципа прямого преобразования химической энергии топлива в кинетическую энергию движения забортной воды: через передачу импульса водной среде от периодической детонации топливной смеси и через организацию пульсирующего горения топливной смеси в днищевой каверне судна. Проведены экспериментальные и расчетные исследования, направленные на оптимизацию условий передачи импульса от ударных/детонационных волн к водной среде и условий горения горючей смеси над свободной поверхностью воды в полузамкнутых объемах. Указанные принципы реализованы в двух движительных устройствах: импульсно-детонационном гидрореактивном движителе (ИДГРД) и в специально спрофилированной газовой каверне под днищем скоростного катера. Проведены экспериментальные и расчетные исследования, направленные на повышение тяговых характеристик ИДГРД при различных рабочих частотах, а также на повышение толкающей

и подъемной сил при организации пульсирующего горения в днищевой газовой каверне. Получены следующие важнейшие результаты:

1) Прямое преобразование химической энергии топлива в кинетическую энергию движения забортной воды через передачу импульса водной среде от ударных волн наиболее эффективно при условии, что в воде присутствуют газовые пузырьки, повышающие её сжимаемость, а величина объёмного газосодержания воды составляет 20%–30%. В этих условиях на лабораторном образце ИДГРД удалось получить тягу до 40 Н и удельный импульс до 600 с.
2) Прямое преобразование химической энергии топлива в кинетическую энергию движения забортной воды через организацию пульсирующего горения топливной смеси в днищевой каверне судна наиболее эффективно при использовании быстрых режимов горения вплоть до детонации и при отрицательном дифференте днищевой каверны. В этих условиях на лабораторном образце днищевой газовой каверны удалось получить тягу до 10 Н и удельный импульс до 500 с.

На основе лабораторных исследований спроектированы и изготовлены образцы движителей для испытаний на открытой воде в составе модельных катеров. В испытаниях доказано, что как ИДГРД, так и днищевая газовая каверна способны приводить модельный катер в движение. Таким образом, созданы научные основы для проектирования движителей нового типа для скоростного водного транспорта.

БЕТА-АКТИВНОСТЬ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА ПРИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА

Сайфулина К.Э.[1], Белова Е.М.[1], Филюшкина В.И.[1], Гамалея А.А.[2], Томский А.А.[2], Седов А.С.[1]

[1]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН*

[2] *Национальный медицинский исследовательский центр нейрохирургии имени академика Н.Н. Бурденко*

Основным электрофизиологическим биомаркером двигательных нарушений при болезни Паркинсона (БП) считается повышенная мощность бета-активности в субталамическом ядре (СТЯ) головного мозга. При приеме препарата леводопа или при электрической стимуляции СТЯ, если эти методы оказываются эффективными, симптомы подавляются и состояние пациента улучшается. Улучшение сопровождается снижением мощности бета-активности. Чаще всего анализируют среднюю мощность в частотном диапазоне или амплитуду пика мощности. Целью нашего исследования было выяснить, можно ли использовать в качестве биомаркеров состояния другие параметры: количество пиков в бета-диапазоне и их центральную частоту.

В исследовании приняли участие 6 пациентов с БП. Пациентам в СТЯ были установлены с наружным выведением электроды для глубинной стимуляции, с них велась запись локальных потенциалов (LFP). Пациенты во время записи находились в состоянии спокойного бодрствования, запись делилась на две части: до и после приема леводопы. Состояние пациентов оценивалось с помощью двигательных тестов, у всех после приема леводопы наблюдалось улучшение клинических симптомов. На основе записей от 8 контактов, расположенных в разных частях электрода, путем вычитания мы получили 30 биполярных сигналов, соответствующих 30 пространственным зонам СТЯ. Далее мы рассчитали спектральную мощность, выделили пики в высокочастотном

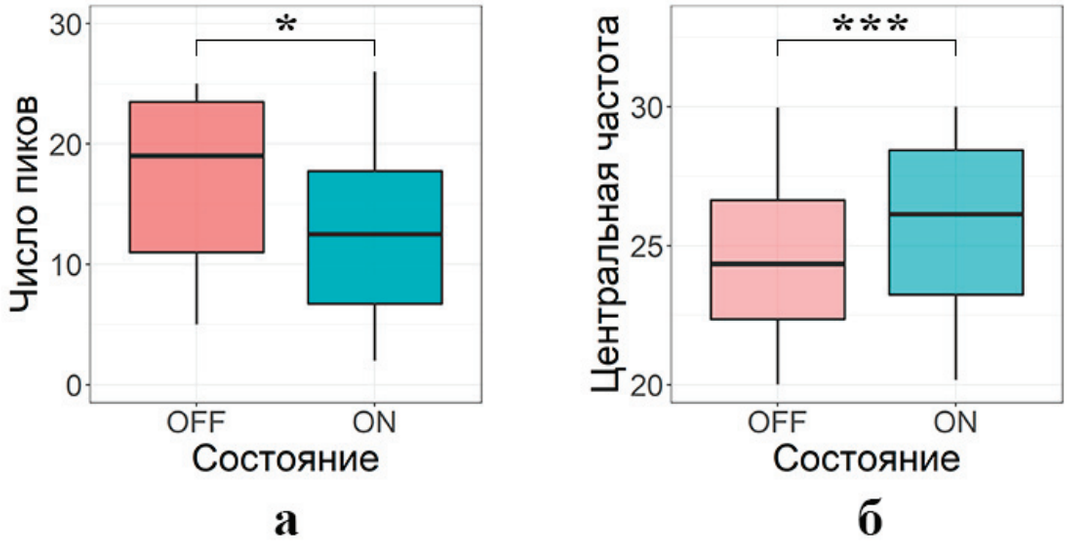


Рис. 1. а. Число пиков высокочастотной бета-активности при улучшении состояния (от OFF к ON) уменьшается (p = 0.039). **б**. Центральная частота пиков при улучшении состояния увеличивается (p<0.001).

бета-диапазоне (20-30 Гц), посчитали общее количество единичных пиков по всем биполярам и центральную частоту пиков, а затем сравнили эти два параметра до и после приема леводопы с помощью линейных смешанных моделей.

Помимо классического эффекта — снижения амплитуды пика бета-активности — мы показали, что при улучшении состояния пациента уменьшается общее количество пиков ($F_{1,14} = 5.2$, $p = 0.038$), то есть снижается количество пространственных кластеров СТЯ, затронутых патологической активностью. Кроме того, мы обнаружили, что при улучшении состояния центральная частота пика смещается вправо, то есть в более высокочастотную область ($F_{1,415} = 27.2$, $p < 0.001$). Таким образом, мы выявили дополнительные критерии, которые могут лечь в основу разработки новых биомаркеров двигательных нарушений при БП.

ГОРМОНАЛЬНЫЕ ПРЕДИКТОРЫ ДИСПЕПСИИ У НОВОРОЖДЕННЫХ ТЕЛЯТ

Салимзаде Э.А.О., Ермилова Т.С.
Астраханский государственный университет

Диспепсия — распространенное заболевание новорожденных телят, характеризующееся острым расстройством пищеварения с признаками диареи, интоксикации и обезвоживания. С целью прогнозирования диспепсии у 31 телёнка симментальской породы через 24 часа после рождения исследовали содержание в сыворотке крови прогестерона, эстрадиола, кортизола, дегидроэпиандростерон-сульфата (ДГЭА-С), альдостерона и их связи со сроками развития и тяжестью течения заболевания.

Кровь для исследований получали из яремной вены телят в утренние часы до кормления; количественное определение гормонов в сыворотке проводили методом твердофазного иммуноферментного анализа на анализаторе Униплан АИФР-01 (Россия) с использованием коммерческих наборов производства ЗАО «НВО Иммунотех» (Россия) и «Diagnostic Biochem Canada Inc.» (Канада). Жизнеспособность новорожденных оценивали по соотношению концентраций кортизола и ДГЭА-С в сыворотке крови (патент на изобретение № 2593793). При диагностике диспепсии у телят учитывали частоту дефекации, цвет, запах, консистенцию фекалий, тургор кожи, западение глазных яблок. Связи между показателями определяли с помощью коэффициентов корреляции Пирсона или Спирмена, учитывая распределение данных; нелинейные зависимости выявляли в «Программе для оценки взаимосвязи клинического состояния и биохимического профиля новорожденных телят» (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016660700). Наибольшее число статистически значимых взаимосвязей с клиническим состоянием телят обнаружено для кортизола, эстрадиола, ДГЭА-С, альдостерона и соотношения кортизол/ДГЭА-С.

Для решения задачи прогнозирования в факторном пространстве установлены области благоприятного и неблагоприятного прогноза, разработаны графические материалы для определения сроков появления первых клинических признаков диспепсии и продолжительности заболевания. Аппроксимацию экспериментальных данных проводили методом наименьших квадратов с использованием математического пакета MathCAD 14. В результате аппроксимации полиномами второго порядка получены следующие формулы для прогнозирования диспепсии у новорожденных телят:

$$Д_{Н}(Э, К) = 1{,}85\cdot10^{-6}Э^2 + 1{,}93\cdot10^{-6}К^2 - 1{,}82\cdot10^{-6}Э\cdot К - 1{,}90\cdot10^{-3}Э - 1{,}54\cdot10^{-3}К + 3{,}14; \quad (1)$$

$$Д_{П}(Э, К) = -9{,}71\cdot10^{-6}Э^2 - 4{,}05\cdot10^{-6}К^2 + 1{,}42\cdot10^{-5}Э\cdot К + 0{,}010Э - 1{,}02\cdot10^{-3}К + 3{,}60; \quad (2)$$

$$Д_{Н}(Д, К) = -8{,}83Д^2 + 4{,}39\cdot10^{-6}К^2 + 3{,}15\cdot10^{-3}Д\cdot К + 4{,}80Д - 5{,}10\cdot10^{-3}К + 2{,}89; \quad (3)$$

$$Д_{П}(Д, К) = 39{,}5Д^2 - 2{,}15\cdot10^{-5}К^2 + 5{,}92\cdot10^{-3}Д\cdot К - 31{,}7Д + 0{,}019К + 5{,}50; \quad (4)$$

$$Д_{Н}(К/Д, А) = -0{,}057К/Д^2 + 1{,}71\cdot10^{-3}А^2 - 0{,}068К/Д\cdot А + 1{,}89К/Д + 0{,}068А - 0{,}45; \quad (5)$$

$$Д_{П}(К/Д, А) = 0{,}089К/Д^2 - 0{,}021А^2 + 0{,}133КД\cdot А - 3{,}43К/Д + 0{,}813А - 1{,}14; \quad (6)$$

где $Д_{Н}$ — возраст заболевания телят диспепсией в сутках, $Д_{П}$ — продолжительность диспепсии в сутках, Э — концентрация эстрадиола в пмоль/л, К — концентрация кортизола в нмоль/л, Д — концентрация ДГЭА-С в мкмоль/л, К/Д — соотношение кортизол/ДГЭА-С, А — концентрация альдостерона в пг/мл в сыворотке крови, соответственно.

Для проверки адекватности описания данными формулами прогнозирующих зависимостей использовали критерий Фишера. Для анализа полученных зависимостей изображали их в виде номограмм, на которых графически выделяли области раннего и позднего заболевания, а также легкого, умеренно тяжелого и очень тяжелого течения.

Полученные формулы и номограммы могут быть использованы в научных исследованиях и практической ветеринарии для прогнозирования диспепсии у новорожденных телят по результатам определения в сыворотке их крови концентрации эстрадиола, кортизола, ДГЭА-С, альдостерона и соотношения кортизол/ДГЭА-С.

КЛЕТКИ ПАНЕТА – УНИКАЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРИЯ МНОГОЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧИМЫХ БИОХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Санькова М.В., Николенко В.Н.

ФГАОУ ВО Первый МГМУ имени И.М. Сеченова Минздрава России

Уникальность клеток Панета проявляется в секреции ими многочисленных исключительно важных биохимических соединений, поддерживающих гомеостатическое равновесие между нормальной микробиотой, инфекционными патогенами, стволовыми клетками кишечника и организмом человека. Ключевым этапом регулируемой секреции является возможность этих клеток распознавать растворимые микробные продукты с помощью паттерн-распознающих рецепторов и отвечать на эти воздействия выделением целого ряда разнообразных биохимических соединений, которые формируют биохимический барьер защиты от адгезии и транслокации кишечной микробной популяции. Поддерживая в просвете кишечника постоянные концентрации таких антимикробных пептидов, как лизоцима, α-дефензинов, RegIIIβ и RegIIIγ лектинов, секреторной фосфолипазы A2, ангиогенина-4 и α1-антитрипсина, клетки Панета регулируют качественный состав и численность микроорганизмов кишечника, колонизирующей крипты и эпителий ворсин. Создающееся при этом стерильное микроокружение в просвете крипт препятствует внедрению бактерий и защищает стволовые клетки кишечника от повреждения. Конститутивная продукция клетками Панета секреторного IgA обеспечивает специфический местный иммунитет слизистой оболочки кишечника. Индуцибельная выработка интерлейкина-17A, усиливающаяся при повреждении эпителиоцитов, приводит к экспрессии генов иммунного ответа. Выделяя такие биохимические соединения, как катепсина G и провоспалительный фактор некроза опухоли TNF-α, клетки Панета участвуют в адаптивных и защитно-воспалительных реакциях не только при развитии воспаления, но и в нормальных физиологических условиях функционирования кишечного эпителия. Ряд сигнальных биологических молекул – Wnt-лиганды (Wnt3, Wnt6 и Wnt9b), Notch-лиганды (Dll-1 и Dll-4), эпидермальный (EGF) и α-трансформирующий (TGF-α) факторы роста, постоянно выделяемые клетками Панета, регулируют жизненный цикл и пролиферативную активность стволовых клеток кишечника. Важную роль в процессах физиологической и репаративной регенерации эпителия слизистой оболочки кишки играет транскрипционный фактор SOX9. Конститутивная секреция специфического для клеток Панета регуляторного соединения Eph-B контролирует правильное расположение всех эпителиоцитов вдоль оси крипта — ворсинка. Наличие в цитоплазме клеток Панета большого количества ферментов: глюкозо-6-фосфатазы, NADH2-диафоразы, изоцитратдегидрогеназы, лактатдегидрогеназы, сукцинатдегидрогеназы, аминопептидазы, неспецифическую эстеразы, карбоангидразы и моноаминоксидазы, свидетельствует об участии этих уникальных клеток в процессах пищеварения и переваривания патогенов. Отмечена высокая концентрация в клетках Панета такого микроэлемента, как цинк, который играет роль стабилизатора всех ферментов. Установлено, что клетки Панета являются единственными эпителиальными клетками, которые благодаря экспрессии FAS-лиганда способны уничтожать потенциально активированные аутореактивные лимфоциты и аномальные энтероциты, частично обусловливая хорошо известный, но загадочный факт – относительную редкость опухолей тонкой кишки.

Таким образом, клетки Панета являются уникальной лабораторией многочисленных значимых биохимических соединений, которые поддерживают гомеостаз кишечника и предотвращают развитие инфекционных и онкологических заболеваний.

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ И АЛГОРИТМ СОЗДАНИЯ МОДЕЛИ ПОДОПЫТНЫХ ЖИВОТНЫХ В НАУЧНЫХ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Сафандеев В.В.

Федеральное бюджетное учреждение науки «Федеральный научный центр гигиены им. Ф.Ф. Эрисмана» Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека

Научные токсикологические исследования играют ключевую роль в сфере защиты здоровья человека и окружающей среды. Непонимание основополагающих принципов проведения, дизайна токсикологического эксперимента, способно привести к трагическим последствиям. В последнее время участились случаи судебных разбирательств по ряду проведенных ранее экспертиз токсикологических исследований.

Актуальность работы была обусловлена тем, что в ходе опросов, предшествующих дальнейшему анализу, у подавляющего большинства исследователей отсутствовало понимание фундаментальных принципов использования животных в токсикологических экспериментах. Так, выбор животных, их пола, возраста и т.п. в проанализированных исследованиях не был аргументирован, а этические комитеты, очевидно, играли некую декоративную роль, пропуская такого рода исследования.

В данной работе был проведен анализ используемых животных в токсикологических исследованиях в Российской Федерации (далее — РФ) в 10-летнем разрезе по базовым учреждениям Российской академии наук, по ведущим университетам РФ и опорным аттестованным и аккредитованным лабораториям.

Наиболее часто используемыми подопытными животными в токсикологических исследованиях являлись мыши (более 70% исследований) и крысы (более 20%), реже — остальные виды животных. Наиболее часто используемый возраст животных оказался 2-3 месяца. Этот возраст с позиции трансляционной медицины соответствует для мышей и крыс менее, чем 18 годам! Часто в исследованиях были использованы только самцы и, тем самым, упущены из поля зрения самки. Такой выбор оказывался чреват тем, что порой было невозможно провести гендерное влияние целого ряда химических и биологических препаратов. Содержание животных и дизайн экспериментов строился таким образом, что, например, грызуны (крысы, мыши), которые бодрствуют ночью, использовались в экспериментах днем (!). И все эти эксперименты были некорректными даже при искусственном создании режима «день/ночь». Так, вместо того, чтобы исследователю днем работать в режиме невидимого для грызунов красного света (при режиме «ночь» для грызунов), экспериментатор работал в режиме «день» для себя и в режиме «ночь» для объекта исследования.

Очевидно, что для адекватного алгоритма создания модели подопытных животных в научных токсикологических исследованиях следует тщательно подходить в частности к дизайну эксперимента и в целом ко всему исследованию.

Под дизайном эксперимента в широком смысле при этом следует понимать и выбор животного, и их количество (для правильного выбора мощности стат. исследования), пола животного, возраста от момента начала эксперимента и до его завершения. Более того, следует подбирать адекватные условия их содержания в режиме «день/ночь», поскольку никто не отменял наличие биологических ритмов у живых организмов. Необходимо тщательно подходить к экспериментальным диетам, выбирая либо режим нормированного кормления и поения, либо режим ad libitum (по требованию), который часто не подходит к модельным подопытным животным, однако чрезвычайно часто указывается в литературе.

Особо следует выделить подходы к оценке степени тяжести токсического воздействия веществ. Интерпретация результатов является одной из важнейших составляющих корректно проведенного исследования.

ПОЛИМЕРНЫЕ БИОСОВМЕСТИМЫЕ ГИБРИДНЫЕ МИКРОЧАСТИЦЫ ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНО-СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЕКАНИЯ

Седова Ю.К.[1, 2], Шерстнева А.А.[3], Минаева Е.Д.[1,2], Минаева С.А.[2], Минаев Н.В.[2], Демина Т.С. [3,4]

[1]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[2]Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3]Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

[4]Московский авиационной институт (национальный исследовательский университет)

Тканевая инженерия направлена на развитие медицины и поиск путей восстановления дефектов биотканей критических размеров — таких, которые организм не может восстановить самостоятельно. Этот подход подразумевает имплантацию в место дефекта культивированных клеток пациента, размещенных на биосовместимом носителе (скаффолде) с целью восстановления поврежденной ткани, органа. Важно понимать, что при этом подходе стремление направлено на регенерацию ткани, а не просто на ее замещение синтетическим материалом. Так как сформированный скаффолд предназначен для имплантации в живой организм к нему предъявляется ряд требований, и соответственно материал, из которого он сделан, также должен им соответствовать. Материал должен быть биорезорбируемым, биосовместимым, нетоксичным, прочным, а скаффолд обладать высокой пористостью и оптимальными механическими характеристиками. Как известно кость взрослого человека на 70% состоит из минеральной фазы — солей фосфора и кальция — гидроксиапатита, а оставшиеся 30% — органические вещества, а именно матрикс из коллагена и белков, воды и клеточных элементов. Именно совокупность всех этих веществ обеспечивает уникальные физико-механические свойства кости. Таким образом для регенерации костной ткани наиболее перспективной считается смесь из биосовместимого полимера с гидроксиапатитом.

Для изготовления скаффолдов рационально использовать технологии быстрого прототипирования. Метод поверхностного селективного лазерного спекания (ПСЛС) является перспективным для задач тканевой инженерии. В этом подходе отсутствует воздействие высоких температур и токсичных растворителей, что позволяет включать биоактивные добавки непосредственно в структуру скаффолда. Для формирования скаффолдов методом ПСЛС востребованы биоматериалы в виде порошков из биорезорбируемых полимеров и композитов на их основе с различными остеоиндуктивными свойствами.

В данной работе исследуются гибридные микрочастицы из полимеров полилактида и поликапролактона, с распределенными внутри них наночастицами гидроксиапатита, полученные методом испарения растворителя из эмульсии масло/вода (технология двойной эмульсии).

Настоящая работа направлена на исследование внутренней структуры микрочастиц и оптимизацию их состава для создания скаффолдов методом ПСЛС.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Селимов Д.А.[1], Гюлахмедов Р.Р.[1], Рабаданова А.А.[1], Шуайбов А.О.[1], Абдурахманов М.Г.[1], Собола Д.С.[1,2], Касткова К.[2], Рамазанов Ш.М.[3], Оруджев Ф.Ф.[1,4]

[1] *ФГБОУ ВО Дагестанский Государственный Университет, Махачкала*
[2] *Брненский технологический университет, Чешская республика*
[3] *Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала*
[4] *Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград*

Композиционные органо-неорганические наноматериалы имеют огромное применение в различных областях, благодаря возможности контроля их физико-химических свойств. Одним из материалов для создания уникальных композитов является поливинилиденфторид (ПВДФ), обладающий сегнето-, пиро- и пьезоэлектрическими свойствами. В данной работе представлены результаты по синтезу органо-неорганического нановолоконного композита на основе ПВДФ с включенными внутри наночастицами α-Fe_2O_3 и исследованию его физико-химических свойств методами СЭМ, рентгеновской дифракции, комбинационного рассеяния, ИК-Фурье спектроскопии, РФЭС и ДСК. Исследования показали, что включение наночастиц α-Fe_2O_3 способствует дополнительной кристаллизации и самополяризации ПВДФ в электроактивную β-фазу **(рис.1)**.

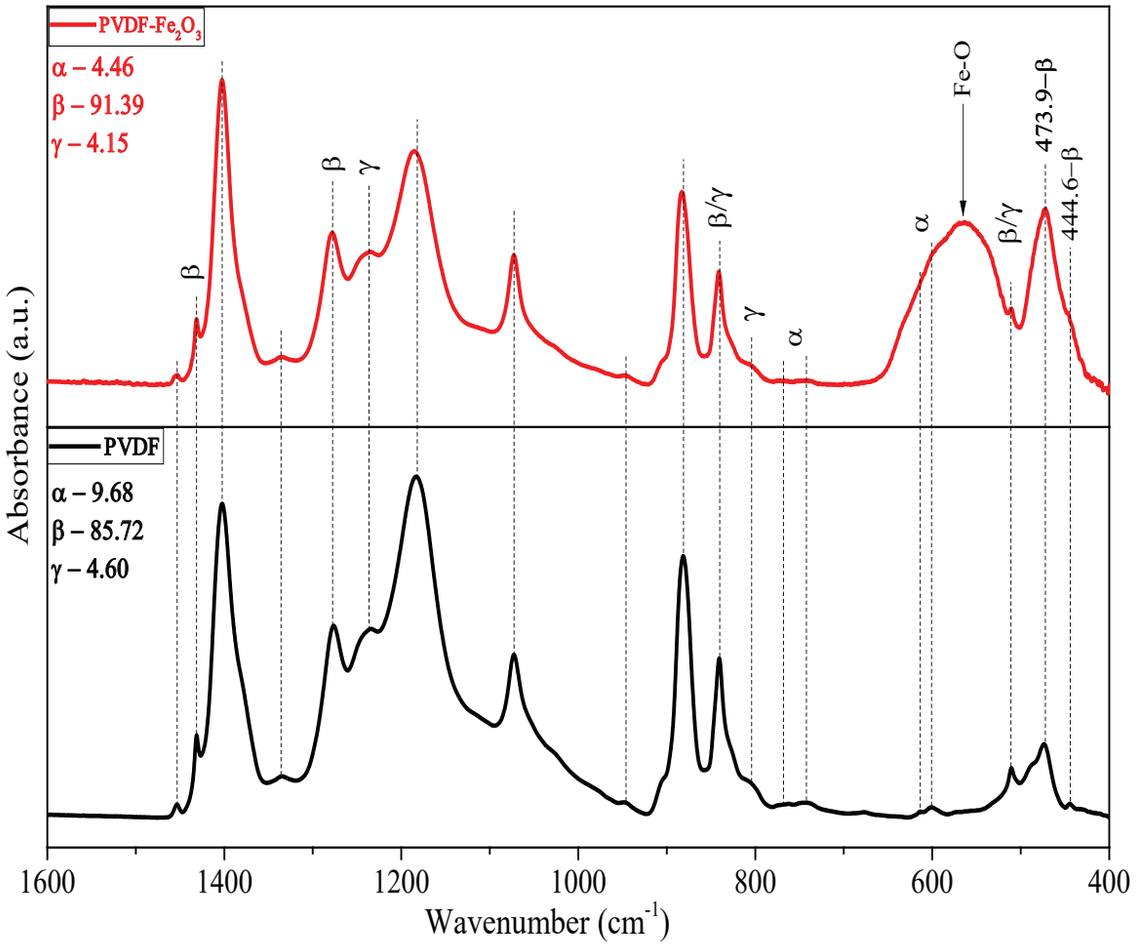


Рис. 1. ИК-Фурье спектры чистого ПВДФ и α-Fe_2O_3/ПВДФ.

С помощью РФЭС идентифицирован механизм межфазного ионно-дипольного электростатического взаимодействия наночастиц с ПВДФ, приводящего к самополяризации и кристаллизации структуры. Показано, что композитный материал обладает пьезофототронным эффектом. Пьезокаталитическую и пьезофотокаталитическую активность оценивали по разложению Метиленового Синего под воздействием ультразвука и УФ-видимого излучения. Эффективность пьезокатализа и пьезофотокатализа составила 60.4% и 99.5% соответственно. С помощью экспериментов по захвату активных окислительно-восстановительных форм установлено, что основным компонентом деградации МС являются радикалы ·OH. Были обоснованно предложены два различных механизма образования радикалов ·OH для пьезокатализа и пьезофотокатализа.

СВОЙСТВА НОВЫХ ГИБРИДНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Семкина А.С.[1], Бакеева И.В.[2], Кузнецов Н.М.[3], Крашенинников С.В.[3]

[1]Институт синтетических полимерных материалов имени Н.С. Ениколопова РАН
[2]МИРЭА — Российский технологический университет
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Работы по синтезу и исследованию свойств различных гибридных полимерных гидрогелей, в сетчатой структуре которых присутствуют узлы химической и физической природы, сохраняют свою актуальность на протяжении последних 25 лет. Интерес к таким гелям вызван возможностями гибкого регулирования структуры и получения свойств, отличных от характерных для полимерных гидрогелей.

Целью работы являлось изучение физико-механических свойств гибридных гидрогелей, полученных на основе водных растворов поливинилового спирта (ПВС) при добавлении тетраметоксисилана (ТМОС) и глутарового альдегида (ГА). Свойства гибридных гидрогелей сравнивали со свойствами химических гидрогелей состава ПВС-ГА и физических гидрогелей состава ПВС-SiO_2 (аббревиатуру SiO_2 используем для обозначения продуктов гидролитической поликонденсации ТМОС, образующихся непосредственно в растворе ПВС в процессе формировании гидрогеля).

Соотношения компонентов в растворе для получения гибридных гидрогелей были подобраны таким образом, чтобы их время гелеобразования было сопоставимо с временем гелеобразования химических и физических гидрогелей, которые синтезировали при минимальных концентрациях ГА и ТМОС. Соотношения в интервале от 1/0,005/0,005 до 1/0,05/0,05 осново-моль ПВС/моль ГА/моль ТМОС были использованы для синтеза гибридных гидрогелей состава ПВС-ГА-SiO_2. Отдельные гибридные гидрогели в процессе формирования претерпевали синерезис, но сохраняли хорошие эластические и прочностные свойства.

На ротационном реометре Anton Paar Physics MCR-502 (со встроенной системой Пельтье) исследовали реологическое поведение реакционных смесей. Поведение гибридных гидрогелей ПВС-ГА-SiO_2 при продольном сжатии изучали, используя настольную универсальную испытательную машину Instron 34SC-1, оснащенную датчиком нагрузки ±50N (с биованной biopuls). Все эксперименты были выполнены при комнатной температуре.

Показано, что в исследуемом интервале соотношений компонентов время достижения точки гелеобразования в процессе синтеза гибридных гидрогелей ПВС-ГА-SiO_2 сопоставимо с временем достижения точки гелеобразования для химических гидрогелей ПВС-ГА, но меньше в 2 раза времени достижения точки гелеобразования для физических гидрогелей ПВС-SiO_2. Выявлена нелинейная зависимость влияния доли ТМОС (при постоянной концентрации ГА) в смеси исходных компонентов на изменение модуля Юнга образующихся гибридных гидрогелей ПВС-ГА-SiO_2. Сравнение значений модуля Юнга образцов, сочетающих в себе как химическую, так и физическую сшивку, и образцов гидрогелей с химической сшивкой показало, что модули Юнга у гибридных гидрогелей больше в 1,1 раза, чем у химических. Определено, что модуль Юнга для равновесно набухших гибридных гидрогелей ПВС-ГА-SiO_2, подвергнутых сжатию в равновесных условиях, меньше в 1,3 раза, чем аналогичный показатель у нативных гибридных гидрогелей.

МИКРОЛИНЗОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ ФИЗИКИ, БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЫ

Сенотрусова С.А., Ахметова А.И., Яминский И.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, НИИ ФХБ имени А.Н.Белозерского

Для увеличения разрешающей способности микроскопов и преодоления дифракционного предела, которым она ограничена, предлагается использовать микролинзы — оптически прозрачные сферические микрочастицы.

На данный момент существует несколько актуальных способов преодолеть ограничение, накладываемое дифракционным пределом. Например, флуоресцентная микроскопия с введением в изучаемые объекты белковых молекул, светящихся при воздействии ультрафиолета. Однако, недостаток заключается в том, что на практике ее трудно реализовать для вирусов. Еще один способ — сканирующая ближнепольная оптическая микроскопия. С её помощью можно получать растровые изображения с разрешением ниже дифракционного предела, однако этот способ довольно медленный.

С помощью предлагаемого метода с использованием микролинз можно реализовать изучение вирусов, бактерий, клеток и других биообъектов. Микролинзовая микроскопия успешно подходит для оптического наблюдения топологии микро- и наноструктур: микросхем, микромеханических устройств и пр. Микролинза — оптическая линза, позволяющая получить изображение за счет «захвата» световых волн в ближнем поле, отраженных от предмета. Микролинза располагается между образцом и объективом микроскопа и является оптическим усилителем, таким образом, повышая разрешающую способность микроскопа. Данный метод был предложен командой исследователей под руководством Зенгбо Вана из Массачусетского университета.

Перспективы использования микролинзовой микроскопии заключаются в достижении новых возможностей для наблюдения бактерий, вирусов, ДНК и биомакромолекул с подробным изучением их внутреннего устройства в реальном времени.

В работе планируется применить этот метод для разработки нового способа наблюдения высокочувствительных биологических объектов — бактерий и вирусов. Также предложено совместить оптическую микроскопию со сканирующей зондовой микроскопией, что дает уникальную возможность обнаружения вирусных частиц оптическим методом в поле большого размера и его последующего изучения с помощью различных вариантов сканирующей зондовой микроскопии.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОДИФФУЗИИ ЛИТИЯ НА ГРАНИЦАХ ЗЁРЕН

Сергеев А.В., Кондратьева Е.
ФИЦ ХФ РАН, Москва, Россия

Одним из основных препятствий для использования твердотельных литиевых аккумуляторов с металлическим анодом является морфологическая нестабильность поверхности лития при электроосаждения, проявляющаяся в росте «вискеров» — мшистых и иглообразных образований, которые приводят к саморазряду и даже могут стать причиной воспламенения аккумулятора. Актуальной проблемой является описание процессов массопереноса, питающих рост вискеров, в частности, моделирование подвижности атомов на границах зёрен (ГЗ). Молекулярная динамика (МД) является эффективным инструментом для моделирования кристаллических дефектов в металлах, однако литий ещё не являлся объектом подобных исследований. В рамках данной работы впервые было осуществлено МД моделирование границ зёрен в поликристаллическом литии и произведена оценка подвижности атомов.

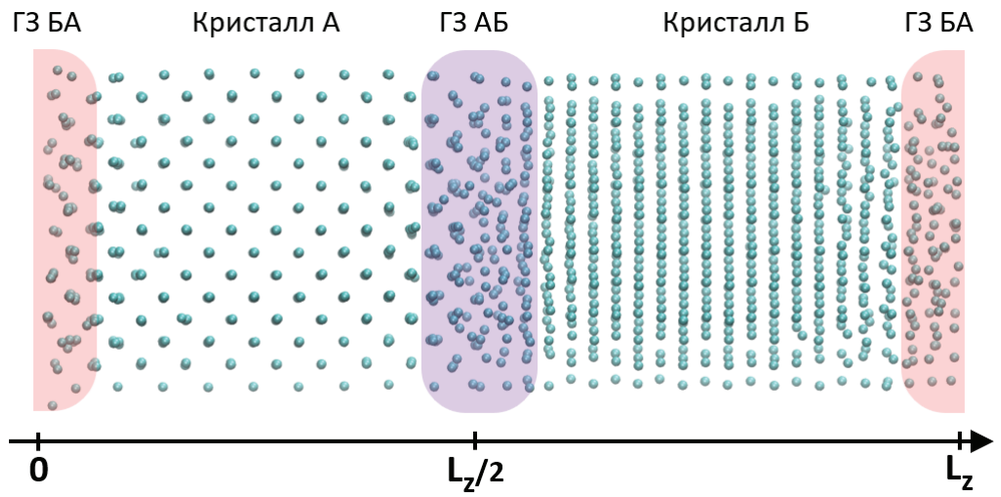


Рис. 1. Кадр моделирования границы кручения (100) ∑5. Ячейка содержит два повёрнутых друг к другу под углом 36.87° кристаллита и две неэквивалентные границы зёрен (ГЗ), представляющих собой аморфные слои.

Все МД-расчёты проводились при помощи программного пакета LAMMPS. Для данной работы силовое поле было специально натренировано на результатах ТФП (DFT) расчётов энергии при помощи алгоритмов машинного обучения, реализованного в пакете MLIP. Сначала было проведено МД моделирование объёма аморфного лития в диапазоне температур 340-500 К (переохлаждённый расплав ниже $T_{пл}$). Рассчитанный к.-т самодиффузии при температуре выше $T_{пл}$ попадает в диапазон имеющихся в литературе экспериментальных данных, что подтверждает корректность моделирования аморфного лития. Экстраполяция рассчитанных величин к.-та диффузии на комнатную температуру (300 К) даёт значение 1.5×10^{-5} см^2/с.

Моделирование границы кручения (100) ∑5 (поворот 36.87° относительно нормали) предсказало наличие на ГЗ слоя аморфного лития толщиной 10-15 Å в котором подвижность атомов соответствует к.-ту самодиффузии в диапазоне $2.6\text{-}3.1\times10^{-6}$ см^2/с, что сопоставимо с ранее приведённым значением для переохлаждённой жидкой фазы.

Последовательное добавление атомов лития в область ГЗ позволило смоделировать рост зёрен в процессе электроосаждения и оценить энергию и подвижность атомов на ГЗ для всех возможных состояний ГЗ. Полученные результаты вносят существенный вклад в понимание роли межзёренных границ в процессе массопереноса в поликристаллическом литии.

ВЛИЯНИЕ PH НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ОКСИДАЗЫ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ *OGATAEA PARAPOLYMORPHA* DL-1

Сергеев Е.П.[1], Атрошенко Д.Л.[1,2], Шеломов М.Д.[1,3], Савин С.С.[1,3], Тишков В.И.[1,2,3]

[1]Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия;
[2]Институт биохимии имени А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Москва, Россия;
[3]ООО «Фундаментальные и высокие технологии МГУ», Москва, Россия.

Оксидаза D-аминокислот (DAAO) (К.Ф. 1.4.3.3) — FAD-зависимый фермент, катализирующий окисление D-аминокислот до альфакетокислот кислородом с выделением пероксида водорода и иона аммония. Потенциальные и существующие применения DAAO в биотехнологии крайне различны — от промышленного биокатализа, в частности — получения 7-аминоцефалоспорановой кислоты, прекурсора цефалоспориновых антибиотиков, до анализа микробиологического заражения на корке сыра.

В связи с этим активно ищут новые DAAO, более подходящие по своим свойствам для конкретного биотехнологического процесса. Различные термофильные дрожжи — весьма перспективные микроорганизмы для получения новых ферментов, ведь их белки эволюционно более стабильны при повышенных температурах. Это свойство позволяет проще и разнообразнее использовать подобные ферменты.

У термофильных дрожжей *Ogataea parapolymorpha* DL-1 (*Hansenula polymorpha* DL-1) было найдено 6 генов потенциальных DAAO. В нашей лаборатории 5 кодируемых белков были клонированы и экспрессированны в растворимой форме. Одна из этих DAAO имеет необычный профиль pH-активности — OpaDAAO1 остается высокоактивной с D-аланином при pH 11, хотя большинство DAAO из других источников активны при pH 7-8. Эта особенность может помочь использовать OpaDAAO1 для определения D-аминокислот в образцах с высокими значениями pH, а также для определения D-аминокислот в смеси.

В ходе данной работы мы определили каталитические константы и константы Михаэлиса OpaDAAO1 с различными D-аминокислотами при pH от 6 до 11. На основе аминокислотной последовательности была смоделирована структура фермента с помощью сервера RoseTTAFold. Мы провели докинг в программе AutoDock различных D-аминокислот и предположили роль аминокислотных остатков для связывания при различных pH.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук и докторов наук (МК-6239.2021.1.4).

ИОННАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ

Сергомасова А.А.

ФГАОУ ВО Российский университет дружбы народов

Ионная имплантация или ионное легирование — метод введение атомов примесей в твердое тело, путем бомбардировки его поверхности ускоренными, высокоэнергетическими (порядка 10 — 2000 кэВ) ионами. Данный способ введения примеси стал занимать ведущие позиции в области наноэлектроники в связи с тем, что есть возможность создать моноатомный слой на любой глубине, контролируемо, внутри материала.

Схема установки представлена на рисунке 1. В ионный источник подается рабочее вещество через клапан *1*. В камере *2* между анодом *3* и катодом *5* возникает разряд, вследствие чего ионизируются атомы примесного вещества и в объеме камеры образуется плазма *4*. При помощи разности потенциалов между плазмой и экстрактором *6* отсеиваются ионы с недостаточной энергией. Затем, подав большой отрицательный потенциал на экстрактор, положительные ионы начинают притягиваться к нему, так формируется начальный ионный поток вещества *13*, который из экстрактора направляется в камеру *7*, где фокусирующие линзы формируют правильный, направленный, пучок ионов. Там же имеются ускоряющие магниты *8*, для придания ионам необходимой энергии, после чего ионы фильтруются по энергии и массе в камере *9*. В камере *12* расположен вращающийся механизм *11*, который меняет подложки *10,* и где происходит внедрение легирующего вещества.

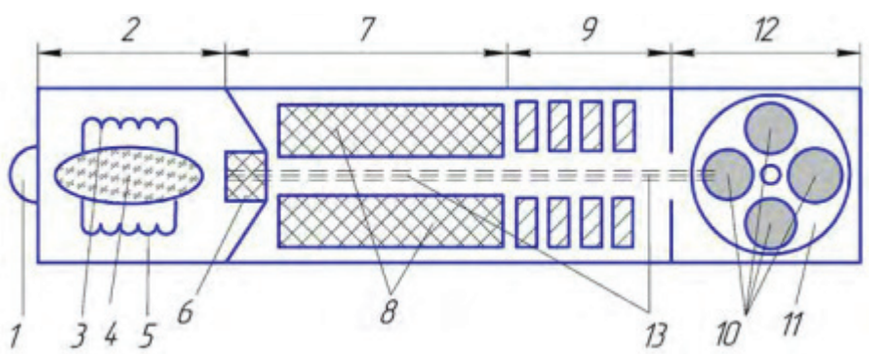


Рис. 1. Обобщенный вид установки ионной имплантации

Спектр применения данного метода невероятно широк. В последние годы активно изучается изменения структурно-фазового состояния и физико-механических свойств поверхности биосовместимых полимерных материалов, модифицированных пучками ионов. В частности, влияющие на улучшение антибактериальной способности, что позволяет использовать данное свойство в отрасли медицины, пищевой промышленности (полиэтиленовых пленок для упаковки пищевых продуктов) и текстильной промышленности.

Строгое задание количества примеси и способность создать слой на любой глубине материала дают возможность использовать ионную имплантацию в производстве полупроводниковых приборов, улучшая их свойства. Например, МОП-транзисторы, где происходит увеличение порогового напряжения по сравнению с контрольными образцами, микроэлектроника СВЧ — улучшение свойств фоторезистивных покрытий, а также эффективное управление химической активностью металлических покрытий и другие.

Таким образом ионная имплантация — это один из самых распространенных методов изменения структуры для улучшение физических и химических свойств материала.

ОРИЕНТИРОВАННАЯ КОНЪЮГАЦИЯ ГИДРОФИЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С АНТИТЕЛАМИ К ВИРУСУ SARS-COV-2

Сидоров Е.А., Мухина И.В.

Государственный университет «Дубна»

Иммунохроматографические тест-системы являются одним из наиболее распространенных экспресс-методов для определения различных видов бактериальных, вирусных и аутоиммунных заболеваний. Такие тест-системы основаны на высокоспецифичном взаимодействии белковых молекул с определяемыми компонентами в пробе, в основном антител с антигенами. Для того, чтобы детектировать образование комплексов антиген-антитело, к антителам прикрепляют различные окрашенные метки.

На сегодняшний день одним из наиболее развивающихся направлений в мире науки является исследование квантовых точек (КТ) — флуоресцирующих наноразмерных полупроводниковых материалов, обладающих уникальными оптическими свойствами. Однако при получении аналитических меток наночастица-антитело остается нерешенной проблемой ориентация биомолекул на поверхности носителя. Вследствие прикрепления антител сайтами для связывания антигенов к поверхности наночастицы происходит потеря чувствительности или полная неработоспособность иммунохроматографической тест-системы.

В данной работе конъюгация проводилась через электростатические взаимодействия КТ с антителами с последующим образованием ковалентной связи карбодиимид-сукцинимидным методом.

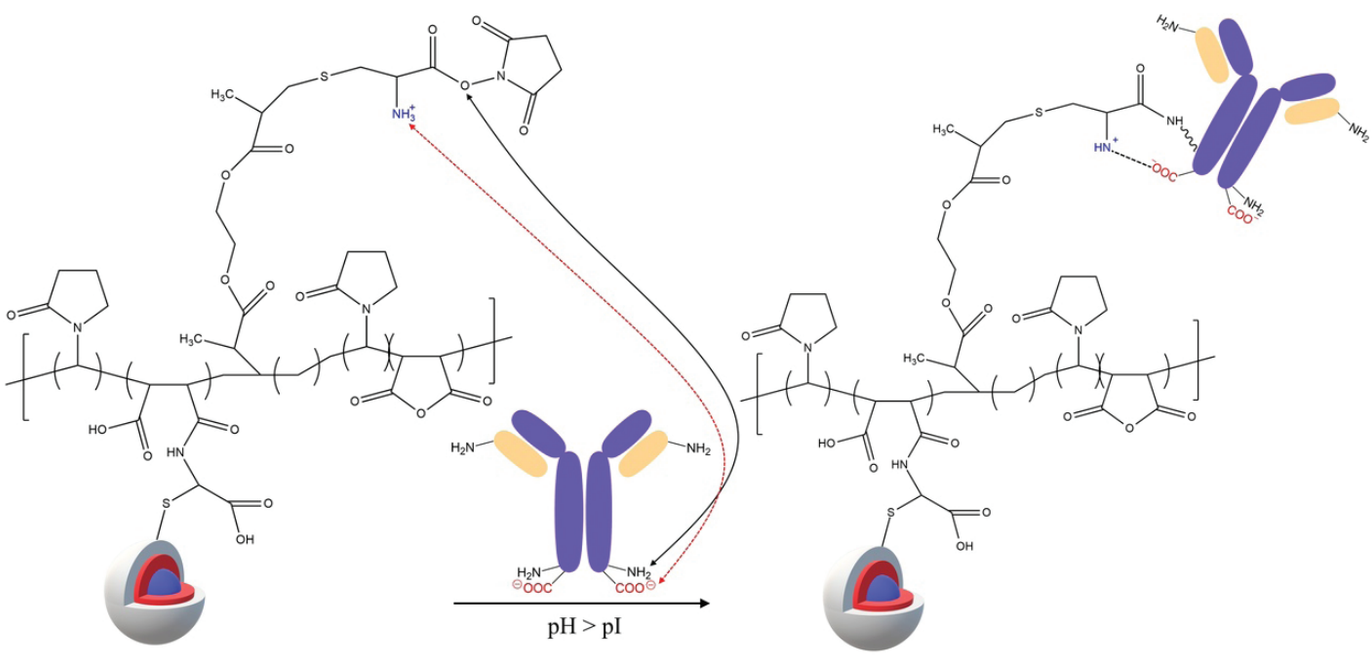


Рис. 1. Конъюгация КТ с антителами при pH > pI.

Были определены полимерные покрытия КТ, наименее склонные к изменению конформации белковых молекул и оптимальные значения pH растворов антител и КТ при которых конъюгация происходит ориентированно.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАНОНА-2

Синенко Г.Д., Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.
МГУ им. Ломоносова, Химический факультет

Флуоресцентные производные пиранона-2 могут быть использованы в органических диодах и в качестве меток в биоимиджинге. В результате синтеза ряда веществ типа **A** было установлено, что только вещества **2** и **3-H**$^+$ демонстрировали высокие квантовые выходы флуоресценции (КВФ) (рис. 1). Для объяснения полученных результатов фотофизические свойства веществ **2** и **3-H**$^+$ сравнивались со свойствами веществ **1** и **3** соответственно.

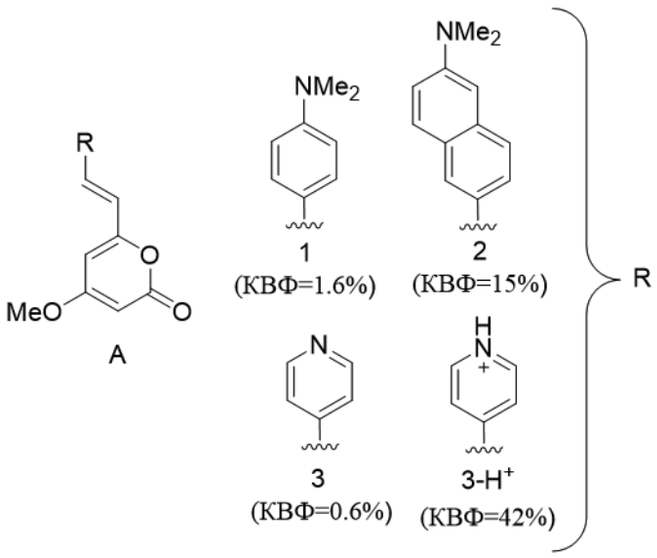


Рис. 1. Исследованные вещества **1**, **2**, **3** и **3-H**$^+$ структурного типа **A**. Представленные КВФ получены для диоксана (**1**, **2** и **3**) и для воды (**3-H**$^+$, pH=2).

Параметры равновесной геометрической конфигурации состояния S_0 исследуемых соединений были рассчитаны на уровне MP2/(aug)-cc-pVDZ. Дискретная модель метода потенциала эффективных фрагментов была использована для учёта влияния водного окружения на фотофизические свойства и геометрию основного состояния соединения **3-H**$^+$. Энергии и силы осцилляторов вертикальных электронных переходов, а также равновесные геометрические конфигурации состояний S_1 и конических пересечений S_0-S_1 для исследуемых веществ были рассчитаны с использованием инвариантной многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений в варианте XMCQDPT2/CASSCF(14,14)/(aug)-cc-pVDZ.

Полученные длины волн вертикальных переходов хорошо согласовывались с экспериментальными значениями. Установлено, что безызлучательные переходы через коническое пересечение контролируются различными энергетическими барьерами в состоянии S_1. Анализ разностных электронных плотностей для исследованных соединений выявил структурную и зарядовую зависимость в величинах данных барьеров и, как следствие, в КВФ.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №22-13-00126).

СЛОИСТЫЕ ДВОЙНЫЕ ГИДРОКСИДЫ КАК МАТРИЦА ДЛЯ СТАБИЛИЗАЦИИ КАТИОНОВ FE (II)

Смальченко Д.Е., Титов Е.Н., Лебедева О.Е.
ФГАОУ ВО Белгородский государственный национальный исследовательский университет (НИУ «БелГУ»)

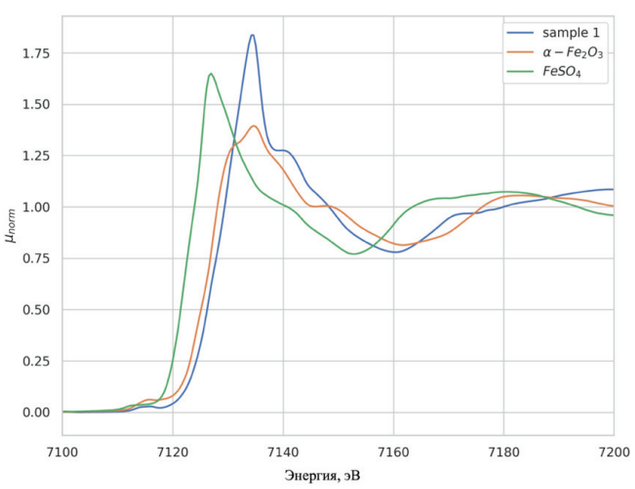


Рис. 1. Спектр поглощения рентгеновских лучей для образца СДГ (sample 1) и образцов сравнения

Слоистые двойные гидроксиды (СДГ) представляют собой соединения с общей формулой $M_{1-x}^{2+}M_x^{3+}(OH)_2[A_{x/n}^{n-}{\cdot}mH_2O]$, где M^{+2} и M^{+3} — катионы в степенях окисления +2 и +3 соответственно, а A^{-n} — практически любой анион или анионный комплекс. Возможность варьировать состав слоистого гидроксида определяет широкий спектр областей их применения. В частности, особый интерес представляет способность слоистого гидроксида стабилизировать катионы металлов в нетипичных степенях окисления, что позволяет их использовать в окислительно-восстановительных процессах.

Целью данной работы был синтез Fe(II)-содержащего слоистого двойного гидроксида и оценка способности полученного материала стабилизировать в своей структуре катион железа в степени окисления +2.

Методом соосаждения при постоянном pH были синтезированы 5 образцов Fe(II)СДГ с 5% ат. замещени-

ем магния в структуре гидроталькита (магний-алюминиевого слоистого гидроксида) на двухзарядный катион железа. Прекурсорами служили нитраты и сульфаты металлов. Рассчитанный состав соответствовал формуле $Mg_{5.7}Fe_{0.3}Al_2(OH)_{16}CO_3x4H_2O$. При синтезе использовались различные приемы для предотвращения окисления двухвалентного железа. Измерения спектров рентгеновского поглощения вблизи прикраевой области (XANES) были выполнены на станции "Структурное материаловедение" Курчатовского источника синхротронного излучения.

Как видно на рисунке 1, максимум спектра поглощения одного из исследуемых образцов совпадает с максимумом поглощения α-Fe_2O_3. Для остальных четырёх образцов наблюдается аналогичная картина.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что использованными способами не удалось стабилизировать железо в степени окисления +2 в структуре СДГ.

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ И СВОЙСТВА КОМПОЗИТА ГАЛЛУАЗИТ/МАГНЕТИТ

Смирнова Д.Н., Алексеева О.В., Носков А.В.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН), Иваново, Россия

В последние несколько десятилетий многофункциональные магнитные наноматериалы привлекают все большее внимание исследователей в связи с их потенциальными применениями в области окружающей среды, биологии и медицины. В настоящее время синтезированы различные магнитные наночастицы: на основе металлов никеля, кобальта, железа, ферритов марганца, кобальта и никеля, а также оксидов железа. Среди оксидов железа наиболее изучен магнетит (Fe_3O_4). Эти магнитные частицы находят широкое применение в качестве сорбентов, мембран, биосенсоров, для адресной доставки лекарственных средств, благодаря своим свойствам, таким как стабильность магнитных характеристик, низкая токсичность и биосовместимость.

Существуют различные методы синтеза наночастиц оксидов железа: термическое разложение металлосодержащих соединений, химическое соосаждение солей металлов, золь-гель и гидротермальные методы. Среди этих методов можно выделить соосаждение благодаря его простоте, эффективности и экономичности.

В данной работе композиционный материал галлуазит/магнетит был получен методом химического соосаждения солей железа в порах галлуазита. Эксперимент по биологической активности проводился на культуре Escherichia coli M-17. Предварительно культуру Escherichia coli M-17 культивировали на скошенном мясо-пептонном агаре в течение суток. Затем для посевов готовили исходное разведение культуры из расчета 103 кл/мл. Образцы галуазита (чистый и магнитный) взвешивали на весах 0,05 г и размещали в мясо-пептонный бульон объемом 5 мл. Данные образцы в питательной среде подвергали стерилизации кипячением в течение 30 минут. После остывания среды в данные пробирки с галлуазитом и в контрольную пробирку добавляли по 0,1 мл разведения тестируемой культуры E.coli. Затем все пробирки встряхивали в течение 1-2 минут, помещали на инкубацию при 37 ^{0}C на сутки.

На следующий день пробирки после инкубации встряхивали на шейкере в течение 5 минут, после 5 минут осаждения галлуазита выполняли разведение материала из контрольной и опытных пробирок до степени разведения 10^{14}. После приготовления разведений были выполнены высевы по 0,1 мл на поверхность агаризованной питательной среды эндо для оценки жизнеспособности микробной культуры. Посевы были термостатированы на сутки при температуре 37 ^{0}C.

На следующий день на поверхности агаризованной среды были подсчитаны колонии E.coli (колониеобразующие единицы), т.е. оценена жизнеспособность данной культуры.

В случае использования галлуазита наблюдается увеличение жизнеспособности клеток культуры от 2 до 3 раз. Причинами данного процесса можно считать присутствие в галлуазите микроэлементов, способных усилить рост и развитие культуры E.coli M-17. Вместе с тем, увеличение количества жизнеспособных клеток при использовании галлуазита/магнетита позволяет думать, что наблюдаемый эффект может заключаться не в появлении в среде микроэлементов, а в воздействии возникающих магнитных полей.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ ПОЛИЭТИЛЕН/КЕРАТИН, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

Смыковская Р.С., Кузнецова О.П., Прут Э.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

Полимерные материалы находят широкое применение во всех аспектах жизни и промышленности, но их стойкость к воздействию различных факторов окружающей среды является одной из причин образования отходов. Мировой объем полимерных отходов ежегодно составляет более 100 млн. тонн, в то время как их разложение протекает в течение десятков лет. Одним из решений проблемы «полимерного мусора» является создание

биоразлагаемых полимерных материалов. Подобные материалы под влиянием факторов окружающей среды способны разлагаться в течение более короткого периода времени.

Новым источником недорогого сырья, которое можно использовать для производства биоразлагаемых полимерных материалов, являются куриные перья, миллионы тонн которых выбрасываются ежегодно как биологические отходы.

В данной работе биокомпозиты полиэтилен (ПЭ)/кератин получали двумя методами: а) механическим смешением в пластографе Brabender (Германия) при температуре 130°С в течение 10 мин со скоростью вращения роторов 100 об/мин; б) методом высокотемпературной сдвиговой деформации (ВТСД) в экструдере-диспергаторе при температуре 145°С. В качестве наполнителя использовали кератин на основе белкового концентрата из куриного пера с размером частиц 0.1<d<0.315, 0.315<d<0.4, 0.4<d<0.63 мм, а также нефракционированный кератин. Содержание кератина в смесях варьировали от 10 до 40 мас.%.

Найдено, что деформационно-прочностные свойства биокомпозитов (предел прочности и относительное удлинение при разрыве) при смешении в экструдере-диспергаторе выше, чем при получении их в пластографе Brabender, что, по-видимому, обусловлено более равномерным распределением компонентов и высокой межфазной адгезией, характерным для материалов, полученных методом ВТСД.

Реологические свойства биокомпозитов ПЭ/кератин не зависят от метода их получения. При этом вязкость материалов убывает с увеличением напряжения сдвига, практически не зависит от дисперсности кератина и возрастает с увеличением содержания наполнителя. Для исследования процессов старения полимерных композитов была определена скорость биодеструкции по потере массы образцов. Образцы экспонировали в почве в течение 30, 60 и 90 дней. Моделируя процессы, происходящие в окружающей среде, исследуемые образцы помещали в контейнеры с влажной почвой, предназначенной для выращивания растений, и выдерживали при комнатной температуре. Определено, что процесс биоразложения интенсивней протекает у композиций ПЭ/кератин, полученных с помощью экструдера-диспергатора методом ВТСД, в среднем на 20%. Образцы, полученные на пластографе Brabender после экспонирования в почве, даже на 90-ые сутки, визуально ничем не отличались от исходных, тогда как образцы, полученные на экструдере-диспергаторе утрачивали характерный для смесей с кератином коричневый оттенок, истончались и покрывались микроскопическими порами.

Таким образом, показано что использование метода высокотемпературных сдвиговых деформаций позволяет получить биокомпозиты с более высокими прочностными свойствами по сравнению с материалами, полученными механическим смешением.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-33-90240.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОЛЕЙ КОНФОРМЕРОВ МЕФЕНАМОВОЙ КИСЛОТЫ ПРИ ПОМОЩИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

Соборнова В.В.[1,2], Белов К.В.[2], Ходов И.А.[2]

[1]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*
[2]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*

Повышение растворимости лекарственных веществ в воде является одной из важных задач при модификации имеющихся и разработке новых лекарственных средств. Было показано, что использование современных подходов микронизации (SAS, RESS, PGSS, GAS и др.) на основе сверхкритических флюидных технологий является эффективным инструментом контроля полиморфного и гранулометрического состава, что может положительно повлиять на растворимость. Одним из наиболее распространенных растворителей в таких процессах микронизации является сверхкритический диоксид углерода (скCO$_2$). Таким образом, целью настоящей работы является изучение и выявление наиболее вероятных конформаций в растворе для определения вероятных механизмов образования полиморфных форм, что, безусловно, будет иметь высокую значимость для производства лекарств.

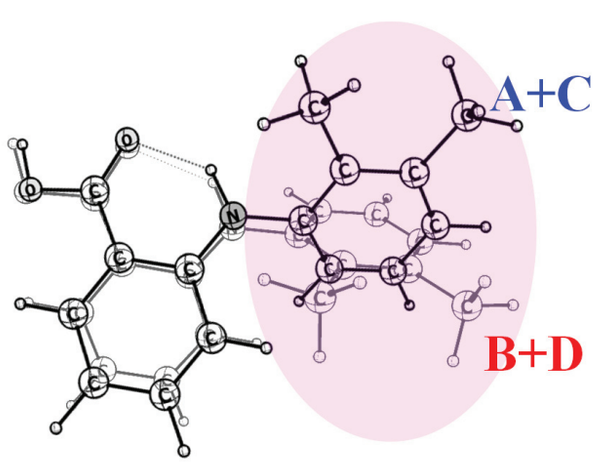


Рис. 1. Структура исследуемых конформеров мефенамовой кислоты

В данной работе в качестве объекта исследования был выбран представитель ряда фенаматов — мефенамовая кислота, которая используется как обезболивающее и жаропонижающее средство. В настоящее время обнаружено две полиморфные формы MEF I и MEF II. Основным структурным отличием молекул в элемен-

тарных ячейках кристалла данных полиморфов является положение циклических фрагментов молекулы друг относительно друга. Данным структурам соответствуют конформеры A, C и B, D (см. Рисунок 1), доли которых были рассчитаны в рамках данной работы.

Для достижения поставленной цели была применена методика на основе ядерного эффекта Оверхаузера (2D NOESY), которая позволила получить значения межатомных расстояний в структуре мефенамовой кислоты, основываясь на информации о скоростях кросс-релаксации. Анализ полученных величин позволил выявить преобладающие конформации молекул мефенамовой кислоты в чистом ДМСО и в присутствии $скCO_2$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ № 22-23-00793).

СКАНИРУЮЩАЯ КАПИЛЛЯРНАЯ МИКРОСКОПИЯ

Советников Т.О., Яминский И.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет

Сканирующая ион-проводящая микроскопия или сканирующая капиллярная микроскопия (СКМ) — одна из методик сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ), основанная на использовании нанопипеток. Основными преимуществами СКМ являются возможность работы и с проводниками, и с диэлектриками, а также несиловое воздействие на объект исследования, вследствие чего эта методика используется для изучения топографии образца или для доставки агентов к его поверхности.

В последние годы СКМ активно развивается с большим разнообразием приложений и возможностей использования.

Произошедшее за последнее десятилетие развитие СКМ в направленной доставке веществ даёт широкую вариативность в использовании её в качестве методики «нанопечати», ключевыми преимуществами которой являются: высокая точность нанесения рисунка и возможность использования в качестве материалов для печати как органических, так и неорганических веществ.

В работе обсуждается применение методик СКМ в биоприложениях: исследовании живых систем и отдельных клеток, в частности нейронных структур. В подобных приложениях несиловое воздействие на образец порой делает СКМ и вовсе незаменимой техникой исследований. Но на этом ее значимость не ограничивается. В работе рассматриваются не только методики изучения объекта как такового (получение информации об его топографии, измерение локальных биотоков и т.д.), но и методики адресной доставки реагентов к исследуемому образцу, что позволяет изучать его реакцию на внешнее воздействие и, как следствие, получать качественно новую и более значимую информацию об образце. Также предлагается методика точного подсчёта числа осаждаемых частиц, что в некоторых случаях позволяет сделать доставку агентов не только адресной, но и высокоточной.

Перспективы данных методик СКМ заключаются в достижении новых возможностей для наблюдения бактерий, вирусов, ДНК и биомакромолекул с изучением их отклика на внешние раздражители.

ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА НОВОЙ НАНОСОМАЛЬНОЙ ФОРМЫ ПАКЛИТАКСЕЛА

Сокол М.Б.[1,2], Яббаров Н.Г. [1,2], Моллаева М.Р. [1,2], Чиркина М.В. [1,2], Никольская Е.Д. [1,2]

[1]*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия*
[2]*Всероссийский научный центр молекулярной диагностики и лечения, Москва, Россия*

Паклитаксел является митотическим ингибитором, широко используемым в химиотерапии злокачественных новообразований. Лекарственная форма паклитаксела (Таксол®) содержит солюбилизатор Cremophore EL, использование которого сопряжено с возникновением тяжелых аллергических реакций. Применение Таксола® ограничено из-за высокой нефро- и нейротоксичности. Целью данной работы является разработка новой наносомальной формы паклитаксела на основе сополимера молочной и гликолевой кислот (ПЛГА), конъюгированного с векторной молекулой третьего домена альфа-фетопротеина (рАФП3д). АФП — известный онкомаркер, рецепторы АФП экспрессируются на опухолевых клетках и отсутствуют на нормальных, что позволяет использовать АФП и его функциональные фрагменты для адресной доставки препаратов в опухолевые клетки. Данная форма паклитаксела (НЧ-рАФП3д) позволит улучшить профиль безопасности препарата за счет его селективного накопления в клетках-мишенях и уменьшения неспецифической токсичности.

На первом этапе разработки препарата оценивали влияние технологических параметров на метод получения наночастиц с паклитакселом (НЧ) и их физическо-химические свойства. В результате оптимизации условий удалось получить НЧ с характеристиками: средний диаметр 263 нм, поверхностный заряд -22 мВ, общее содержание паклитаксела 6%. Далее разрабатывали метод конъюгации НЧ с рАФП3д, определяя наиболее оптимальные соотношения ключевых параметров проведения реакции и время инкубации. Разработанные технологические

параметры позволили получить НЧ-рАФП3д, характеризующийся средним диаметром 280 нм, поверхностным зарядом -27 мВ, общим содержанием паклитаксела 5%.

Кинетику высвобождения паклитаксела из НЧ-рАФП3д изучали с помощью метода равновесного диализа через полупроницаемую мембрану. График релиза представляет собой двухфазный профиль с быстрым скачком высвобождения паклитаксела во время первой фазы. Общее высвобождение паклитаксела из НЧ-рАФП3д составило 67% за 220 ч.

В экспериментах *in vitro* уровень цитотоксичности НЧ-рАФП3д в отношении клеточной линии аденокарциномы яичников человека SKOV3 был сопоставим со свободным паклитакселом, в то время как значения IC_{50} НЧ-рАФП3д в отношении клеточной линии аденокарциномы молочной железы мыши 4T1 были снижены примерно в 2 раза по сравнению со свободной субстанцией.

Противоопухолевую активность *in vivo* НЧ-рАФП3д изучали на модели BALB/c с привитой подкожно линией опухолевых клеток 4T1. НЧ-рАФП3д вводили животным внутривенно (в/в) в суточной дозе 9 мг/кг, трехкратным курсом с интервалом 5 суток. Группа НЧ-рАФП3д демонстрировала более медленный рост опухоли по сравнению с контрольной группой (физиологический раствор) и группой, получавшей свободный паклитаксел.

Таким образом, полученные результаты позволяют сделать вывод о перспективности разработанной наносомальной формы паклитаксела для лечения онкологических заболеваний.

КИНЕТИКА ОКСИДАТИВНОГО ГЕМОЛИЗА ЭРИТРОЦИТОВ ИНИЦИИРУЕМОГО ТРЕТ-БУТИЛГИДРОПЕРОКСИДОМ

Соколова Е.М.[1], Дубенская Н.А.[2], Психа Б.Л.[1], Нешев Н.И.[1]

[1]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

Известно, что при нарушении работы антиоксидантной системы в клетках возрастает количество активных метаболитов кислорода, которые вызывают разнообразные оксидативные повреждения, приводящие клетку к состоянию окислительного стресса. Одним из наиболее опасных проявлений окислительного стресса является пероксидное окисление липидов (ПОЛ) мембран, приводящее к развитию явлений т.н. мембранной патологии, лежащих в основе патогенеза целого ряда заболеваний, среди которых сердечно-сосудистые заболевания и сахарный диабет. Эффективным средством фармакологической коррекции оксидативных повреждений мембран служат биоантиоксиданты. В связи с этим не теряет своей актуальности и практической значимости развитие биологических моделей, на которых осуществляется тестирование химических соединений на антиоксидантную активность. Эффективность разрабатываемой модели в первую очередь определяется качеством инициирования ПОЛ в биологическом субстрате. Это позволит эффективно дифференцировать антиоксидантную составляющую в действии химических соединений на биологический объект.

Работа посвящена исследованию гемолиза эритроцитов под действием трет-бутилгидропероксида (t-BuOOH) в качестве инициатора пероксидного окисления липидов.

В период времени, предшествующий началу гемолиза было обнаружено нарастание уровня ТБК-реактивных продуктов в мембранах эритроцитов, зависящее от концентрации t-BuOOH, что свидетельствовало об активации ПОЛ.

В широком диапазоне концентраций была исследована кинетика гемолиза 0,2%-ной суспензии эритроцитов мыши под действием t-BuOOH. Данное соединение вызывало концентрационнозависимый гемолитический эффект. Гемолитическую активность t-BuOOH количественно характеризовали временем достижения 10% уровня гемолиза — период индукции гемолиза. Зависимость периода индукции гемолиза от начальной концентрации t-BuOOH была существенно нелинейной и хорошо аппроксимировалась затухающей биэкспоненциальной функцией вида, $y = A_1 e^{-k_1 C} + A_2 e^{k_2 C} + y_0$, выходящей на стационарный уровень при высоких концентрациях t-BuOOH. Такой характер зависимости может указывать на присутствие в системе двух различных факторов или процессов, влияющих на гемолитический процесс противоположным образом, что проявляется в уменьшении гемолитического отклика системы на воздействие с ростом концентрации инициатора. С этим также согласуется более ранний выход гемолитических кривых на плато при самых высоких концентрациях t-BuOOH ($2 \cdot 10^{-4}$ и $4 \cdot 10^{-4}$), указывающий на наступление равновесия по осмотическому давлению и остановку гемолиза.

На основе полученных результатов делается вывод, что под действием t-BuOOH в условиях нашего эксперимента происходит активация ПОЛ эритроцитарной мембраны, что указывает на принципиальную возможность использования t-BuOOH в качестве инициатора пероксидного гемолиза эритроцитов. Вместе с тем исследование кинетики гемолиза эритроцитов показывает, что взаимодействие t-BuOOH с клеткой может включать процессы, не ограничивающиеся пероксидацией липидного субстрата. Это обстоятельство следует учитывать при возможном практическом использовании t-BuOOH в качестве индуктора пероксидного гемолиза в эритроцитах.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОДВИЖНОСТИ ЗЕЛЕНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА С ПОМОЩЬЮ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ФОТОКОНВЕРСИИ

Сопова Н.С.[1], Шахов А.М.[2], Астафьев А.А.[2], Боченков В.Е.[1]

[1]*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*
[2]*Институт химической физики имени Н.Н.Семенова Российской академии наук, Москва, Россия*

Движение белковых молекул в биологических системах имеет огромное значение для функционирования живых клеток. Одним из подходов, позволяющих изучать динамику биомолекул в биологических жидкостях, являются релаксационные методы. Они основаны на быстром формировании неравновесной концентрации флуорофора — красителя или флуоресцентного белка — при его фотообесцвечивании в части образца с последующим наблюдением за выравниванием концентрации в результате диффузии.

Одним из наиболее широко применяемых в микробиологии флуоресцентных меток является зеленый флуоресцентный белок EGFP. Кроме возможности маркирования биомолекул и клеточных структур, данный белок позволяет детектировать присутствие молекул окислителя, в том числе активных форм кислорода в растворе благодаря способности изменять цвет флуоресценции при фотоокислении.

В данной работе предложен новый подход к определению вязкости среды с помощью быстрой окислительной фотоконверсии EGFP и измерении кинетики затухания флуоресценции в ходе последующей релаксации системы. В качестве модельной системы использовали каплю раствора EGFP, содержащую в качестве окислителя гексоциано-феррат (3) калия $K_3[Fe(CN)_6]$. Фотоокисление проводили при облучении части раствора светом лазерного диода с длиной волны 462 нм. За изменением концентрации исходной и окисленной форм EGFP в центре облученного пятна следили по кинетике затухания флуоресценции с помощью времякоррелированного счета одиночных фотонов при возбуждении фемтосекундными лазерными импульсами с длиной волны 510 нм. Полученные данные приведены на рис. 1.

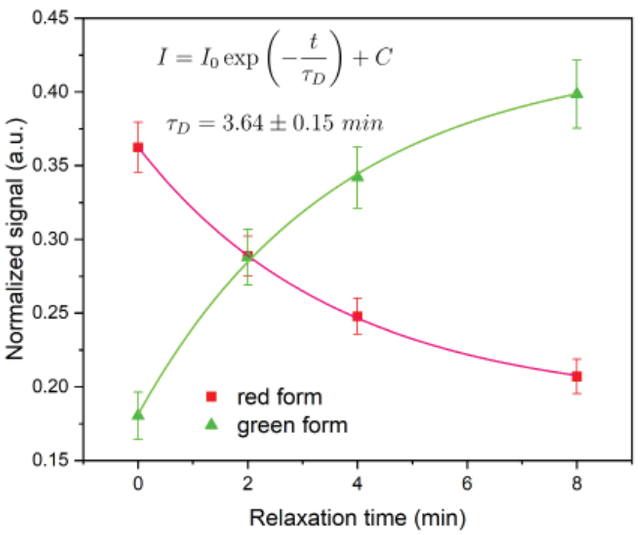


Рис. 1. Кинетика затухания флуоресценции во времени.

Установлено, что характеристическое время диффузии одинаково для обеих форм. Значение коэффициента диффузии D составило 92±4 мкм^{2}с$^{-1}$, что согласуется с литературными данными для EGFP в водных растворах.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-23-00454. Экспериментальные исследования проводились на оборудовании ЦКП ФИЦ ХФ (№ 506694).

ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ГРАФТ-СОПОЛИМЕРОВ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И *N*-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА

Антипова А.П.[1], **Сорокин А.В.**[1,2], Лавлинская М.С. [1,2]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*
[2]*Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж, Россия*

Новые материалы на основе природных полисахаридов находят широкое применение в различных областях деятельности человека. Наиболее перспективным являются их использование качестве носителей для создания новых форм лекарственных препаратов для перорального или трансдермального применения. Альгинат натрия — природный линейный полианионный блочный полигликозид, состоящий из остатков *D*-маннуроновой и *L*-гулуроновой кислот, успешно применяется в косметологии для создания инновационных средств по уходу за кожей. Однако перспективы его применения ограничены в виду неспособности к взаимодействию с некоторыми биологически активными веществами. Решить эту проблему можно путем химической модификации альгината натрия, например, прививочной полимеризации боковых цепей низкотоксичных полимеров с высокой комплексообразующей способностью. В связи с этим, целью настоящей работы является оптимизация условий синтеза графт-сополимеров альгината натрия (АН) с *N*-винилпирролидном (ВП).

В работе использован альгинат натрия с низкой вязкостью и соотношением блоков маннуроновая/гулуроновая кислота 1.56 (Sigma Aldrich, Германия). Графт-сополимеры получали растворной полимеризацией в фосфатном буфере с pH 7.4 для предотвращения кислотного гидролиза *N*-винилпирролидона. Соотношение АН:ВП составляло 1:4 мол. В качестве инициатора использовали церий (IV)-аммоний нитрат (ЦАН), персульфат калия

(ПСК) и смесь ПСК с метабисульфитом натрия (ПСК-МБС = 1-1 мол.) в количестве 4×10^{-3} моль$\times$л$^{-1}$. Синтезированные графт-сополимеры выделяли путем осаждения реакционной массы в ацетон, после чего отмывали этиловым спиртом и сушили в вакууме до постоянной массы при 30 ˚С.

В ходе исследования установлено, что использование инициатора ЦАН в исследованных концентрациях на основе многозарядного катиона неэффективно для систем, содержащих альгинат натрия. При внесении инициатора в раствор полисахарида происходит ионотропное гелеобразование, обусловленное сшиванием макромолекул полисахарида многозарядным катионом церия. В связи с резким загущением реакционной системы протекание реакции графт-сополимеризации затруднено, выход продукта составлял 8 %.

Использование инициатора ПСК приводило к конверсии мономера 32 %, однако исследование свойств полученного продукта показало, что несмотря на относительно высокую конверсию мономера, характеристическая вязкость образующихся сополимеров ниже, чем у исходного альгината натрия. Это свидетельствует о деструкции полисахарида в ходе реакции полимеризации.

Наиболее эффективной инициирующей системой из исследуемых оказалась смесь ПСК и МБС, обеспечивающая выход продукта 47 % и сохраняющая вязкостные свойства графт-сополимеров и альгината натрия.

Таким образом, установлено, что наиболее эффективной инициирующей системой для синтеза графт-сополимеров альгината натрия и *N*-винилпирролидона является смесь персульфата калия и метабисульфита натрия в соотношении 1-1 мол.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук, номер гранта МК-2517.2022.1.3.

СПЕЦИАЛЬНЫЕ СРЕДЫ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ CO_2 ДЛЯ СОЗДАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ 3D-МОРФОЛОГИЙ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И МЕДИ

Стамер К.С.[1], Пигалёва М.А.[1], Пестрикова А.А.[2], Николаев А.Ю.[2], Абрамчук С.С.[1], Галлямов М.О.[1,2]

[1] МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический Факультет, Кафедра физики полимеров и кристаллов;
[2] ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, ЛФХП №311

Интерес использования альтернативных материалов для антимикробных применений обусловлен развитием устойчивости некоторых штаммов микробов ко множеству антибиотиков. Ионы и наночастицы меди являются перспективными антимикробными агентами благодаря своей высокой активности и экономической доступности. Также известна высокая каталитическая активность наночастиц меди в широком спектре реакций органической химии с возможностью проведения их в зелёных условиях, которые исключают использование ряда традиционных катализаторов. Однако так как количество наночастиц или ионов меди, распределённых по раствору, должно быть достаточно большим для эффективного контакта с бактериями или реагентами, использование меди в свободной форме приводит к загрязнению окружающей среды. Решением проблемы может быть создание структур, содержащих ионы и наночастицы металла в связанном состоянии. В качестве стабилизатора в данной работе использовался хитозан, обладающий большим количеством свободных аминогрупп со спаренными электронами. Он нетоксичен, биосовместим и обладает дополнительной антимикробной активностью. Из-за нерастворимости хитозана в воде на практике чаще всего используют 3% раствор уксусной кислоты, следы которого в готовом изделии могут быть нежелательны для задач, требующих повышенной чистоты материалов, например, катализа, или медицины. В данной работе в качестве полностью биосовместимого и самонейтрализующегося при декомпрессии растворителя хитозана использовалась бифазная система H_2O/CO_2, обладающая дополнительными бактерицидными свойствами. Мы предлагаем легко реализуемый способ создания различных 3D-гидрогелей на основе меди и хитозана в растворах угольной кислоты под высоким давлением CO_2 с возможностью модификации структуры гелей. Метод ИК-спектроскопии показал наличие взаимодействия -OH и -NH_2 групп хитозана с ионами меди. Образование металлических наночастиц было подтверждено посредством УФ-видимой спектроскопии, зарегистрировавшей пик ППР на 653 нм. При исследовании зависимости положения и интенсивности пика от времени было установлено, что формирование металлических наночастиц происходит в течение некоторого времени и включает стадию формирования промежуточного комплекса. Это предположение было подтверждено методом ПЭМ, зарегистрировавшим сферические наночастицы меди диаметром порядка 2 нм во всех исследовавшихся гелях, а также достаточно крупные образования, существенно превышающие размеры наночастиц, в образце с недельной экспозицией. Композиты показали высокую антимикробную активность против как грамм положительных бактерий, так и грибков. Также была рассмотрена возможность создания сферических композитов на основе высокомолекулярного хитозана и релевантность такого метода приготовления композитов, а также исследовано их поведение в нейтральной, щелочной средах и при высоких температурах. Композиты показали себя стабильными и достаточно прочными. В модельной реакции восстановления нитробензола до анилина сферы с дополнительно восстановленными наночастицами меди продемонстрировали высокую каталитическую активность, зарегистрированную с помощью УФ-видимой спектроскопии, а также возможность использования таких композитов в качестве легко отделяемого от реакционной смеси катализатора с многоразовым применением.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНА

Степаненко С.А., Гуляева Ю.К., Алексеева М.В. и Коскин А.П.
Институт катализа имени Г.К. Борескова, Новосибирск, Россия

В настоящее время все большую актуальность приобретает поиск и изучение альтернативных источников энергии, и с этой точки зрения водород считается привлекательным энергоносителем. Однако, такие свойства водорода, как высокая взрывоопасность, низкая температура ожижения, низкая плотность в газообразном виде, а также его способность к диффундированию в металлах и охрупчиванию конструкционных материалов, приводят к необходимости разработки эффективных и безопасных систем хранения и транспортировки.

Водород можно хранить в ковалентно связанном виде в химических соединениях различного состава, которые при определенных условиях могут выделять водород (каталитическое разложение аммиака, метанола, муравьиной кислоты; гидрирование и последующее дегидрирование ненасыщенных углеводородов). Использование жидких органических носителей водорода (ЖОНВ) обеспечивает высокую весовую и объемную плотность хранения водорода, потенциально низкий риск и низкие капиталовложения, поскольку для их транспортировки может быть использована существующая инфраструктура.

Одним из основных требований к катализаторам дегидрирования является их высокая селективность. Поскольку эндотермический процесс дегидрирования ЖОНВ требует его проведения при высоких температурах (300-350°C), на селективность процесса существенное влияние оказывает протекание побочных реакций гидрогенолиза. Таким образом, установление закономерностей протекания процесса является важным этапом разработки технологии дегидрирования ЖОНВ.

В настоящем докладе приведены результаты проведения серии экспериментов по исследованию кинетики дегидрирования метилциклогексана на высокопроцентном никелевом катализаторе, модифицированном цинком (рис. 1).

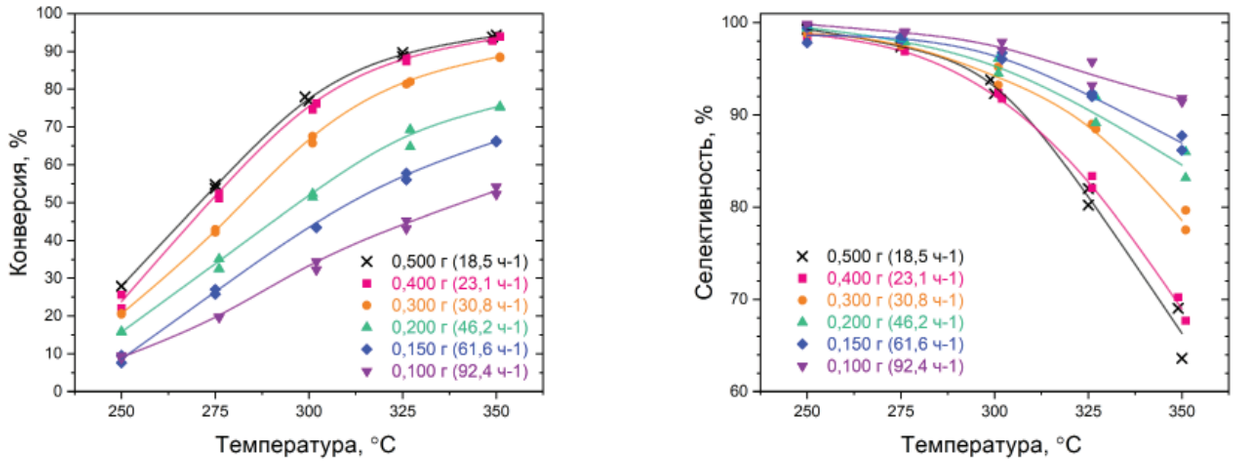


Рис. 1. Результаты экспериментов по дегидрированию метилциклогексана на $NiZn/SiO_2$ катализаторе: зависимость конверсии метилциклогексана и селективности к образованию толуола от температуры.

По результатам экспериментов был установлен формальный механизм и составлена кинетическая модель процесса, что в дальнейшем позволит оптимизировать условия его проведения.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЯ, УСИЛЕННОГО СВЕРХТОНКИМИ АЛМАЗНЫМИ ПЛЕНКАМИ (ДИАМАНОМ): *AB INITIO* ИССЛЕДОВАНИЕ

Степанова Х.С.[1,2], Ларионов К.В.[2], Сорокин П.Б.[2,3]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*
[3]*ФГБНУ Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, Троицк, Россия*

Изучение стабильности и механических характеристик композиционных материалов на основе ряда лёгких металлов (напр. Al, Mg) и сверхтонких алмазных плёнок (диаманов) актуально как в научном, так и в техническом плане. Высокие значения констант упругости диамана делают его перспективным кандидатом для использования в качестве наполнителя в композиционных материалах на основе металлов.

В настоящей работе исследовались механические свойства нанокомпозита, полученного путем армирования алюминиевой матрицы алмазными нанолентами. Рассмотрен случай равномерного распределения нанолент в матрице Al в предположении, что такая конфигурация приведет к максимальному повышению механических характеристик.

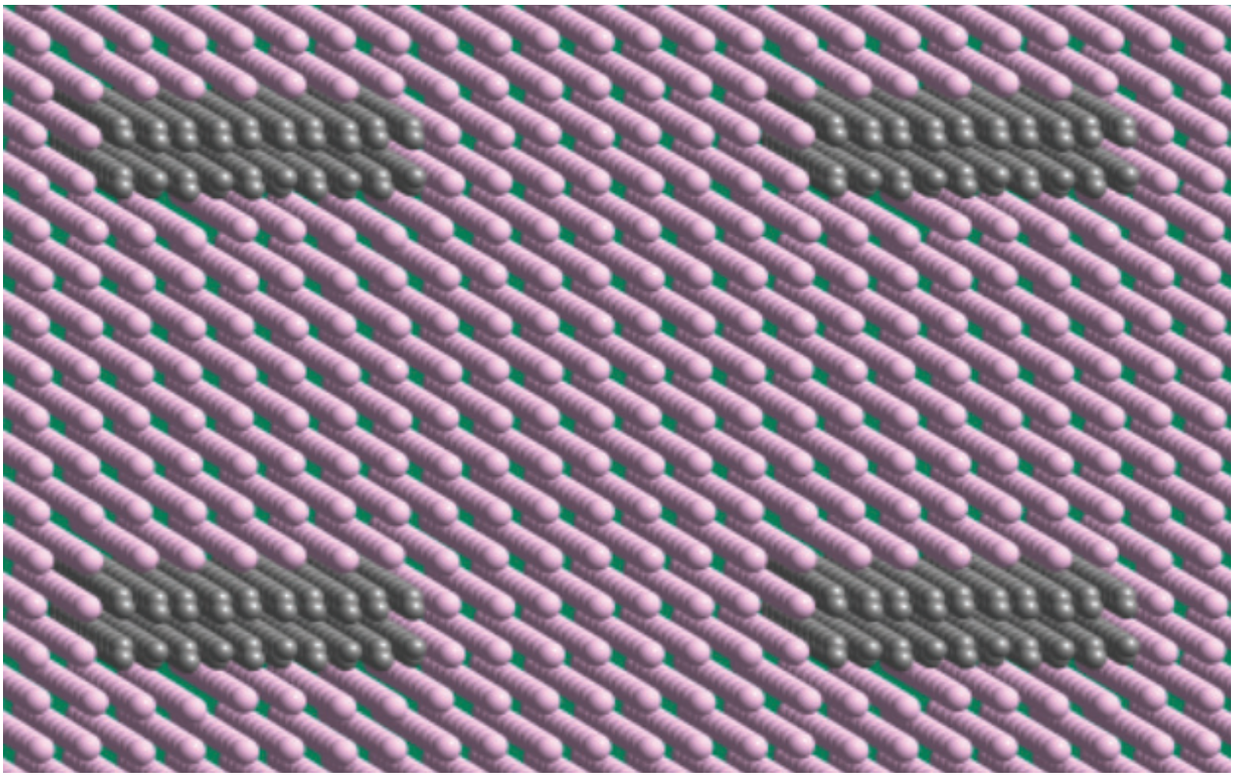


Рис. 1. Атомная структура композита алюминий/диаман.
Атомы алюминия и углерода показаны розовым и серым цветами, соответственно.

Мы оценили упругие константы тонких алмазных пленок, в зависимости от их ширины, изучили стабильность диаманов в металлической матрице, а также оценили критическое значение сдвигового напряжения углеродной наноструктуры внутри матрицы.

Полученные данные позволят в дальнейшем проводить целенаправленные эксперименты для получения нанокомпозитов нового поколения, обладающих превосходящими физико-химическими характеристиками, которые могут быть использованы в широкой области деятельности в т. ч. в космической и оборонной промышленности.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №21-12-00399. Расчеты проведены с использованием ресурсов вычислительного кластера НИТУ «МИСиС».

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ИОНОВ В ТРОПОСФЕРЕ: ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ И ПРИЛОЖЕНИЯ

Степанов И.Г.

ФИЦ ХФ РАН, Москва, Россия

Сведения о распределении концентраций ионов в тропосфере на высотах до 40 км имеют важное теоретическое и прикладное значение, поскольку их участие в физико-химических процессах определяет динамику формирования заряда тропосферы и облаков. Анализ процессов, приводящих к накоплению и изменению сорта ионов, необходим в связи с определением фоновых условий для развития различных типов разрядов, используемых в плазмохимических технологиях. Более того, знание ионного состава атмосферы требуется при моделировании устройств плазменной аэродинамики, когда необходимо создать область плазмы на высотах, где процессы ионизации за счет радона в приземном слое атмосферы мало эффективны.

Важнейшую роль в образовании ионов в тропосфере играют процессы фотоионизации с участием космических лучей. На рисунке 1 представлены данные по альтитудной зависимости скорости ионизации $Q(h)$ космическими лучами в области высот, на которых отсутствует ионизация за счет процессов с участием радона.

В докладе рассмотрены процессы образования ионов в тропосфере с учетом наличия космических лучей, фотоионизации и рекомбинации ионов. Представлен качественный анализ процессов в квазистационарных условиях для случая одного сорта положительных ионов.

Рассчитаны временные значения концентрации основных ионов в рамках кинетической модели элементарных процессов с участием заряженных частиц для случая 8 положительных и отрицательных ионов и 17 химических реакций. Показано, что концентрации ионов разного вида существенно зависят от высоты.

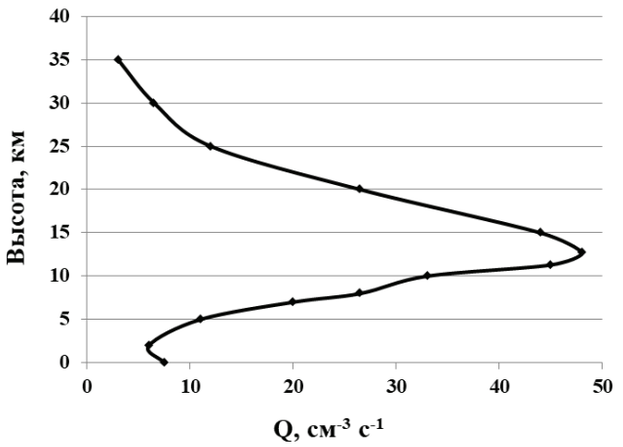


Рис. 1. Скорость ионизации космическими лучами в период высокой солнечной активности.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОРОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЁРТЫВАЕМОСТИ КРОВИ

Стрыканова В.В., Виноградов В.В.
Национальный исследовательский институт ИТМО

Пациенты, переболевшие коронавирусной инфекцией, сталкиваются с рядом осложнений, в список которых входит также и повышенный риск тромбообразования. По причине предупреждения возникновения тромбоза всем взрослым заболевшим пациентам COVID-19 назначается противотромботическая терапия. Для обследования свёртывания крови, а также назначения необходимой дозы лекарственного препарата пациенту назначается ряд лабораторных анализов.

Лабораторные методы по характеризации системы гемостаза разделяются по исследуемой стадии свёртывания крови. Анализ тромбоцитарного гемостаза проводится методом импедансной агрегометрии. Плазменный гемостаз и фибринолиз исследуется такими методами, как тест генерации тромбина, тромбодинамика, тромбоэластография и локальные тесты. Локальные тесты включают в себя определение времени свёртывания цельной крови/плазмы и величины концентрации определённого фактора свёртывания. Остальные представленные методы исследуют динамику одной из стадий коагуляции крови, что позволяет получать кривые коагуляции — зависимость определённого физико-химического параметра, характеризующего стадию коагуляции, от времени. Point-of-care каогулометры, не требующие для эксплуатации специальных навыков от пользователя, в качестве анализа проводят именно локальные тесты. Однако по надёжности и точности исследования локальные тесты проигрывают методам, характеризующих динамику процесса свёртывания крови.

Настоящее исследование направлено на разработку метода характеризации плазменного гемостаза, представляющего из себя каскад химических реакций, приводящий к образованию фибриновых полимерных нитей. Именно за счёт физико-химических свойств образующегося фибрина окончательно блокируется повреждённый сосуд, и кровотечение прекращается. Свойства фибрина и скорость его образования зависят от предшествующий реакций коагуляционного каскада, отклонения в данных процессах оказывают влияние на фибрин и на работоспособность системы гемостаза в целом. Поэтому измерение кинетики образования фибринового полимера позволяет выявить причину возникновения заболевания, а также отследить динамику лечения. В данной работе скорость образования фибрина характеризуется по изменению размера фибриновой нити во времени.

В нашем исследовании измерение диаметра фибринового полимера проводится согласно подходу Куолтора, заключающегося в фиксировании электрического тока во времени в системе, разделённой апертурой постоянного размером. Величина протекающего электрического тока (сопротивления, импеданса) в данной системе пропорционально размеру отверстия, поэтому при физическом блокировании апертуры значение электрического тока уменьшается согласно размеру объекта. Таким образом, зависимость электрического параметра от времени характеризует изменение размера, например, образующегося в ходе коагуляции фибринового полимера.

Разрабатываемый метод анализа системы гемостаза измеряет кривые свёртывания крови, которые наиболее эффективно позволяют выявлять заболевания крови, а также отслеживать результаты медикаментозной терапии. Также данный подход благодаря измерению электрических параметров возможно реализовать в point-of-care формате, что в настоящей ситуации позволит пациентам более своевременно получать качественную медицинскую помощь.

РАЗРАБОТКА КОМПОСТИРУЕМЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Студеникина Л.Н.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Россия

Актуальным направлением исследований в области создания и переработки биоразлагаемых полимерных материалов является разработка компостируемых композитов на основе водорастворимых термопластичных матриц с заданными эксплуатационными показателями (прочность, водостойкость, условия и сроки деструкции и пр.) при высоких технико-экономических показателях производства (низкая себестоимость, высокая производительность и т.д.). Не менее важной проблемой является анализ корреляции методов оценки биодеградации (лабораторных и натурных, прямых и косвенных) для прогнозирования реальных сроков компостируемости материала.

Композиты на основе поливинилового спирта (ПВС) и полисахаридов (ПС) имеют значительный потенциал для применения в качестве компостируемых упаковочных материалов, а также в различных областях растениеводства.

ПВС выпускаются промышленностью различных марок, отличающихся молекулярной массой (ММ) и остаточным содержанием винилацетатных (ВА) групп, и как следствие — степенью гидролиза. В зависимости от марки ПВС и природы наполнителя такие свойства композитов на их основе, как водостойкость, прочность, степень биоконверсии и т.д. существенно различаются, что установлено автором в результате научно-исследовательских работ.

Композиты на основе ПВС и ПС целесообразно получать методом жидкофазного наполнения, что обеспечит равномерное распределение наполнителя в матрице и позволит избежать термомеханической деструкции полисахаридов (что присуще расплавной технологии), однако, такая технология требует дальнейшего обезвоживания материала. В работе рассматриваются различные технологические подходы к проблеме ускоренного обезвоживания и формования изделий на основе ПВС и ПС.

При получении и применении композитов на основе ПВС и ПС до настоящего времени существует ряд фундаментальных задач, требующих изучения.

Во-первых, при жидкофазном совмещении полимерной матрицы и наполнителя возникает необходимость изучения закономерностей влияния технологических факторов процессов гомогенизации, обезвоживания и формования продукта (например, термомеханического воздействия либо другого способа обезвоживания), на особенности структурообразования, которые будут существенно влиять на свойства композита (прочность, водопоглощение, биодеградацию и др.), так как ПВС может изменять при переработке структурную конфигурацию, разветвленность, а также подвергаться «сшивке», что резко ингибирует компостируемость материала. В работе представлены некоторые аспекты влияния структуры ПВС на его свойства.

Во-вторых, известно, что биодеградация ПВС в естественных условиях окружающей среды носит сложный характер, и до настоящего времени установлены далеко не все закономерности влияния биотических и абиотических факторов среды на биоконверсию ПВС с различной степенью полимеризации, различным содержанием ацетатных групп и др., что требует комплексного исследования эффективность биодеградации композитов на основе ПВС и определения условий, сроков и продуктов их деструкции. В работе представлены предварительные результаты оценки компостируемости композитов на основе ПВС различных торговых марок, отличающихся степенью гидролиза.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОЛИ ФОСФОРИЛИРОВАННОГО БЕТА-АМИЛОИДА В ОБРАЗЦЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ MALDI-TOF МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Ступникова Г.С.[1], Кузин А.А.[1], Пеков С.И.[1,2], Попов И.А.[1]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий

Болезнь Альцгеймера — наиболее распространенный тип деменции, неизлечимое нейродегенеративное заболевание. Одним из синдромов болезни Альцгеймера является образование амилоидных (сенильных) бляшек вследствие накопления бета-амилоида (Aβ) в мозге человека. Ранее было показано, что агрегации пептидов способствует фосфорилирование Aβ. Фосфорилирование серина в 8ом положении происходит в металлсвязывающем домене пептида, что увеличивает сродство Aβ к ионам цинка, и, по предположению, приводит к его агрегации. Изменение степени фосфорилирования Aβ по данному аминокислотному остатку сопровождает развитие болезни Альцгеймера. Целью работы является создание быстрого чувствительного метода определения доли фосфорилированного бета-амилоида человека в образце.

Определение соотношения фосфорилированного и нативного бета-амилоида в организме человека имеет ряд существенных проблем. В биологических тканях пациентов находятся довольно малые концентрации Aβ и фосфорилированного Aβ (pAβ). Также существенными проблемами являются малое количество образца, которое можно использовать для исследования, и требование к быстрому анализу ввиду большой выборки клинических образцов. Поэтому для решения поставленной задачи эффективным методом является применение тандемного времяпролетного масс-спектрометра (MALDI-TOF). С применением масс-спектрометрии возможно одновре-

менное высокочувствительное детектирование различных изоформ бета-амилоида. Преимуществами MALDI-TOF/TOF являются высокая чувствительность и скорость анализа за счет применения MALDI, а также возможность применения в широком диапазоне масс при помощи времяпролетного масс-анализатора. Таким образом, данный метод позволяет одновременно проводить определение наличия Aβ и фосфорилированного Aβ (pAβ), а также долю pAβ в пробах малого объема, содержащих небольшое количество исследуемого пептида.

Для разработки метода анализировались бинарные смеси синтетического бета-амилоида (Aβ16, pAβ16) и (Aβ42, pAβ42). Нативный и фосфорилированный амилоид-бета рассматривали при разных концентрациях (Aβ16 и pAβ16: от 0.025 до 5 пмоль/мкл; Aβ42 и pAβ42: от 9 до 44 пмоль/мкл), и при каждой концентрации варьировалось соотношение количества Aβ и pAβ в растворе (концентрация pAβ от 0% до 100%). Смеси пептидов были нанесены на матрицу (10 мг/мл 2,5-Дигидроксибензойная кислота и 0,5% Фосфорная кислота (PA), 1:1). Выбор данной матрицы связан с наилучшей ионизацией и лучшим соотношением интенсивностей Aβ и pAβ, что важно для чувствительности и точности метода. Для сравнения также был проведен эксперимент с матрицей, в состав которой входит 0,1% Трифторуксусная кислота (TFA). Пробы анализировались с использованием масс-спектрометра MALDI-TOF/TOF UltrafleXtreme (Bruker Daltonik Gmbh, Bremen, Germany) (в режиме регистрации положительно-заряженных ионов).

В результате были построены калибровочные кривые, которые позволяют определить степень фосфорилирования бета-амилоида. Также была определена чувствительность метода относительного количественного анализа фосфорилированного бета-амилоида. Было показано, что аналитические характеристики метода не зависят от абсолютной концентрации аналита в пробе, что позволяет применять разработанный метод к анализу биологических образцов без необходимости измерения абсолютной концентрации бета-амилоида в пробе.

НЕОЖИДАННЫЕ ДВУМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Суханова Е.В.[1], Квашнин А.Г.[2], Чепкасов И.В.[2], Захарян А.А.[3], Квашнин Д.Г.[1], Попов З.И.[1]

[1] Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН
[2] Сколковский институт науки и технологий
[3] Ереванский государственный университет

Низкоразмерные наноматериалы привлекают к себе особый интерес исследователей благодаря уникальным физико-химическим свойствам и множеству возможных применений. Достижения в области механического и жидкостного отслаивания двумерных (2D) систем из слоистых объемных материалов, а также их непосредственного синтеза химическими методами позволили получить десятки 2D-материалов с уникальными и разнообразными характеристиками. Среди множества двумерных наноматериалов отдельно стоит выделить семейство дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), среди которых можно найти полупроводники, металлы, полуметаллические ферромагнетики и даже топологические изоляторы.

Многие ДПМ могут существовать в нескольких аллотропных модификациях, например, известна гексагональная H-фаза, в которой атомы переходных металлов находятся в тригонально призматическом координационном окружении атомов халькогена, а также тетрагональные T и T' (или Td) фазы, в которых атомы металла находятся в октаэдрическом окружении. Изменение стехиометрии ДПМ может привести к появлению структур, обладающих новыми уникальными свойствами. Такое нарушение может произойти как спонтанно, например, под воздействием окружающей среды, так и контролируемо, например, в процессе синтеза образцов или под действием облучения высокоэнергетическими ионами или электронами. Ранее из дихалькогенидов переходных металлов экспериментально уже были получены новые двумерные наноматериалы нестехиометрического состава, однако следует отметить, что ранее не проводилось комплексных теоретических исследований по поиску стабильных двумерных материалов в системах M-X (M = Mo, W, V; X = S, Se, Te) с использованием методов глобальной оптимизации.

В представленной работе был проведен непредвзяты поиск новых двумерных структур бинарного состава среди халькогенидов переходных металлов (Mo, W, V) и исследована их стабильность и электронные свойства. Помимо известных ранее в литературе фаз, был предсказан ряд новых двумерных структур. Показано, что термодинамически стабильные структуры Mo_5Te_2, VS, V_3S, V_3S_2, VTe_8 проявляют металлические свойства, а W_3S_5, W_5Te_2 и V_3S_4 являются полупроводниками. Рассчитанный спектр экстинкции для найденных фаз W_3S_5 и W_5Te_2 показал, что данные структуры имеют широкую полосу поглощения в видимом диапазоне спектра, что делает эти материалы перспективными кандидатами также для применения в фотовольтаике и солнечной энергетике. А исследование сорбционных свойств и изменения электронной структуры V_3S_4 показало, что предсказанный монослой V_3S_4 является перспективным для применения в области сенсорики, в частности для детекции оксидов азота NO_2 и NO. Помимо термодинамически стабильных структур в системе Mo-S был предсказан новый метастабильный состав Mo_3S_4, обладающий металлическими характеристиками. Исследование латеральной гетероструктуры с полупроводниковой H фазой состава MoS_2 продемонстрировало перспективность этого материала для создания контактов благодаря схожему значению параметров кристаллической решетки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и КН РА в рамках научного проекта № 20-53-05009.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ В МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ

Сызганцева М.А.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Металл-органические каркасы (МОФы) привлекают все большее внимание в самых различных областях прикладной химии, начиная от фотокатализаторов и заканчивая системами для аккумулирования энергии и доставки лекарств. Современные высокопроизводительные суперкомпьютеры облегчили поиск перспективных МОФов, позволяя рассчитывать свойства и процессы, ранее малодоступные для моделирования в этих материалах. К числу таких характеристик относятся параметры электронной структуры МОФов, время жизни носителей заряда в возбужденном состоянии и возможные механизмы электрон-дырочной рекомбинации.

Целенаправленное изменение времени жизни носителей заряда в МОФах и управление энергетическими потерями, связанными с безызлучательной фононной рекомбинацией, как с наиболее вероятным механизмом, являются важнейшей задачей для фотовольтаики и фотокатализа. Одним из способов достижение этой цели выступает изменение химического состава так называемых вторичных строительных блоков: металлических узлов и органических лигандов. Сочетание методов теории функционала плотности и неадиабатической молекулярной динамики позволяет теоретически рассчитывать излучательные и безызлучательные времена рекомбинации, искать взаимосвязь между изменением электронной структуры и параметрами, характеризующими процесс рекомбинации, при модуляции химического состава МОФа, а также детальнее изучать указанные процессы, протекающие на атомарном уровне. Результаты исследований в этом направлении представлены в данном докладе.

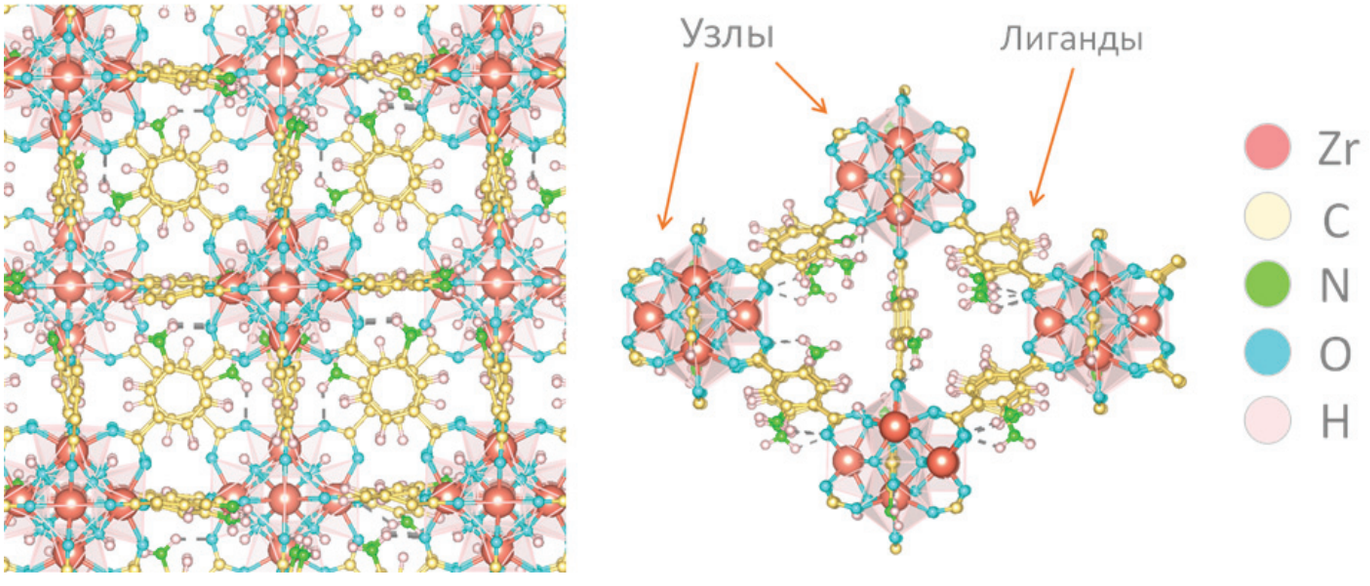


Рис. 1. Кристаллическая структура одного из исследуемых МОФов UiO-66-NH_2 и детальное строение характерных элементов каркаса.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

СОЗДАНИЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК С ПОМОЩЬЮ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ

Сыромятников А.Г.[1,2], Кудряшов С.А.[1], Клавсюк А.Л.[1], Салецкий А.М.[1]

[1]*МГУ им. М. В. Ломоносова, Физический факультет*
[2]*ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН*

Одномерные наноструктуры привлекают внимание ученых уже продолжительное время. Причиной этому служат многие необычные свойства таких объектов, которые могут позволить использовать их в качестве, например, новых элементов памяти. С другой стороны для использования их в промышленности, необходим метод быстрого и точного создания массивов одномерных наноструктур, которые не только хорошо упорядочены, но и обладать одинаковой длиной.

В данной работе кинетическим методом Монте-Карло исследовались процессы напыления и дальнейшего формирования одноатомных металлических наноцепочек на вицинальных (ступенчатых) металлических поверхностях. В качестве конкретных систем были выбраны Co/Cu и Ag/Pt ввиду наличия доступных экспериментальных данных. Как было показано ранее, в равновесном состоянии вероятность длин в таких системах монотонно уменьшается с ростом длины цепочки, т.е. длина цепочки является случайной величиной.

Было показано, что эволюция атомных цепочек в процессе нагревания и охлаждения протекает различным образом. При температуре выше критической система быстро достигает термодинамического равновесия. Однако ниже нее система остается в неравновесном состоянии, так как мобильность адатомов по поверхности существенно снижена.

В свою очередь, если приложить к образцу градиент температуры в направлении, параллельном краю террас, то случайность процесса формирования наноцепочек нарушается, и формирование цепочек продолжается на «холодной» стороне поверхности. Этот эффект наблюдается только, если крайние точки градиента температуры лежат по разные стороны от критической температуры.

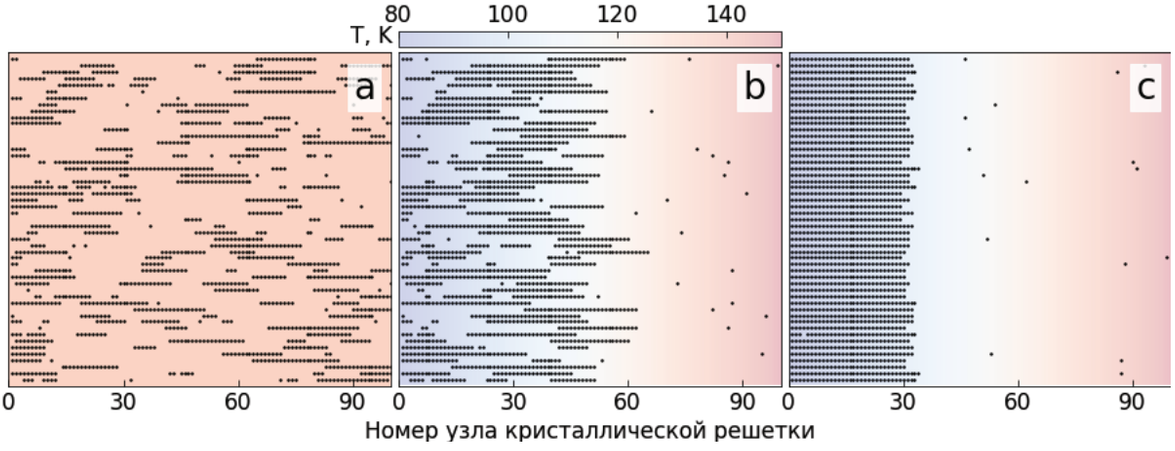


Рис. 1. Фрагмент вицинальной поверхности с атомными цепочками на ней a) при 130K до применения локального градиента температур, b) во время и c) после его снятия (равновесное состояние). Диапазон изменения температур от 80K до 150K. Каждый горизонтальный ряд соответствует одной террасе поверхности.

ОБЗОР ИНКАПСУЛАНТОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ ПАНЕЛЕЙ

Тамбура М., Гостева Е.А.
НИТУ «МИСиС»

Солнечная энергия является одним из самых популярных источников возобновляемой энергии доступной на земле и в космосе. Эту популярность ей обеспечивает то, что она легко доступна, не требует большого ухода за оборудованием и зависит от доступного источника энергии. К тому же существует мнение о том, что солнечная энергия совершенно чистая так как она не влияет на окружающую среду. Однако это мнение не верно так как оно принимает во внимание только период работы уже готовой фото панели и не учитывает износ аккумуляторов и загрязнений при производстве. В литературе, принимающей во внимание все эти данные показано что солнечная энергетика больше выбрасывает CO_2 по сравнению с атомной энергетикой и ветроэнергетикой. Таким образом долговечность солнечных модулей не только экономический вопрос, но и экологический. Срок службы фотоэлектрического модуля, как правило, ограничивается износом составных частей, что приводит к снижению эффективности и возможному выходу из строя.

Одна из составляющих которая особенно подвержена деградации, является инкапсулантом. Он используется для соединения кремниевой ячейки с передним стеклом и подложкой в процессе ламинирования. Он также необходим для механической защиты и электрической изоляции и также защитите солнечных элементов от повреждений окружающей среды, включая дождь, снег, пыль, термические и механические воздействия. Разрушение этого слоя может привести к оптической развязке из-за обесцвечивания с последующей потерей мощности, потерей адгезионной прочности, расслоением и коррозией металлических деталей из-за образования уксусной кислоты в случае использования ЭВА.

ЭВА (Этиленвинилацетат) самый используемый инкапсулант. Его преимущества такие как низкая цена, простота обработки, высокая прозрачность, хорошая химическая и электрическая стойкость, хорошая светопроницаемость и эластичность, отличная текучесть расплава, сделали эго доминирующим игроком в фотоэлектрической промышленности. Тем не менее, он легко подвержен деградации, связанной с окружающей средой, и

приводит к снижению эффективности производства энергии. Следовательно, значительное внимание исследовательского сообщества было привлечено к изучению новых методов, связанных с устойчивостью к старению инкапсулированной пленки ЭВА в форме расширения сетчатой структуры с поперечными связями в полимерной матрице, а также путем смешивания антиоксидантов, поглотителей УФ-излучения, и фотостабилизаторы.

Другие разработки используют другие полимеры такие как полиуретаны (ПУ), поливинилбутиралы (ПВБ), термопластичные полиолефины (ТПО), полиэпоксиды и смеси в разных пропорциях этих полимер чтобы заменить ЭВА. В числе этих работ ведутся работы над полидиметилсилоксаном (ПДМС).

Инкапсуланти первого поколения для фотоэлектрических модулей были основаны на ПДМС из-за его превосходной термической и УФ-стойкости. Из-за высоких производственных затрат ПДМС был заменен более дешевыми материалами с аналогичными характеристиками, такими как ЭВА, ТПО и ПВБ. Однако с разработкой новых силиконовых инкапсулантов и связанных с ними процессов, а также появления рынков фотоэлектрических систем, требующих более высокой прочности и устойчивости к более суровым условиям окружающей среды, силиконовые инкапсуланти снова стали реальным вариантом для коммерческих модулей для производства электроэнергии.

ФУРЬЕ-ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ БЕЛКОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ БОЛЬНЫХ МНОЖЕСТВЕННОЙ МИЕЛОМОЙ

Тельная Е.А.[1], Михайлец Э.С.[1], Чернышев Д.А.[1], Плотникова Л.В.[1], Гарифуллин А.Д.[2], Волошин С.В.[2], КувшиновА.Ю.[2], Поляничко А.М.[1]

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*ФГБУ РосНИИГТ ФМБА России, Санкт-Петербург, Россия*

Множественная миелома (ММ) — онкологическое заболевание, характеризующееся повышением концентрации иммуноглобулина моноклонального типа в крови. Также для заболевания является характерным понижение концентрации сывороточного альбумина. Вторичная структура сывороточных альбуминов (~65% α — спиралей) и иммуноглобулинов (~79% β-слоев) принципиально отличается. Так как именно эти два типа белков являются наиболее многочисленными, среди белков сыворотки крови, то именно их содержание определяет картину распределения вторичных структур белков сыворотки крови. А изменения в их концентрациях могут повлечь изменения в общем распределении вторичных структур. Существует также редкий (1% всех случаев) подтип заболевания — «несекретирующая» миелома, для которого не наблюдается гиперпродукция иммуноглобулинов (не должно также наблюдаться повышенное содержание β-слоев), однако есть иные биохимические изменения, характерные для ММ.

Один из методов, позволяющих регистрировать общую картину содержания вторичных структур белка разного типа — ИК-спектроскопия. Метод не требует трудоемкой пробоподготовки, а также большого анализа данных.

В работе был проведен анализ 33 образцов сыворотки крови больных множественной миеломы и 26 образцов сыворотки крови здоровых доноров. В качестве основного параметра для сравнения разных групп образцов был выбран параметр α/β — отношение процентного содержания α-спиралей к процентному содержанию β-слоев. Этот показатель для группы здоровых доноров составил 0,9±0,1. Для группы больных ММ без учета образцов несекретируемой миеломы 0,6±0,1. Таким образом, из-за повышения β-слойных вторичных структур белков, мы пронаблюдали понижение параметра α/β для группы образцов сыворотки крови больных множественной миеломой.

Часть работ проводили с использованием оборудования Научного Парка СПбГУ: ресурсных центров «Оптические и лазерные методы исследования вещества» и «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники», «Нанотехнологии», «Криогенный отдел».

ПРОТОНПРОВОДЯЩИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОВ СУПЕРПРОТОННИКОВ

Тимаков И.С., Гребенев В.В., Коморников В.А.

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук», Москва, Россия

Твёрдые электролиты, обладающие высокой протонной проводимостью при относительно низких температурах, без сомнения представляют большой интерес как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. В настоящее же время данный класс твердых протонных проводников является весьма разнообразным.

Перспективным объектом для исследований являются соединения со структурно-разупорядоченными фазами, характеризующиеся высоким значением протонной проводимости при средних и низких температурах. К ним можно отнести и кристаллы-суперпротоники, представленные семейством с общей формулой $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2}\cdot yH_2O$ (где M = K, Rb, Cs, NH_4; AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, $HAsO_4$).

Одним из уникальных свойств кристаллов данного семейства является аномально высокая протонная проводимость при повышенной температуре. Само состояние с высокой протонной проводимостью в кристаллах-

суперпротониках возникает, как правило, в результате структурного фазового перехода. Стоит отметить, что аномально высокая протонная проводимость в данном семействе кристаллов в большей степени связана именно со структурными особенностями и не зависит от влажности или дефектов реальной структуры.

В настоящее время крайне актуальной технологической задачей является получение материалов, пригодных для использования в качестве тонких мембран водородных топливных элементов. В связи с этим, идет непрерывный процесс усовершенствования уже известных составов твердых электролитов, в том числе и на основе кристаллов-суперпротоников. Для поиска новых соединений данного семейства нами был исследован ряд четырёхкомпонентных водно-солевых систем: K_2SO_4 — Rb_2SO_4 — H_2SO_4 — H_2O, K_2SO_4 — $(NH_4)_2SO_4$ — H_2SO_4 — H_2O, Rb_2SO_4 — $(NH_4)_2SO_4$ — H_2SO_4 — H_2O, $CsHSO_4$ — CsH_2PO_4 — $NH_4H_2PO_4$ — H_2O и др.

Стоит отметить, что основные недостатки протонообменной мембраны из суперпротоников связаны со слабой механической прочностью, термической и, в ряде случаев, химической неустойчивостью непосредственно самого материала мембраны. К настоящему времени существует несколько способов решения этих проблем и один из них — это создание композитных материалов.

Для получения функциональных материалов, а также для исследования влияния природы армирующего компонента на свойства получаемых материалов, были синтезированы протонпроводящие композитные материалы с тремя типами добавок. Наша идея армирования состоит в формировании механической связи во вводимом компоненте для получения трехмерной сетки армирующего компонента, что позволит соблюсти условия малого содержания армирующего компонента при сохранении высокой проводимости. В качестве армирующего компонента были выбраны следующие материалы: тефлон–42 $[-CF_2-CF_2-CH_2-CF_2-]_n$, формасил $[SiOR]_n$ и алюмофосфат $[Al_2(HPO_4)_3]$.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРИМОСТИ И СКОРОСТИ РАСТВОРЕНИЯ ФУМАРОВОЙ КИСЛОТЫ В СОСТАВЕ ТВЁРДЫХ ДИСПЕРСИЙ С ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯМИ И ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНАМИ

Тимофеева В.В.[1,2], Лебедева О.Е.[2]

[1]ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет», Россия, г. Белгород
[2]ООО «Агровет», Россия, г. Белгород

Фумаровая кислота нашла свое применение в различных отраслях человеческой деятельности. В пищевой промышленности фумаровая кислота используется в качестве пищевой добавки (Е 297) выполняет функцию подкислителя. В медицине препараты фумаровой кислоты относятся к средствам, имеющим метаболический тип действия, направлены на регуляцию энергетического и пластического обмена. В ветеринарии применение добавок с фумаровой кислотой обусловлено положительным влиянием на организм животного при стрессовых процессах. Существенным недостатком фумаровой кислоты является низкая биологическая доступность вследствие малой растворимости в воде. Одним из способов повышения растворимости биологически активных веществ является метод получения твердых дисперсии.

Целью данной работы являлось обоснование возможности использования полиэтиленгликолей (ПЭГ) и поливилпирролидонов (ПВП) с различной молекулярной массой для увеличения растворимости и скорости растворения фумаровой кислоты путем образования физических смесей и твердых дисперсий с предложенными полимерами.

Благодаря получению смеси компонентов и твердых дисперсий фумаровой кислоты с ПЭГ молекулярной массой 1000, 1500, и 4000 г/моль и ПВП молекулярной массой 12000, 17000, 25000 и 30000 г/моль повышается растворимость фумаровой кислоты по сравнению с чистым веществом. Наибольшее увеличение растворимости фумаровой кислоты, в 1,59 раза, наблюдается для ее твердых дисперсий с ПЭГ-4000 в соотношении 1:9 и в 2,72 раза — для ее твердых дисперсий с ПВП-12000 в соотношении 1:9. Аналогичные смеси компонентов приводит к увеличению растворимости фумаровой кислоты в 1,36 раза для ее смеси с ПЭГ-4000 и в 1,75 раза для ее смеси с ПВП-12000. Полученные результаты свидетельствуют о существовании зависимости между соотношением фумаровая кислота: полимер и растворимостью фумаровой кислоты.

Установлено также наличие зависимости между соотношением фумаровая кислота: полимер и скоростью ее растворения. С чистым веществом концентрация 0,56% была достигнута через 60 минут. В случае твердой дисперсии фумаровая кислота: ПЭГ-4000 в соотношении 1:9 максимум концентрации достигался через 20 минут и составлял 0,71%, в соотношении 5:5 максимум был достигнут через 60 минут и составил 0,69%. В случае твердой дисперсии фумаровая кислота: ПВП-12000 в соотношении 1:9 максимум концентрации достигался через 20 минут и составлял 1,08%, в соотношении 5:5 максимум был достигнут через 50 минут и составил 0,61%.

Полученные в данной работе результаты свидетельствуют об увеличении растворимости и скорости растворения в воде фумаровой кислоты из твердых дисперсий с ПЭГ-4000 и ПВП-12000 по сравнению с растворимостью и скоростью растворения чистого вещества. Полученные данные могут быть использованы для совершенствования технологии получения препаратов фумаровой кислоты с целью увеличения ее растворимости и биодоступности.

ФАЗОВО-АМПЛИТУДНАЯ МОДУЛЯЦИЯ В ЛОКАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА

Тимченко А.С.[1], Филюшкина В.И.[1], Белова Е.М.[1], Гамалея А.А.[2], Томский А.А.[2], Седов А.С.[1]

[1]ФИЦ ХФ РАН, лаборатория клеточной нейрофизиологии человека
[2]НМИЦ нейрохирургии им. академика Н.Н. Бурденко

В настоящее время остро строит задача определения электрофизиологических коррелятов двигательных нарушений в болезни Паркинсона (БП). Низкочастотная активность в бета-диапазоне (12-35 Гц) локальных потенциалов, записанных с помощью DBS-электродов, считается значимым биомаркером акинетических расстройств: брадикинезия, ригидность (Gatev, 2006).

Также, было показано, что фазово-амплитудная модуляция (PAC, рис. 1А) между низкочастотной (НЧ) и высокочастотной (ВЧ) — 200-400 Гц, компонентами сигналов субталамического ядра (STN) имеет функциональную значимость в болезни Паркинсона (van Wijk et al., 2016). В данной работе проверялось влияние дофаминергической терапии на PAC, а также пространственная специфичность PAC в субталамическом ядре.

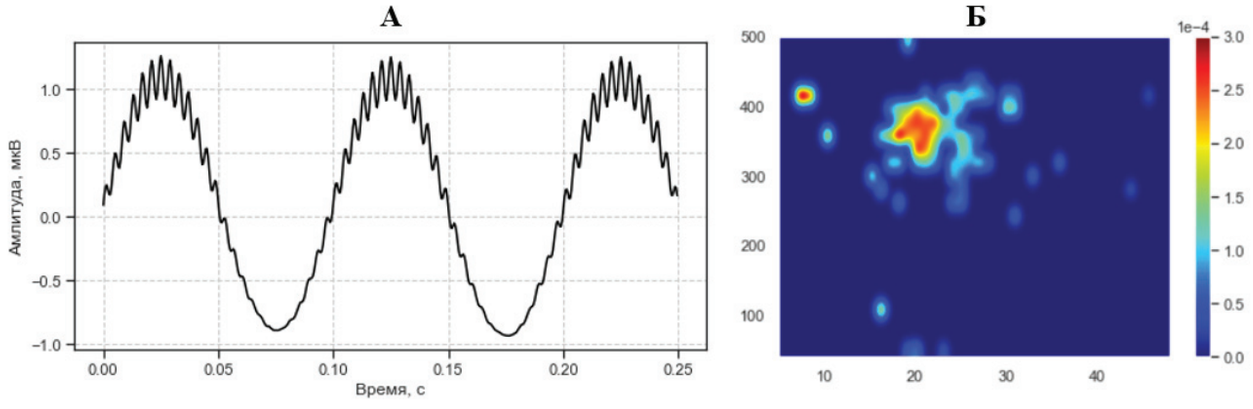


Рис. 1. А. Пример развертки модулированного сигнала во времени **Б.** Комодулограмма фазово-амплитудной модуляции в локальном потенциале пациента с болезнью Паркинсона в OFF L-DOPA состоянии. Модуляция наблюдается между фазой 22 Гц компоненты сигнала и амплитудой 380 Гц компоненты.

Данные были получены в центре нейрохирургии им. Бурденко после проведения операции по имплантации DBS-электродов билатерально в субталамическое ядро шести пациентов с БП. В первый и пятый день после операции была произведена операция выведения электродов с последующей записью локальных потенциалов, ЭЭГ и ЭМГ в покое и во время двигательных тестов.

Индекс модуляции (PAC) был посчитан для набора НЧ и ВЧ осцилляций с помощью метода, описанного в Tort et al., 2006. Его статистическая значимость была посчитана методом непараметрических статистических тестов (Maris & Oostenveld, 2007). Были проведены сравнения PAC на разных глубинах погружения электрода в STN. Были исследованы различия в мощности модуляции в OFF L-DOPA и ON L-DOPA медикаментозных условиях пациента в состоянии покоя.

Проведенный анализ позволяет сделать следующие выводы. Каплинг модулируется в OFF/ON состояниях, причем в ON PAC выражен меньше или отсутствует. PAC более пространственно специфичен, чем бета-осцилляции, преимущественно локализуясь у верних контактов электрода, соответствующим сенсомоторному разделу STN. Таким образом, PAC может обладать уточняющей способностью в БП, что позволит улучшить существующие программы DBS-стимуляции.

ВЫЯСНЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ УЧАСТИЯ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТРОМАЛЬНЫХ КЛЕТОК В РЕГУЛЯЦИИ ДИФФЕРЕНЦИРОВКИ ФИБРОБЛАСТОВ

Толстолужинская А.Е., Басалова Н.А., Карагяур М.Н., Еремичев Р.Ю., Ефименко А.Ю.

Институт регенеративной медицины, Медицинский научно-образовательный центр, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Фиброз характеризуется разрастанием соединительной ткани в органе и может привести к нарушению архитектуры органа и даже к полной потере его функции. Единицей фиброза является фибротический фокус — очаг активного депонирования внеклеточного матрикса (ВКМ), окруженный большим числом эффекторных клеток

прогрессирования фиброза — миофибробластами. Миофибробласты синтезируют и активно ремоделируют компоненты ВКМ, а также экспрессируют белок α-гладкомышечный актин (α-актин), который является ключевым компонентом стресс-фибрилл.

Было обнаружено, что мезенхимальные стволовые/стромальные клетки (МСК) благодаря своей активной паракринной функции способны выделять внеклеточные везикулы (ВВ-МСК), влияющие на фиброгенез. Компоненты ВВ-МСК вовлечены в ингибирование процессов фиброгенеза, способствуют уменьшению числа миофибробластов и ВКМ в пораженных тканях и могут даже приводить к реверсии фиброза. По нашим данным и результатам других исследователей, именно микроРНК в составе ВВ-МСК могут играть ключевую роль в перечисленных процессах. Чтобы лучше понять механизмы, опосредующие влияние микроРНК, переносимых ВВ-МСК, мы разработали две клеточные модели *in vitro*, 2D и 3D, с помощью которых анализировали действие ВВ-МСК на дифференцировку фибробластов.

2D модель представляет собой культуру дифференцированных под действием профибротического фактора TGF-β фибробластов легких человека в миофибробласты. Добавление к 2D модели ВВ-МСК, выделенных методом ультрафильтрации кондиционированной среды МСК, привело к резкому снижению количества миофибробластов и экспрессии белков ВКМ, что мы показали с помощью иммуноцитохимического метода (ИЦХ) и дот-блоттинга. Такая модель успешно отразила ингибирующий эффект ВВ-МСК на трансдифференцировку миофибробластов, но она соответствует только части процессов, происходящих при фиброгенезе *in vivo*. Поэтому мы решили создать более релевантную клеточную модель, имитирующую структуру фибротического фокуса, на основе децеллюляризованного сфероида, окруженного миофибробластами. Также для исследования трансдифференцировки миофибробластов в динамике для этой модели была получена специальная клеточная линия фибробластов с TGF-β-зависимой экспрессией флуоресцентного белка α-актин-GFP. Используя эту модель, с помощью ИЦХ и конфокальной микроскопии мы показали, что добавление ВВ-МСК приводит к уменьшению маркеров, характерных для миофибробластов, и к разрушению структуры модели фибротического фокуса.

Одними из потенциальных компонентов, способных влиять на процессы фиброгенеза, считаются микроРНК. В связи с этим, используя наши модели, мы проанализировали специфические микроРНК, связанные с фиброзом, путем трансфекции ВВ-МСК синтетическими ингибиторами микроРНК. В результате было показано, что эффект снижения маркерных признаков фиброза, таких как α-актина и белков фибротического ВКМ, при добавлении ВВ-МСК к клеточным моделям преимущественно обусловлен присутствием в везикулах микроРНК-129 и микроРНК-92a.

Таким образом, используя 2D и 3D клеточные модели, мы показали ключевую роль ВВ-МСК в процессах фиброгенеза и их способность ингибировать фиброз. Эти данные в дальнейшем могут быть использованы для рассмотрения ВВ-МСК и специфических антифибротических микроРНК в качестве перспективного кандидата для лечения фиброза. Исследование было поддержано грантом РФФИ № 20-315-90120.

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ, НАПОЛНЕННЫХ ГРАФЕНОМ, МНОГОСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ИХ СМЕСЯМИ

Торкунов М.К., Шиянова К.А., Гудков М.В., Гулин А.А., Рывкина Н.Г., Баженов С.Л., Мельников В.П.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

На данный момент в мире существует спрос на такие изделия как, гибкие датчики, метки радиочастотной идентификации, антистатические покрытия, а также на материалы, обладающие способностью к поглощению и отражению электромагнитного излучения. Требования, предъявляемые к вышеперечисленным изделиям в перспективе, могут быть удовлетворены электропроводящими полимерными композитами.

Полимеры часто рассматриваются как типичные диэлектрики и обычно используются при создании различных изолирующих материалов, однако при добавлении электропроводящего материала в полимерную матрицу становится возможным создание композита, способного проводить электрический ток. В качестве электропроводящих наполнителей обычно используются порошки металлов, сажа и, открытые сравнительно не давно, углеродные наноразмерные материалы, такие как графен, углеродные нанотрубки, а также их химические производные. Создание полимерных композитов на основе используемых в промышленности полимеров с высокой электропроводностью и необходимым уровнем физико-механических свойств является актуальной задачей в настоящее время.

Целью данной работы являлось получение и исследование электропроводящих и механических свойств полимерных композитов с сегрегированной сетчатой структурой на основе сополимера винилиденфторида и тетрафторэтилена (марка Ф-42В) в качестве матрицы и смеси многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и восстановленного оксида графена (ВОГ) в качестве наполнителя. Использование смеси этих двух наполнителей приводит к формированию высокоразвитой электропроводящей сети за счет создания дополнительных каналов проводимости между МУНТ и графеновыми пластинами. Было проведено исследование влияния соотношения ВОГ/МУНТ при фиксированном значении суммарной массовой доли углеродных нанонаполнителей в компо-

зитах (1 мас.%) на электропроводность и физико-механические свойства полученных композитов. Установлено, что при увеличении содержания МУНТ в смеси наполнителей, электропроводность растет и носит экстремальный характер. Максимум электропроводности наблюдается при соотношении ВОГ/МУНТ 1:3 и составляет 0,16 См/м. В свою очередь, физико-механические свойства композитов соответствуют таковым для используемого полимера без наполнителей.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФИЦ ХФ РАН.

БИОСОВМЕСТИМОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФОТОАКТИВНЫХ ПОЛИЭФИРНЫХ МАТРИКСОВ ДЛЯ ТКАНЕИНЖЕНЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Трифанова Е.М. [1], Акасов Р.А. [2], Кошелев А.В. [1], Попов В.К. [1]

[1]*Институт фотонных технологий ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН*
[2]*Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН*

Фотоактивные матриксы, на основе биосовместимых полимеров, импрегнированных наноразмерными апконвертирующими фосфорами (НАФ), могут использоваться в тканевой инженерии для адресной доставки биоактивных веществ, визуализации, а также для изучения их взаимодействия с окружающими тканями. Одним из распространенных способов изготовления таких матриксов является электроспиннинг, позволяющий изготавливать нетканые трехмерные структуры, морфологически схожие с природным внеклеточным матриксом.

Целью настоящей работы является формирование фотоактивных полиэфирных матриксов на основе полилактогликолида и исследование их свойств. Для этого в исходный раствор полилактогликолида в 1,1,1,3,3,3-гексафторизопропаноле добавляли НАФ β-$NaYF_4$:Yb^{3+}:Er^{3+}/$NaYF_4$ со структурой «ядро/оболочка» размером 13 нм в двух разных концентрациях — 50 и 500 мкг на 100 мг полимера. Методом электроспиннинга из полученных растворов формировали волокнистые матриксы. С помощью сканирующей электронной микроскопии показано, что ни микроструктура, ни морфология поверхностей матриксов практически не зависят как от присутствия в них НАФ, так и от концентрации последних. С помощью имиджинговой системы, использующей для оптической накачки образцов сканирующий лазерный луч на длине волны 976 нм, получены изображения исходных и фотоактивных матриксов. Все исследованные матриксы с НАФ хорошо визуализируются под действием ИК излучения и имеют четко очерченные границы. НАФ в гексане и полилактогликолидных матриксах имеют практически одинаковые (в пределах погрешности измерений) времена жизни фотолюминесценции. Проведена оценка цитотоксичности матриксов с использованием культуры клеток иммортализованных фибробластов мыши. Адгезионные свойства матриксов анализировались в процессе культивирование фибробластов на их поверхности в течение 9 суток. Рост клеток на поверхности матриксов оценивали с помощью инвертированного микроскопа. Активный рост фибробластов на поверхности матриксов подтвержден как результатами МТТ теста на 2-й и 9-й день культивирования, так и данными конфокальной флуоресцентной микроскопии, продемонстрировавшими равномерное распределение клеток по всей поверхности матриксов на 9-й день культивирования. При этом не обнаружено какой-либо корреляции между концентрацией НАФ и скоростью роста клеток, что подтверждает правильность выбора этих НАФ в качестве нетоксичного фотолюминесцентного маркера и успешность их импрегнации в материал матриксов.

Таким образом, методом электроспиннинга сформированы полиэфирные матриксы, импрегнированные НАФ. Показано, что НАФ позволяют визуализировать полученные нетканые структуры. Фотоактивные матриксы являются нетоксичными и могут быть использованы для разработки и изготовления на их основе различных тканеинженерных конструкций.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и РФФИ (проект № 20-32-90218_ Аспиранты).

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ДОБАВОК НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НЕТКАНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-3-ГИДРОКСИБУТИРАТА

Тюбаева П.М.[1,2], Ольхов А.А.1,[2], Лобанов А.В.[1,2]

[1]*Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова, Москва*
[2]*Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля РАН, Москва*

В настоящее время большой интерес представляет разработка эффективных методов контролируемой модификации биосовместимых полимеров для медицины. Целью данной работы является создание ультратонких волокон на основе поли-3-гидроксибутирата (рис. 1, а), полученных методом электроформования с введением модифицирующих добавок природного и синтетического происхождения. В качестве добавок были выбраны комплексы металлопорфиринов: гемин (рис. 1, б) и тетрафенилпорфирин с трёхвалентным железом (рис. 2, в).

Гемин обладает множеством преимуществ: он термостабилен, обладает антимикробной активностью, биосовместим и может быть использован в медицинских целях. Тетрафенилпорфирин с трёхвалентным железом известен своей высокой каталитической активностью, магнитными свойствами, антимикробным эффектом и отсутствием цитотоксичности.

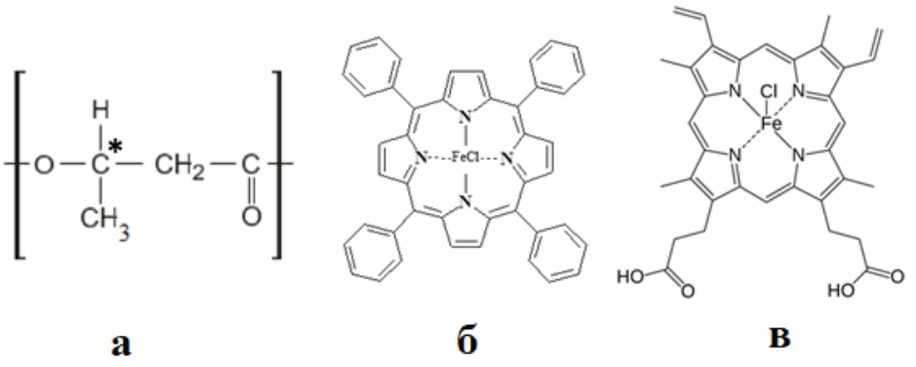


Рис. 1. Структурные формулы поли-3-гидроксибутирата (а), модифицирующей добавки природного происхождения — гемина (б), модифицирующей добавки синтетического происхождения — тетрафенилпорфирина с трёхвалентным железом (в).

Новые материалы были исследованы методами ДСК, РСА, ЭПР, СЭМ и другими. В работе было установлено влияние каждой из добавок на структуру и свойства ультратонких волокон. Обе добавки внесли значительный вклад на этапе формирование волокнистой структуры, способствуя формированию равномерных, бездефектных, тонких волокон. Однако, влияние добавок на надмолекулярную структуру, химические и физические свойства поли-3-гидроксибутирата оказалось разнонаправленным. В работе предложены причины наблюдаемого эффекта, обусловленные химической структурой каждой из добавок. Полученные результаты могут быть применены в создании биомедицинских материалов с регулируемой структурой и свойствами.

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ ВОССТАНОВЛЕННЫХ МЕТАЛЛОФТАЛОЦИАНИНОВ И РОДСТВЕННЫХ ИМ МАКРОЦИКЛОВ

Фараонов М.А., Конарев Д.В.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Порфирины и их аналоги представляют собой обширный класс макрогетероциклических соединений, которые находят широкое применение в ряде наукоемких областей — при изготовлении светоизлучающих диодов, солнечных ячеек, транзисторов, устройств записи и хранения информации и др. Фталоцианины давно используются как красители и пигменты и производятся в промышленности в больших масштабах.

Восстановление или окисление макроциклов приводит к появлению делокализованного на макроцикле неспаренного электрона. Такие соединения могут обладать рядом интересных свойств (например, металлической проводимостью, гигантским магнетосопротивлением, ферромагнитными взаимодействиями и ферримагнитным упорядочением спинов).

Процессы окисления макрогетероциклов (в частности фталоцианинового цикла) хорошо изучены. Исследования последних лет показывают, что соединения с восстановленными макрогетероциклами, как и окисленные макроциклы, так же могут обладать разнообразными физико-химическими свойствами.

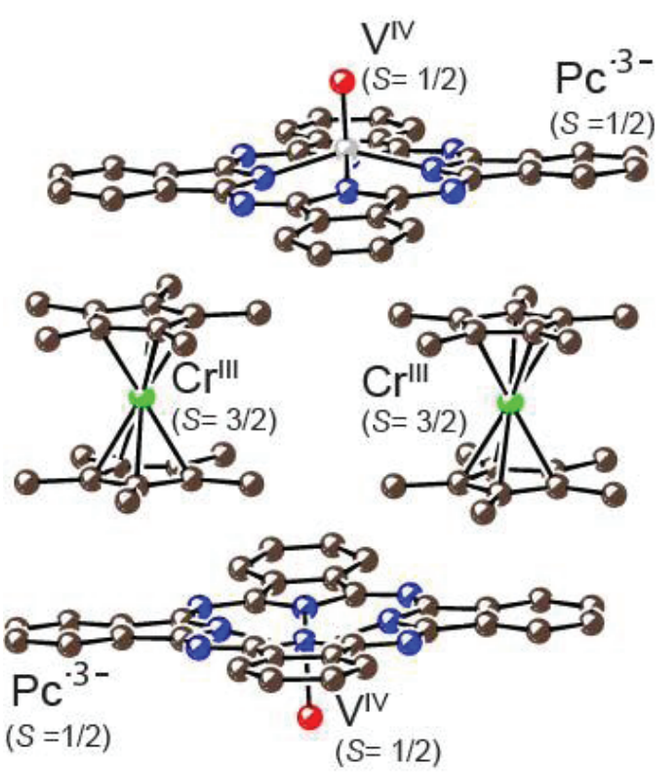


Рис. 1. Структура $[(Cp^*_2Cr^+)\{VIVO(Pc^{\bullet 3-})\}^-]_2$ фрагмента в соли $(Cp^*_2Cr^+)\{V^{IV}O(Pc^{\bullet 3-})\}^-\cdot 3C_6H_4Cl_2$.

В этой работе мы разработали методы получения разнообразных комплексов на основе MPcs и родственных им соединений. В виде монокристаллов получена большая серия соединений, исследованы их кристаллическая структура, оптические и магнитные свойства. Показано, что за счет варьирования исходных соединений (Pc, катион, координирующийся фрагмент) мы можем направленно влиять на упаковку макроциклов в солях, а также на оптические и магнитные свойства получаемых комплексов.

Например, на основе $\{VIVO(Pc^{\bullet 3-})\}^{\bullet -}$ серия мультиядерных соединений с перспективными магнитными свойствами. Соединение $(Cp^*_2Cr^+)\{V^{IV}O(Pc^{\bullet 3-})\}^-\cdot 3C_6H_4Cl_2$ содержит $[(Cp^*_2Cr^+)\{V^{IV}O(Pc^{\bullet 3-})\}^-]_2$ фрагменты, в которых наблюдается ферромагнитное взаимодействие спинов.

Соединения тетрапиразинопорфиразинов получены при поддержке проекта РНФ № 21-73-10207. Исследования магнитных свойств комплексов частично поддержаны Государственным заданием № АААА-А19-119092390079-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТА-ХРОМОФОРА ЗЕЛЕНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА

Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Низкая токсичность, относительная простота использования и возможность адресного мечения непосредственно внутри живых клеток сделали флуоресцентные белки незаменимым инструментом визуализации в современных биологических исследованиях. В изолированном хромофоре зеленого флуоресцентного белка (GFP) флуоресценция конкурирует с безызлучательным каналом релаксации, связанным с фотоизомеризацией хромофора. Для модификации GFP-хромофора с CF3-заместителем в мета-положении экспериментально наблюдается неожиданно большой квантовый выход, несмотря на то, что внутримолекулярное вращение не осложнено введением дополнительных групп. Целью данной работы является исследование фотофизических и фотохимических свойств CF3-модификации хромофора зеленого флуоресцентного белка методами квантовой химии высокого уровня точности.

Равновесные геометрические конфигурации хромофора в газовой фазе в основном и возбужденных электронных состояниях, а также энергии вертикальных переходов в спектрах поглощения и флуоресценции рассчитывались с помощью многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений XMCQDPT2. Расчет энергетического спектра и анализ характера низколежащих электронно-возбужденных состояний продемонстрировал наличие оптически разрешенного возбужденного состояния с внутримолекулярным переносом заряда. Найдена геометрия конического пересечения основного и возбужденного состояний. Было установлено, что геометрия конического пересечения обладает неплоской структурой и характеризуется поворотом вдоль двойной мостиковой связи и значительной пирамидализацией атома азота имидазольного кольца. Анализ топографии поверхностей потенциальной энергии вблизи конического пересечения позволил найти седловую точку реакции перехода молекулы в нефлуоресцирующее состояние. Рассчитанное из значений барьера время жизни флуоресценции хорошо согласуется с экспериментальными данными. Высокие значения средних дипольных моментов геометрий конического пересечения и седловой точки, а также сильное разделение зарядов в данных структурах способствует стабилизации заряженных структур в полярных растворителях и объясняет наблюдаемый сольватохромизм и зависимость квантового выхода флуоресценции от растворителя.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №22-13-00126) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В.Ломоносова, а также вычислительного кластера лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного согласно Программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ В КИНЕТИКЕ ПЛАВЛЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Фатихова Л.Р., Галимзянов Б.Н.

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

Понимание процессов структурно-фазовых трансформаций на микроскопических масштабах имеет важное фундаментальное значения. Исследование кинетики формирования жидкой фазы при плавлении кристаллов сильно зависит от протокола нагревания и от условий окружающей среды. Скорость нагревания, внешнее давление, температура начального состояния кристалла определяют как скорость протекания фазового перехода, так и механизм формирования зародышей жидкой фазы. Несмотря на достигнутые успехи в изучении механизмов плавления твердых тел, отсутствует общепринятое понимание универсальных закономерностей в кинетике формирования и роста жидких вкраплений малых размеров. Это обусловлено отсутствием детальных молеку-

лярно-динамических расчетов, охватывающих процесс плавления на наноразмерных пространственно-временных масштабах.

В настоящем исследовании мы выполнили моделирование молекулярной динамики процесса плавления кристаллической системы Леннард-Джонса, состоящей из 13500 частиц. Расчеты выполнены с использованием вычислительного пакета LAMMPS. Начальная конфигурация системы задается в виде кристалла с температурой T=0.1Tm, где Tm — температура плавления системы. Нагревание кристаллических образцов осуществлялось до температуры 1.5Tm с различными скоростями. Полученные результаты показывают, что процесс плавления системы является аналогичным обратному процессу — капельному зародышеобразованию в насыщенном паре. А именно, мы наблюдаем гомогенное формирование и рост жидкой фазы внутри кристаллической системы, который напоминает сценарий фазового перехода насыщенный пар-жидкость (см. рисунок 1).

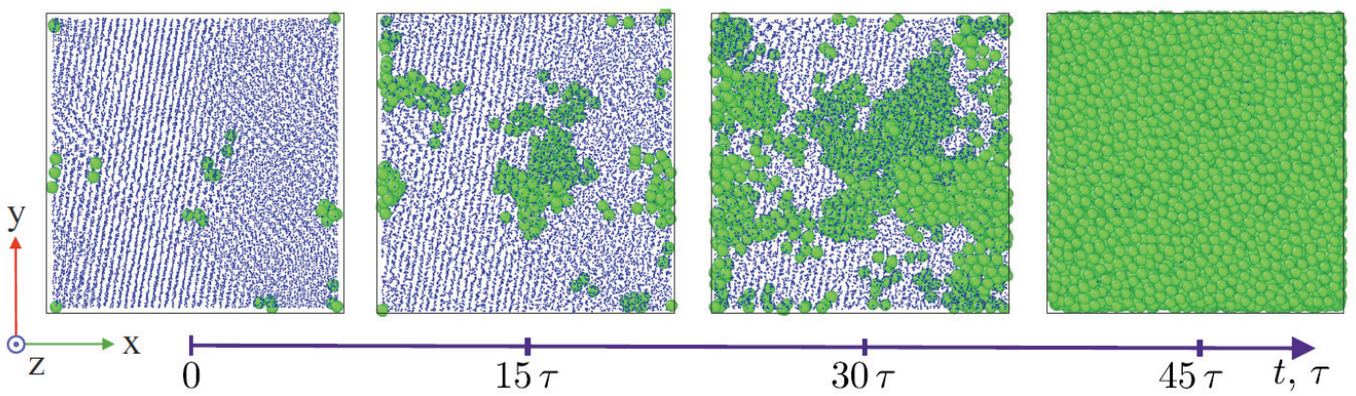


Рис. 1. Мгновенные снимки системы в различные моменты времени после начала процесса нагревания: синие точки — частицы кристаллической фазы, зеленые кружки — частицы жидкости.

Интенсивное плавление кристалла начинается с некоторым временем задержки и только после спонтанного появления жидких зародышей критического размера, как правило, состоящих из нескольких десятка частиц. При температурах вблизи плавления наблюдается быстрый рост и сращивание жидких зародышей вплоть до полного плавления кристалла. Такой сценарий плавления наблюдается при других рассмотренных скоростях нагревания. Результат оценки скорости формирования и роста зародышей жидкости, указывает на возможность унифицированного описания процесса плавления кристаллической системы при различных протоколах нагревания.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

ВЛИЯНИЕ ВКЛЮЧЕНИЯ ФАКТОРОВ РОСТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВУХСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ КОЖНЫХ ПОКРОВОВ

Фетисова В.Э.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

В последние годы всё более актуальной становится проблема создания материалов для замещения кожных покровов. На данный момент часто используемым способом является замещение повреждённого участка кожи кожей человека или животного. Однако такой метод имеет недостатки, связанные с ограниченной доступностью пересадочного материала и низкой биологической совместимостью с организмом человека.

Альтернативой может служить создание материалов на основе биополимеров — таким образом будет достигнута достаточная биосовместимость с организмом человека, а также решена проблема доступности. Стоит отметить, что биополимеры животного происхождения способны переносить инфекции из организма животного в организм человека, а синтетические биополимеры не обладают достаточной биологической совместимостью. Таким образом становится очевидно, что использование биополимеров растительного происхождения было бы оптимально для данных целей. В данной работе в качестве биополимера растительного происхождения был использован альгинат натрия.

Известно, что кожный покров состоит из двух основных слоёв — эпидермиса и дермы. Тканевый эквивалент для эффективного лечения должен обладать свойствами обоих слоёв, что подразумевает двухслойность такого материала.

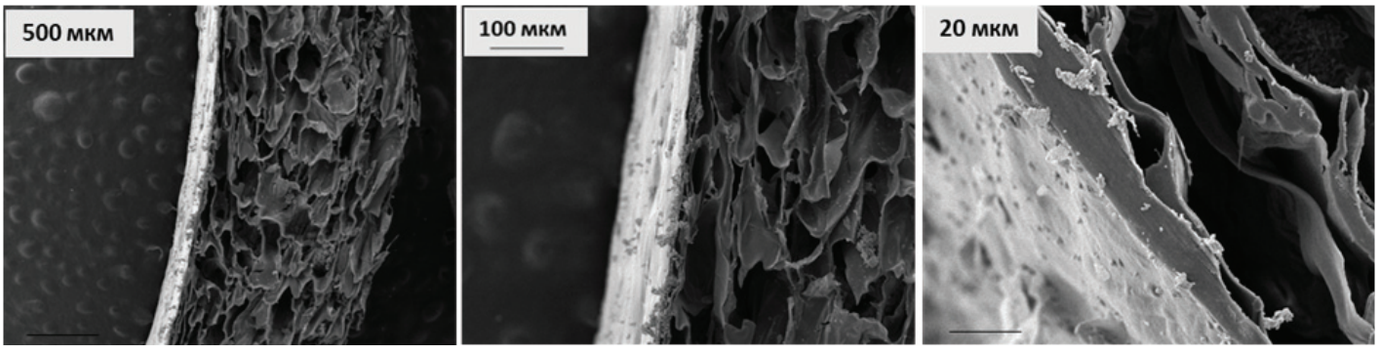


Рис. 1. Изображение среза двухслойного тканевого эквивалента на основе альгината натрия, полученного с помощью сканирующей электронной микроскопии.

Зачастую требуется функционализация материалов различными веществами: лекарственными препаратами, факторами роста и т.д. В данной работе были созданы тканевые эквиваленты с включением такого фактора роста как плазма крови (насыщенной и обеднённой тромбоцитами), а также изучена корреляция между её содержанием в материалах и их морфологией, микроструктурой, кинетикой деградации и биологическими свойствами.

МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ БИОЛОГО-ХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Филатова Е.В., Лобанов А.В.

Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия

В настоящее время как один из эффективных методов лечения онкологических заболеваний используют фотодинамическую терапию (ФДТ). Данный метод включает в себя два компонента, а именно лекарственный препарат — фотосенсибилизатор и свет. Механизм ФДТ можно представить следующим образом. Введенный в организм фотосенсибилизатор фиксируется на мембранах патологических клеток. Происходит лазерное облучение длиной волны, близкой к максимуму поглощения фотосенсибилизатора. В результате образуются активные формы кислорода, в том числе синглетный кислород ($^1O_2$). Они оказывают цитотоксическое действие на опухолевые клетки, приводящее к разрушению опухоли.

Наиболее эффективными фотосенсибилизаторами для ФДТ считают фталоцианины. Чтобы повысить их фотодинамическую активность, в макроцикл вводят металлы (Al, Zn). Определенные трудности вызывает высокая гидрофобность фталоцианинов, поэтому необходимо увеличить их растворимость. Для этого их металлокомплексы сульфируют.

Популярным представителем соединений такого рода является препарат Фотосенс, который состоит из смеси натриевых солей ди-, три- и тетрасульфозамещенных фталоцианина гидроксиалюминия.

Среди показаний для ФДТ с применением этого препарата выделяют злокачественные новообразования гинекологического профиля, желудочно-кишечного тракта, головного мозга, легких, мочевого пузыря, а также онкопатологий кожи и слизистых.

В силу продолжительного сохранения в опухолевой ткани, препарат позволяет проводить повторные сеансы облучения светом.

Таким образом, междисциплинарный подход, основанный на сочетании химии и биологии, позволяет комплексно подойти к проблеме оптимизации действия медицинских препаратов, учитывая взаимосвязь структура-свойство.

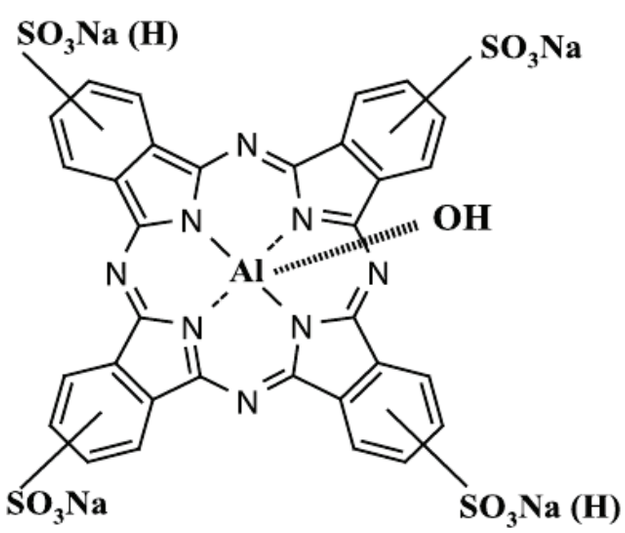


Рис. 1. Производное фталоцианина — сульфозамещенный фталоцианин алюминия (Фотосенс).

ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ТРОЙНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ С АМОРФНЫМ ГИДРОФОБНЫМ БЛОКОМ P(D,L)LA-PEG-P(D,L)LA

Фомина Ю.С.[1], Загоскин Ю.Д.[2], Григорьев Т.Е.[2], Чвалун С.Н.[2]

[1]*ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д.И. Менделеева»*
[2]*ФГБУ НИЦ «Курчатовский институт»*

В настоящее время биоразлагаемые амфифильные блок-сополимеры лактида и полиэтиленгликоля представляют особый научный интерес в области доставки лекарственных препаратов и тканевой инженерии благодаря своей способности к самоорганизации с образованием гидрогелей (рис. 1). из-за способности удерживать большое количество воды или биологических жидкостей такие материалы являются проницаемыми для метаболитов, что обуславливает их биосовместимость и возможность применения в медицинской области. Кроме этого, Рассматриваемые гидрогели не вызывают иммунный ответ. Однако при всех описанных плюсах есть и существенный недостаток — модули упругости таких систем в большинстве научных трудов невысокие, следовательно, их широкое применение в биомедицине затруднено, т.к. имплантируемый материал по своим прочностным характеристикам должен соответствовать нативным тканям.

Таким образом, разработка материалов биомедицинского назначения на основе гидрогелей, обладающих физико-механическими характеристиками живых тканей, а также исследование связи структуры и свойств в зависимости от способа получения является актуальной научной задачей.

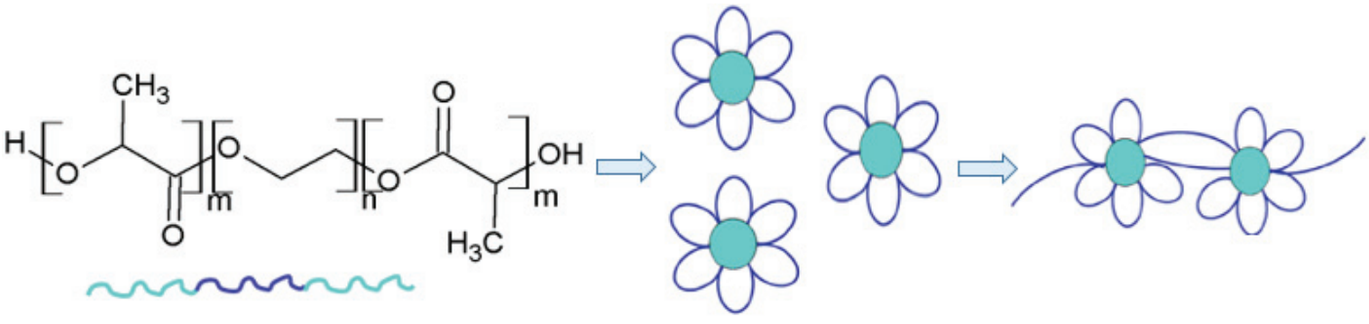


Рис. 1. Схема процесса самоорганизации тройного блок-сополимера PLA-PEG-PLA.

В работе была синтезирована серия тройных блок-сополимеров с соотношением гидрофобного/гидрофильного блоков (1,54; 1,11; 0,54). Синтез проводили в расплаве, в качестве катализатора использовали 2-этилгексаноат олова (II). Из синтезированных сополимеров методами замены растворителя были получены гидрогелевые материалы. Основным различием методик было изменение кинетики процесса обмена растворителей.

Для исследования надмолекулярной структуры гидрогелей проводили эксперименты по рассеянию рентгеновского излучения в больших и малых углах с использованием Курчатовского источника синхротронного излучения «Курчатов» (НИЦ «Курчатовский институт», Россия).

На всех зависимостях в области малых углов наблюдались Брэгговские рефлексы высокой интенсивности, по положению максимума которых были рассчитаны межплоскостные расстояния полимерной матрицы. Было выявлено, что с уменьшением длины гидрофобного блока величина межплоскостного расстояния уменьшалась. Также было отмечено, что величина межплоскостного расстояния коррелирует с методикой получения гидрогелей, т.е. зависит от скорости замены растворителя, т.к. кинетика процесса влияет на упаковку полимерных цепей.

Чем медленнее происходит замена растворителя, тем меньше межплоскостное расстояния.

Для исследования механических характеристик гидрогелей были проведены испытания на одноосное сжатие. Модули упругости некоторых образцов превысили значения в 100 кПа о чем ранее не сообщалось для подобных систем с аморфным гидрофобным блоком.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения № 075-15-2021-1357.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И БИОСОВМЕСТИМОСТЬ ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ

Фомичёв И.А.[1,2], Винник Д.А.[1,3], Давыдова Г.А.[1]

[1]Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Московская область, Российская Федерация

[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова биотехнологический факультет, Москва, Российская Федерация

[3]Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева биологический факультет, Самара, Российская Федерация

Совместное применение в одной композиции различных типов полисахаридов позволяет синергетически воздействовать на разные системы регенерации, поскольку разные типы полисахаридов обладают разной биологической активностью. Поэтому необходимо подобрать состав смеси таким образом, чтобы смесь формировала в растворе наномицеллы. Целью данной работы является разработка композитных гелей на основе растительных полисахаридов и исследование их физико-химических свойств и биосовместимости.

Для исследования взаимодействия альгината натрия (А) с другими полисахаридами, такими как метилцеллюлоза (М), каррагинан (К), гуаровая (Г) и ксантановая (КК) камеди, готовили смеси с различным объемным соотношением компонентов. При этом суммарная концентрация смешанного раствора по полимеру оставалась равной 2 масс. %: 0/100, 10/90, 20/80, 30/70, 40/60, 50/50, 60/40, 70/30, 80/20, 90/10 и 100/0.

Были исследованы реологические характеристики комплексов и их pH. О совместимости водных растворов полисахаридов можно судить по степени отклонения экспериментальной зависимости «вязкость — состав» от теоретической, где вязкость смеси является аддитивной величиной. При этом принято считать, что условию аддитивности отвечает прямая, соединяющая на диаграмме ординаты, отвечающие величинам вязкости растворов чистых компонентов смеси. Наибольшая совместимость получена для смесей (А)/(М), для которых в значительном диапазоне составов наблюдается положительное отклонение вязкости от аддитивных величин. Этот факт может свидетельствовать в пользу образования лабильных гетероагрегатов. Для растворов (А)/(Г) и (А)/(К) получено отрицательное отклонение значений вязкости от аддитивных величин, что свидетельствует об ограниченной совместимости этих полимеров в водном растворе. Это, по-видимому, связано с электронейтральностью гуаровой камеди и присутствием крупных заместителей в случае каррагинана. Для растворов (А)/(КК) в диапазоне составов 10/90, 20/80, 30/70 и 40/60 наблюдается наибольшее положительное отклонение вязкости от аддитивных величин и говорит о взаимодействии этих полисахаридов посредством водородных связей, что подтверждается литературными источниками. У полученных бинарных растворов (А) измерены значения pH, находящиеся в диапазоне 6,5–6,9. Цитотоксическую активность полученных бинарных соединений альгината натрия изучали методом МТТ на кератиноцитах линии HaCat. Все гели не оказывают угнетающего воздействия на клетки. Также адгезия клеток увеличивается в точках взаимодействия полисахаридов.

Дальнейшие исследования будут направлены на выбор оптимальных соотношений полисахаридов для создания материалов для применения в медицине.

ЛОКАЛЬНАЯ БИСТАБИЛЬНОСТЬ И СИНХРОНИЗАЦИЯ В МОДУЛЬНЫХ СЕТЯХ

Фролкина М.А.[1], Аветисов В.А.[1]

[1]ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук

Модели распространения возбуждения в сложных сетях в настоящее время активно применяются для моделирования коллективных динамических явлений в сложных системах различной природы, таких как биологические системы, мозг, эпидемии, социальные сообщества и даже лингвистика.

Богатство динамических режимов, демонстрируемых распространением активности в сетях, обусловлены критичностью, присущей самому типу модели. Действительно, распространение активности в сети, независимо от того, что именно означают узлы и их возбуждение, можно рассматривать как процесс горения, характеризуемый порогом зажигания, близи которого возникает особая бистабильная динамика. Она проявляется в спонтанных вибрациях активности системы между низкоактивированным и высокоактивированным состояниями. В свою очередь, спонтанные вибрации могут быть преобразованы в регулярные колебания между двумя состояниями путем приложения слабой периодической силы, которая слегка подталкивает систему к тому или иному состоянию. Этот динамический режим называется стохастическим резонансом.

Но наибольший интерес для нас представляет явление локальной бистабильности, т.е. бистабильности, локализованной в части сети. Рассмотрение сети как системы бистабильных единиц представляет несомненный интерес, поскольку связанные бистабильные системы могут самопроизвольно синхронизировать свои спонтанные вибрации.

В многомодульных сетях возможно появление мультимодальной синхронизации. Если связь между бистабильными единицами достаточно сильна, возникает глобальная синхронизация, связанная с бистабильной динамикой всей сети. При промежуточной связи локализованные возбуждения могут демонстрировать мультимодальную синхронизацию бистабильных субъединиц разного масштаба. Многие сложные системы обычно характеризуются многомасштабной структурной и функциональной организацией, например, модель нейронной сети мозга.

Используя компьютерное моделирование, мы демонстрируем, что модульные сети могут быть применены для моделирования локальной бистабильности и синхронизации. Самым простым примером таких сетей является гантелеобразная сеть, состоящей из двух модулей, соединенных меньшим кластером, играющим роль узкого места для передачи возбуждений от одного модуля к другому. Моделируя распространение активности в такой сети вблизи порога зажигания, мы показываем, что активность каждого модуля самопроизвольно колеблется между высокоактивированным и низкоактивированным состояниями, то есть возникают спонтанные вибрации уровней активности и отдельные модули ведут себя как бистабильные субъединицы. Более того, спонтанные вибрации этих двух локально бистабильных субъединиц синхронизированы, поэтому вся сеть ведет себя как бистабильная единица. Стохастический резонанс в двухмодульной сети дополняет этот случай.

Затем мы исследовали локальную бистабильность и эффекты синхронизации в трехмодульной сети звездообразной топологии, ожидая, что такая сеть может вести себя как система из трех связанных бистабильных единиц. Действительно, трехмодульная сеть демонстрирует глобальную и многомодовую синхронизацию.

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ СМЕШАННЫХ ЧЕРВЕОБРАЗНЫХ МИЦЕЛЛ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Хао У., Молчанов В.С., Филиппова О.Е.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Цвиттерионные поверхностно-активные вещества (ПАВ) в водном растворе могут агрегировать друг с другом с образованием длинных червеобразных мицелл. Эти мицеллы переплетаются друг с другом, образуя сетчатую структуру, которая может придавать вязкоупругие свойства растворам. Несмотря на то, что в целом ПАВ заряжен нейтрально, существует электростатическое взаимодействие между гидрофильными группами, что сильно отличает их от неионных ПАВ. Когда в раствор добавляют вспомогательное ПАВ, его молекулы будут встраиваться в мицеллы, меняя их длину и форму, что приведет к изменению реологических свойств раствора. Большая часть исследований посвящена влиянию анионного вспомогательного ПАВ, которое приводит к объединению мицелл в более длинные за счет экранирования диполь-дипольного отталкивания между головками цвиттерионного ПАВ. В нашей работе изучено влияние вспомогательного ПАВ, имеющего положительный или нейтральный заряд.

Растворы смешанных мицелл ПАВ были изучены при разной общей концентрации и заряде вспомогательного ПАВ. В качестве ПАВв использовали олеил амидопропилдиметилбетаин и олеил амидопропилдиметиламин. Данное исследование сосредоточено на влиянии заряда вспомогательного ПАВ на реологические свойства цвиттериионного ПАВ.

Показано, что в случае катионного со-ПАВ, их головные группы и группы цвиттерионных ПАВ отталкивают друг друга, что способствует уменьшению длины мицелл. Обнаружено, что электростатическое взаимодействие может быть экранировано ионами соли. В случае неионного со-ПАВ отталкивание головных групп отсутствует. Показано, что образование сетки переплетенных мицелл при этих условиях происходит при меньших концентрациях, что объясняется увеличением длины мицелл. При этом эффект заряда со-ПАВ уменьшается по мере возрастания концентрации ПАВ, так как растет число противоионов.

В результате выполнения работы обнаружены закономерности изменения реологических свойства растворов червеобразных мицелл цвиттерионного ПАВ и со-ПАВ при разном заряде и ионной силе. Показана роль концентрации ПАВ и заряда со-ПАВ на реологические свойства растворов смешанных мицелл.

ТРЕХМЕРНАЯ КРИОПЕЧАТЬ ГЕН-АКТИВИРОВАННЫХ МАТРИКСОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ КОСТНОЙ ТКАНИ

Хворостина М.А.[1,2]**,** Бухарова Т.Б.[2], Попов В.К.[1]

[1]*ИФТ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*Медико-генетический научный центр им. академика Н.П. Бочкова*

Эффективная и полноценная регенерация костных тканей с целью замещения дефектов критических размеров, возникающих в результате травм и заболеваний различной этиологии, является серьезной биомедицинской проблемой, требующей разработки и применения самых передовых биоактивных материалов и технологий. Костный морфогенетический белок 2 (BMP-2) является одним из сильнейших остеоиндуктивных факторов,

играющих важную роль в формировании и развитии костей и хрящей в организме человека и животных. Генная терапия предлагает эффективный подход к доставке этого белка в соответствующие ткани с использованием плазмидных ДНК, несущих ген *BMP-2*. Для обеспечения локализованного и пролонгированного высвобождения таких ДНК в зоне костного дефекта в качестве их носителей сегодня широко используются резорбируемые биополимеры, такие как хитозан, желатин или альгинат натрия.

Целью настоящей работы является разработка ген-активированных альгинатных матриксов, сформированных методом трехмерной (3D) криопечати, а также их исследование на модели критического костного дефекта теменных костей крыс (Рис. 1).

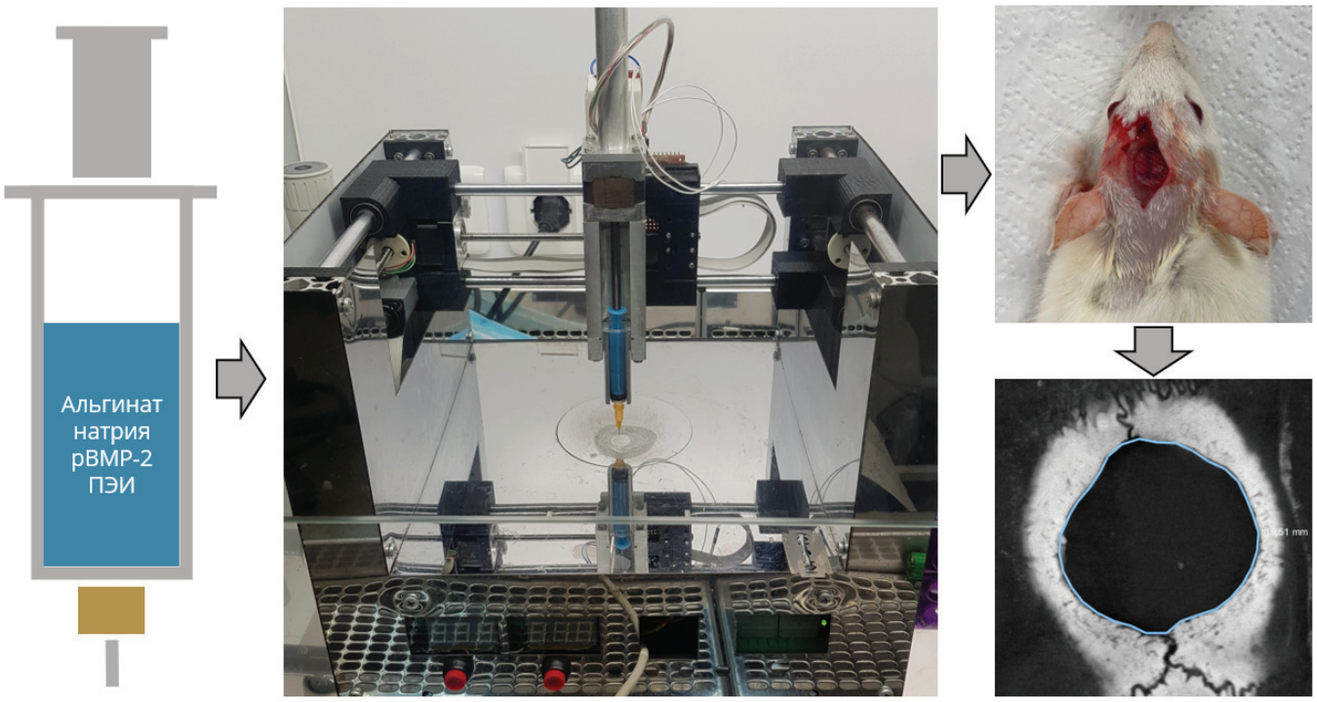


Рис. 1. Этапы разработки и исследования биоактивных матричных структур на основе альгината натрия.

С помощью рентгеновской томографии высокого разрешения (микро-КТ) показано, что через 8 недель после внутрикостной имплантации биоактивных альгинатных матриксов объем новообразованной костной ткани увеличился в 3 раза по сравнению с контрольной группой (42% и 15%, соответственно). Таким образом, разработанные ген-активированные матриксы на основе альгината натрия являются перспективными материалами для их применения в регенеративной медицине.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части разработки процесса 3D криопечати гидрогелевых матриксов, работ по Государственному заданию ФГБНУ «МГНЦ» в части получения и характеристики плазмид и РФФИ (проект № 18-29-11081_мк) в части изготовления и исследования композиций на основе альгината натрия и плазмидных ДНК.

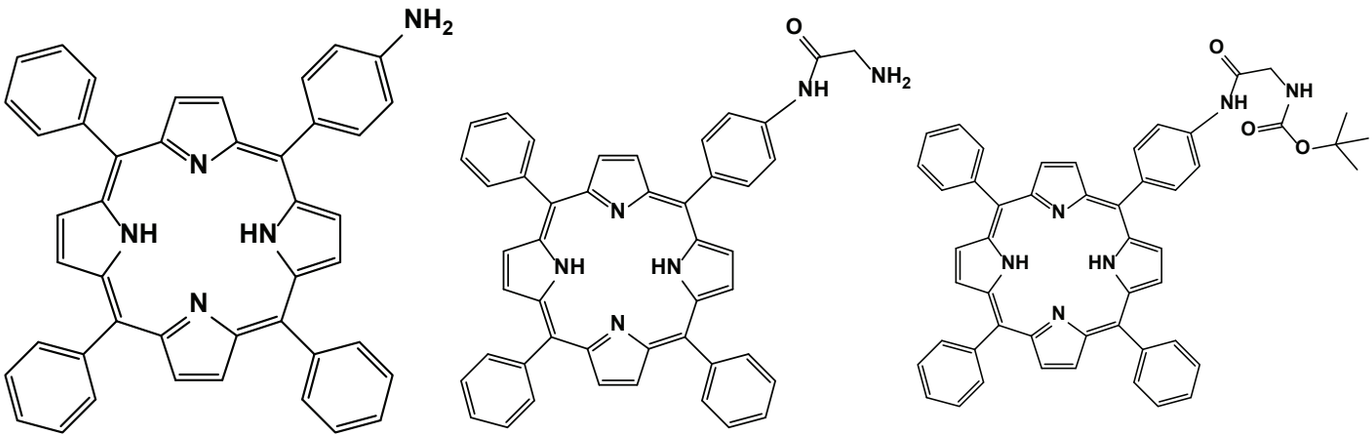
СПЕКТРАЛЬНЫЕ, КООРДИНАЦИОННЫЕ И ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НЕСИММЕТРИЧНО-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТЕРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ

Хрушкова Ю.В.[1], Шорохова Т.В.[1], Иванова Ю.Б.[2], Пуховская С.Г.[1], Плотникова А.О.[1], Сырбу С.А.[2]

[1]*Ивановский Государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*
[2]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*

Синтетические порфирины являются перспективными исходными соединениями для получения биологически активных веществ, а ряд представителей имеет перспективы применения в медицине в качестве фотосенсибилизаторов и антимикробных препаратов. Введение биомолекул в качестве заместителей в макрогетероцикл, в том числе аминокислот, наделяет целевые молекулы рядом уникальных фотофизических и биохимических свойств. Молекулы такого типа могут участвовать в формирование различных мостиковых структур и эффективно участвовать в инактивации вируса, что особенно востребовано в период эпидемией.

Изучено влияние аминогрупп на спектральные, координационные и флуоресцентных свойства несимметрично-замещённых производных 5,10,15,20-тетрафенилпорфирина (рис. 1.): 5-(4'-амино-фенил)-10,15,20-трифенилпорфина, 5-(4'-глицинациламино-фенил)-10,15,20-трифенил-порфина и 5-(4'-N-третбутокси-карбонил-глицинаминофенил)-10,15,20-трифенил-порфина в ацетонитриле, определены кинетические параметры реакций образования их цинковых комплексов.



H_2P1: 5-(4'-амино-фенил)-10,15,20-трифенил-порфин

H_2P2: 5-(4'-глицинациламино-фенил)-10,15,20-трифенил-порфин

H_2P3: 5-(4'-N-третбутокси-карбонил-глицинаминофенил)-10,15,20-трифенилпорфин

Рис. 1. Структуры исследуемых соединений.

Исследование показало, что изменение констант скорости реакций координации ацетатом цинка изученных лигандов зависит от их устойчивости в реакционной среде. Получили, что дважды протонированные формы лигандов имели более высокие квантовые выходы, чем монопротонированные, что вероятно связано с перераспределением электронной плотности в тетрапиррольных макроциклах, контролируемое индуктивными эффектами.

Работа выполнена с привлечением оборудования центра коллективного пользования «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований» Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ НА КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕЕ МЕТАБОЛИТА МЕТОДОМ ВЭЖХ-МС/МС

Церковная К.М.[1], Флисюк Е.В.[1], Шабров В.Н.[2]

[1]*ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Минздрава России, Санкт-Петербург, Россия*

[2]*ООО «Квинта-Аналитика Ярославль», Ярославль, Россия*

В современной кардиологической практике широко применяется ацетилсалициловая кислота (ASA) для профилактики тромбообразования и осложнений ишемической болезни сердца. В соответствии с требованиями FDA, при проведении фармакокинетических исследований препаратов ASA, необходимо определять не только нативное соединение, но и метаболит — салициловую кислоту (SA). На количественное определение аналитов, содержащихся в биологической матрице, большое влияние могут оказывать компоненты матрицы. В связи с этим, при разработке и валидации аналитической методики количественного определения ASA и SA в плазме крови человека методом ВЭЖХ-МС/МС важно установить воздействие компонентов плазмы, содержащихся в измеряемых образцах, на отклики аналитов и их внутренних стандартов (ВС).

Исследование проводилось на системе ВЭЖХ-МС/МС с трехквадрупольным масс-спектрометрическим детектором TSQ Quantum Ultra (Thermo Scientific). Приготовление образцов для анализа осуществлялось путем добавления к плазме крови человека растворов стандартных образцов ASA, SA и растворов внутренних стандартов — дейтерированной ацетилсалициловой кислоты-d4 (dASA) и дейтерированной салициловой кислоты-d6 (dSA). Для пробоподготовки использовался метод жидкость-жидкостной экстракции этилацетатом с последующим упариванием в токе азота. Расчет концентрации ASA и SA осуществляли по линейной калибровочной кривой, в пределах диапазона для ASA (0,020 — 1,200 мкг/мл), для SA (0,200 — 12,000 мкг/мл).

Оценка матричного эффекта проводилась на нижнем (L) и верхнем (H) уровнях концентрации в плазме: 0,060 мкг/мл и 0,960 мкг/мл — для ASA; 0,600 мкг/мл и 9,600 мкг/мл — для SA, соответственно. Значения матричного фактора (MF) для ASA и dASA меньше единицы, что указывает на подавление ионизации аналита компонентами матрицы. При оценке влияния MF на ионизацию SA и dSA отмечена тенденция близости значения к единице, что говорит о меньшем подавлении ионизации, чем в случае ASA. Кроме того, на нижнем уровне концентрации наблюдается небольшое улучшение ионизации SA. Согласно требованиям, установленным Решением Совета ЕврАзЭС № 85, нормализованный матричный фактор (NMF) не должен отличаться от единицы более чем на 15 %, коэффициент вариации (CV) для NMF не может быть больше 15 %. Результаты теста удовлетворяют критериям приемлемости и представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты валидационного теста «Матричный эффект»

Показатель / Уровень концентрации	MF ASA	MF dASA	NMF	CV NMF (%)	MF SA	MF dSA	NMF	CV NMF (%)
Нижний (L)	0,748	0,655	1,142	4,76	1,058	0,920	1,150	3,57
Верхний (H)	0,781	0,699	1,117	5,53	0,891	0,799	1,115	8,96

Разработанная аналитическая методика количественного определения ASA и SA в плазме крови человека методом ВЭЖХ-МС/МС является валидной по показателю «Матричный эффект».

ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В АМОРФНОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

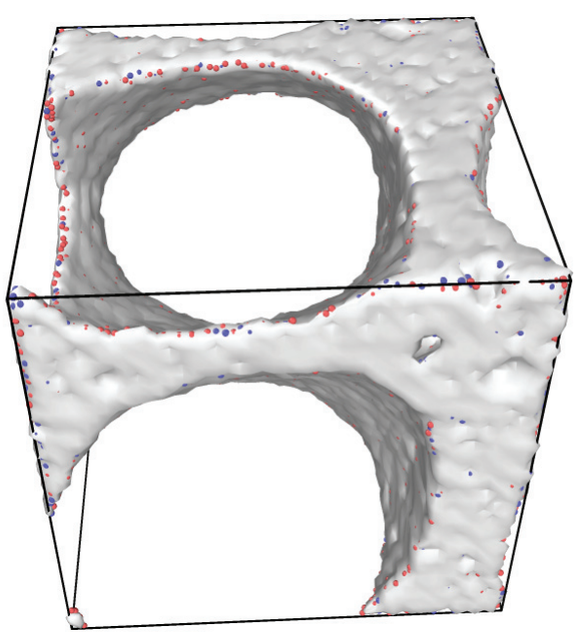
Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Пористые материалы являются перспективным направлением развития вследствие большого количества возможных приложений: костные имплантаты, гасители ударных воздействий, катализаторы, ячейки хранения водородного топлива, датчики дыма.

Одним из ключевых факторов, влияющих на конечные характеристики материала, является его пористость. Не менее важным является тип получаемых пор, например, наличие открытых или закрытых пор, а также структура твердой матрицы, которая может быть кристаллической или аморфной.

В настоящей работе демонстрируется возможность синтеза аморфного пористого нитинола с помощью методов молекулярной динамики.



Синтез пористого нитинола производится добавлением аргона в качестве порообразователя. Обнаруживается, что характер зависимости пористости нитинола от концентрации газа при различных температурах нагревания слабо изменяется, при этом максимальная пористость составляет 50 процентов. В отдельных случаях пористость может достигать 70 процентов. При таких больших значениях пористости поры являются открытыми.

Полученные результаты указывают на возможность экспериментального синтеза аморфного пористого нитинола. Результаты работы могут быть использованы применительно к улучшению существующих технологий, требующих долговечности и прочности пористых материалов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

Рис. 1. Образец пористого нитинола. Пористость равна 50 процентам. Красные и синие точки — атомы никеля и титана соответственно. Серым обозначена поверхность материала.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПОРОПОЛЛЕНИНА ПЫЛЬЦЫ *CORYLUS AVELLANA* L., КАК ПЕРСПЕКТИВНОГО НАНОМАТЕРИАЛА

Чернышов М.П.[1], Мелихова Д.О.[2], Алексеев В.И.[1], Черняк Д.М.[3], Мамед-Набизаде В.В.[2], Майборода А.Д.[1], Сивачев А.А.[3], Волков П.В.[2], Полевова С.В.[1], Брейгина М.А.[1]

[1]*МГУ им. М.В. Ломоносова, биологический факультет.*
[2]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*
[3]*МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет.*

Спорополленин (СП) — небелковый полимер, образующий внешний, наиболее массивный, слой оболочки пыльцевых зёрен и спор высших растений. Это малоизученное вещество органической природы, для которого неизвестны достоверно точная химическая формула, а также особенности пространственной организации. Тем не менее СП обладает рядом уникальных свойств, которые открывают широкий спектр возможностей его применения. Главное из них — устойчивость к химическим и механическим воздействиям, что, в частности, позволяет пыльце сохраняться в ископаемом состоянии.

В работе была выдвинута и проверена гипотеза, что изначальная механическая и химическая устойчивость СП со временем может возрастать. Это свойство биополимера может быть использовано при разработке функциональных материалов, в том числе для использования в биоинженерии костной и дентальной тканей, при консервации, а также для создания стойких поверхностей, которые можно использовать, в том числе, в аналитической химии.

Для проверки выдвинутой нами гипотезы использовалась пыльца растений *Corylus avellana* L., предварительно инкубированная в течение года при температуре 60°C в термостате. Для сравнения использовалась “свежая” и замороженная пыльца *Nicotiana tabacum* L. Затем были исследованы механические свойства образцов: свежую и подготовленную пыльцу измельчали одинаковым способом, в том числе после предварительной заморозки в жидком азоте. Также проверялась возможность ферментативной изоляции протопласта с использованием комплекса литических ферментов (целлюлазы и пектиназы Aspergillus niger Tiegh.) в MES-NaOH буфере (pH 7.8) в совокупности с лаурилсульфатом натрия (SDS) и устойчивость СП к воздействию различных растворителей. Полученные образцы были охарактеризованы с помощью световой и сканирующей электронной микроскопии.

Выдержанная в термостате пыльца оказалась устойчивой к данным механическим и химическим воздействиям, что доказывает предположение о значительном изменении свойств СП с течением времени.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ВИНИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ В ПРИСУТСТВИИ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Чувашкин С.И.[1], Романенко Г.А.[1], Кошелев А.Д.[3], Гомзяк В.И.[1,2]

[1]*МИРЭА — Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Москва 119571, Россия*
[2]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва 123182, Россия*
[3]*Технический университет Дармштадта, Дармштадт 64277, Германия*

Актуальным направлением в области химии высокомолекулярных соединений является синтез полимерных суспензий с узким распределением частиц по размерам, которые широко используются для создания диагностических тест-систем и матриц для выращивания клеток. К полимерным суспензиям, используемым в биотехнологии и медицине, сформулированы следующие основные требования: устойчивость полимерных суспензий в процессе синтеза, узкое распределение частиц по размерам, наличие функциональных групп на поверхности микросфер, способных ковалентно связываться с функциональными группами биолиганда, устойчивость при хранении в широком интервале pH.

В последние годы заметно возрос интерес к использованию в качестве стабилизаторов полимерных суспензий биоразлагаемых поверхностно-активных веществ (ПАВ). К числу таких соединений могут быть отнесены блок-сополимеры линейного и сверхразветвленного строения, полученные на основе алифатических полиэфиров, гидрофобные блоки которых представлены α-гидроксикислотами (молочной, гликолевой и др.), а гидрофильные — полиэтиленоксидом или полиглицерином. Варьируя в процессе синтеза топологию макромолекул, а также соотношения между гидрофобными и гидрофильными блоками, появляется возможность варьирования их гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) и скорости биоразложения в широком диапазоне. Область применения таких соединений, в первую очередь, – наноразмерные системы доставки лекарственных веществ. Исследование коллоидно-химических свойств и возможности использования биоразлагаемых полиэфиров линейного и сверхразветвленного строения в качестве новых типов экологически безопасных ПАВ представляет самостоятельный интерес.

В ряде работ показаны преимущества высокомолекулярных сверхразветвленных ПАВ по сравнению с линейными аналогами, однако систематические исследования взаимосвязи структуры амфифильных сверхразветвленных ПАВ с их поверхностной активностью отсутствуют. В настоящей работе представлены данные по исследованию коллоидно-химических свойств сверхразветвленного полиэфирполиола 2,2-бис(метилол)пропионовой кислоты (торговое название — полиэфир *Boltorn*) и изучены кинетические закономерности полимеризации виниловых мономеров в присутствии полиэфира *Boltorn* в качестве ПАВ. Работа выполнена при поддержке гранта МК-70.2021.1.3.

ТЕОРЕМА ВЗАИМНОСТИ ДЛЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ

Чудаков Е.А.

Могилевский государственный университет им. А.А. Кулешов, Могилев, Беларусь

Интерференционные покрытия, наносимые на плоскопараллельные пластины, востребованы при разработке различных фотоприемных устройств в солнечной энергетике, медицине и строительстве.

Путем анализа волновых уравнений для волн s- и p- поляризации доказана теорема, согласно которой энергетические коэффициенты отражения данных волн при прямом и обратном освещении светом не поглощающего интерференционного покрытия совпадают. Аналогичное совпадение для энергетических коэффициентов прохождения света имеет место, только если покрытие окружено одинаковыми средами. Теорема использована для оптимизации антибликовых покрытий на стеклах с учетом поглощения света средами. Установлено, что использование симметричных двухсторонних интерференционных покрытий позволяет существенно снизить отражательную способность стекла в виде плоскопараллельной пластины для частично когерентного света в широком диапазоне углов его падения на пластину по сравнению со случаем односторонних покрытий.

Минимизация целевой функции *R*, равной интегральной отражательной способности пластины с двухсторонними симметричными интерференционными покрытиями, усредненной по диапазону длин волн $\lambda_{min} \le \lambda \le \lambda_{max}$ и углов падения $0 \le \theta \le \theta_{max}$ осуществлена градиентным методом. Вычисления выполнены пластины поликарбоната (PC) миллиметровой толщины с интерференционными покрытиями в виде чередующихся слоев ZrO_2, и SiO_2 для диапазонов $\lambda_{max} - \lambda_{min} = 100$ нм и $\theta_{max} = 50^0$. Некоторые результаты представлены в таблице.

Таблица 1. Минимумы целевой функции <*R*> для различных структур двухстороннего антибликового покрытия толщин $D = \sum_{k=1}^{L} d_k$ содержащего *L* слоев, нанесенного на PC пластину толщиной 3 мм.

Структура	L	D, нм	<R>min
air / … / SiO_2/ZrO_2/SiO_2/PC/ SiO_2/ ZrO_2/ SiO_2/…/air	0	0	0.105
	1	296.6	0.0554
	2	296.4	0.0537
	3	371.8	0.00955
	4	368.9	0.00951
	8	639.2	0.0095

Сравнение характеристик двухсторонних и односторонних интерференционных покрытий с табличной структурой показало, что они имеют практически одинаковую оптимальную структуру слоев, но двухсторонние покрытия имеют на порядок более низкую отражательную способность, что объясняется теоремой взаимности.

Работа выполнена в рамках Государственной программы науч-ных исследований РБ «1.15 Фотоника и электроника для инноваций».

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ОРИЕНТАЦИИ ЗЁРЕН В МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ

Чуешова А.Г.[1], Пещерова С.М.[1], Осипова Е.А.[2], Аршинский В.Л.[2], Шишкин Д.В.[2], Кузнецов А.А.[2]

[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова, Россия, г. Иркутск a.chueshova@igc.irk.ru*

[2]*Иркутский Национальный Исследовательский Технический Университет, Россия, г. Иркутск*

Развитие методов экспериментального анализа свойств кристаллических материалов за последнее десятилетие обусловлено эффективным применением программных средств для обработки данных. Как следствие, появление огромного количества новой информации о структуре и свойствах материалов, требует новых подходов к её обобщению и

анализу, таких как Image Driven Machine Learning (IDML). Отработка методики цифрового материаловедения на примере однокомпонентного материала — мультикристаллического кремния, как наиболее оптимального с точки зрения кристаллографии объекта ввиду кубической сингонии, позволит обнаружить качественные и количественные взаимосвязи между его структурными и электрическими свойствами. В дальнейшем это станет основой для создания универсальных руководящих принципов получения высокопроизводительного материала для солнечной энергетики.

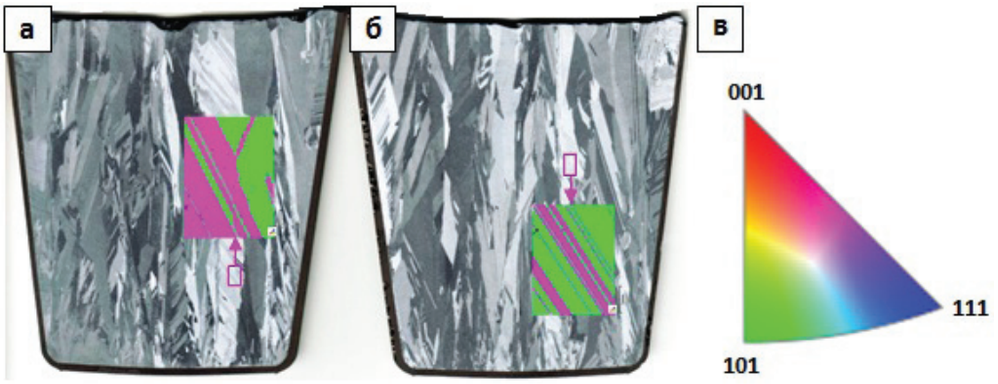


Рис. 1. а, б — сканированные изображения продольных пластин слитков мультикремния, выращенных при скоростях 21 и 3.3 мм/ч, соответственно; в — обратная полюсная фигура, цветовой ключ ориентаций

В данной работе обсуждается метод автоматизированного анализа сканированных изображений пластин мультикремния. Поскольку степень разориентации зёрен на текстурированной посредством щелочного травления (KOH, 20%) поверхности пластин мультикремния отображается выраженным контрастом оттенков серого цвета (Рис. 1, а, б), применены технологии компьютерного зрения для статистического анализа геометрических параметров зёрен в совокупности с выборочным ориентационным методом анализа дифракции обратно-рассеянных электронов (EBSD) на отдельных малых площадях анализируемой поверхности. Это позволило обучить свёрточную нейронную сеть для идентификации параметров ориентации зёрен по всей площади пластины мультикремния. Как видно на Рис. 1 (выделенные области), данный подход обеспечивает высокую точность воспроизведения и может быть применён для всех типов мультикремния.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ШИРОКОГО РЯДА БОРФТОРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДИПИРРИНА И АЗА-ДИПИРРИНА

Шагурин А.Ю., Иванова М.А., Погонин А.Е., Марфин Ю.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Борфторидные производные дипиррина, также известные как BODIPY, и родственные им борфторидные производные аза-дипиррина, Aza-BODIPY, являются одними из наиболее популярных семей флуоресцентных молекулярных красителей. Несмотря на то, что области их применения порой радикально отличаются, оба ряда соединений обладают определённым набором базовых фотофизических свойств: узкими, интенсивными пиками поглощения и испускания, низкой величиной Стоксового сдвига, высокой термо- и хемоинертностью, возможностью значительного изменения вышеупомянутых свойств путём введения различных заместителей в π-электронную систему дипиррина. Данный набор свойств делает BODIPY/Aza-BODIPY идеальными молекулами для in-vivo примения в качестве молекулярных флуоресцентных меток или сенсоров. Одним из ключевых параметров, влияющих на эффективность пободного использования красителей, является длина максимума возбуждения. Её смещение в зону терапевтического окна (700+ нм.) позволяет значительно увеличить яркость и контрастность маркировки за счёт снижения количества лазерного излучения, поглощённого тканями. Дизайн стабильных флуорофоров с длиноволновым поглощением до сих пор является открытой задачей. В данной работе мы рассмотрели возможность использования гетероциклического замещения для контроля длины волны максимума поглощения BODIPY, основываясь на предыдущих литературных данных.

Основной целью данной работы является сравнение вибрационно-разрешённых спектров поглощения и испускания ряда BODIPY и Aza-BODIPY производных. Данные спектры были получены в рамках VGFC модели с использованием DFT и TD-DFT. В качестве функционала был использован CAM-B3LYP, а базиса — 6-31G*. Все расчёты проводились с использованием CPCM модели растворителя с параметрами CH_2Cl_2. Для наиболее интересных молекул также были полученны вибрационно-разрешённые спектры поглощения, взвешенные с учётом конформационного ансамбля. Поиск конформеров проводился с использованием методинамических симуляций в программе CREST с полуэмпирическим GFN2-XTB потенциалом.

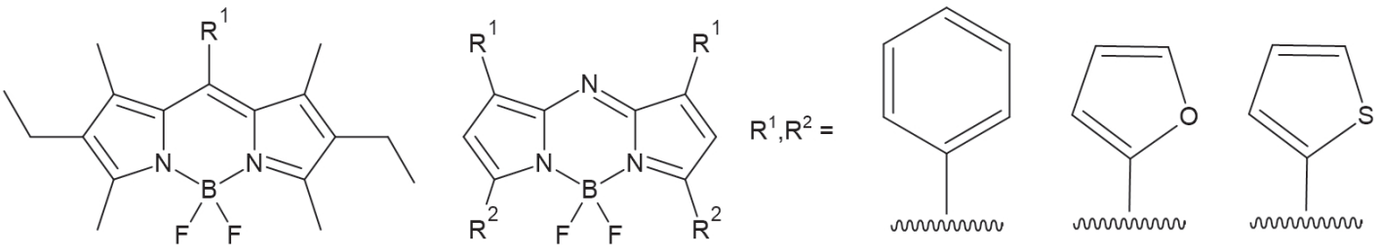


Рис. 1. Структурные формулы объектов исследования.

В результате исследования было показано, что теоретические вибрационно-разрешённые спектры хорошо воспроизводят особенности экспериментальных спектров поглощения и испускания и могут быть полезным инструментом дизайна сложных молекул на каркасе BODIPY. Можно отметить, что комплексы аза-дипиррина чувствительнее к замещению (более значительные изменения в форме и положении максимума вибронного спектра поглощения) и являются более перспективными NIR-красителями. Наиболее интересным является введение фуранильных фрагментомов. Так, дифуранилдитиофенил-замещённое производное, имеет максимум поглощения на 788 нм.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (грант №19-73-10107) за финансовую поддержку исследований.

МЕТОДИКА КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ ПРИ ПОМОЩИ ПРЯМОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРИСТЫХ ПРОБООТБОРНИКОВ

Шамарина Е.В.[1], Шамраева М.А.[1], Пеков С.И.[1,2], Попов И.А.[1]

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

[2]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

Методы масс-спектрометрии позволяют одновременно анализировать большое количество молекул различных классов, содержащихся в биологическом образце. Для использования в медицине хорошо подходят так называемые прямые методы ионизации при атмосферном давлении, позволяющие быстро анализировать биологический объект с минимальной пробоподготовкой. Один из распространенных методов прямой ионизации — Paper Spray Ionization (PS), имеет ряд недостатков, в целом, присущих всем подобным технологиям: присутствует влияние геометрии пробоотборника, толщины бумаги, поверхностных явлений и явлений в волокнах на эффективность ионизации. Т.о. задача по исследованию новых источников ионизации остается актуальной и сегодня.

В данной работе рассматриваются объемные пористые пробоотборники (PSP — Porous sampler probe) сферической и конической формы, и проводится их сравнение с существующими методами: PS и ESI (Electrospray ionization). Формирование электроспрея на изучаемых пробоотборниках осуществляется при подаче на них высокого напряжения в диапазоне от 2 до 10 кВ, в результате чего в градиенте электрического и гравитационного полей капельно добавляемый растворитель вытягивается с пробоотборника, приобретая конфигурацию конуса Тейлора. Для исследования характеристик спрея были получены вольтамперные характеристики для вышеперечисленных видов ионных источников в растворителях различного состава, состоящих преимущественно из смеси метанола и воды в соотношениях 1:1 и 9:1.

Для получения спектральной информации с помощью масс-спектрометра Thermo Orbitrap LTQ в режиме FTMS (масс-спектрометрии с преобразованием Фурье) детектирования положительных ионов были оптимизированы рабочие напряжения, расстояние от конца пористого пробоотборника до входного интерфейса в масс-спектрометр, а также объемы исследуемых веществ и растворителей. Для построения калибровочных кривых был использован метод внутреннего стандарта.

Использование пористого сферического пробоотборника имеет ряд преимуществ и перед коническим PSP, и перед методом PS: в первую очередь более широкий диапазон рабочих потенциалов позволяет упростить процедуру оптимизации метода и исследовать различные вещества. Была подтверждена возможность детектирования различных биомолекул (папаверин, ацетаминофен, кофеин) установкой с пористым пробоотборником в качестве ионного источника с подтверждением строения исследуемых веществ при помощи тандемной масс-спектрометрии; построены калибровочные кривые, определены аналитические характеристики метода: пределы детектирования (LOD) и обнаружения (LOQ), коэффициенты детерминации. Пределы обнаружения исследованных лекарственных препаратов лежат в терапевтическом диапазоне концентраций или ниже, что делает метод

перспективным для применения в клинической диагностике. Исследованный метод масс-спектрометрического профилирования представляет собой удобный и быстрый способ прямого анализа с минимальной предварительной обработкой образцов, посредством которого возможно напрямую обнаруживать различные типы соединений в короткое общее время анализа (менее 2 мин) с использованием небольшого объема (4 мкл) анализируемого вещества.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и МНТ в рамках научного проекта №19-52-52019

КУМУЛЯТИВНОЕ ВЛИЯНИЕ КАТИОНИЗАЦИИ В СОЧЕТАНИИ С СУБЛИМАЦИЕЙ/ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ MALDI МАТРИЦЫ ПРИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЛИПИДОВ

Шамраева М.А.[1], Пеков С.И.[2], Елиферов В.А.[1], Даничкина К.В.[1], Силкин С.В.[1], Бочаров К.В.[2], Попов И.А.[1]

[1]Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), 141701, Московская область, Долгопрудный, Институтский пер., д. 9
[2]Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования "Сколковский институт науки и технологий", 121205, Москва, Территория инновационного центра "Сколково", Большой бульвар, 30, стр. 1
[3]Обособленное структурное подразделение ИНЭПХФ им. В.Л. Тальрозе, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, 19991, г. Москва, ул. Косыгина, 4

Матрично-активированная *лазерная десорбция*/ионизация, МАЛДИ — это эффективный способ визуализации широкого класса биомолекул. Этапы пробоподготовки, в том числе способ нанесения матрицы МАЛДИ, существенно влияют на ряд аналитических характеристик. Более того, масс-спектрометрическое профилирование липидов тканей может искажаться вследствие ионизации липидов в их различных щелочных формах. Катионизация может обеспечить ряд преимущества для исследования вклада щелочных и нейтральных форм липидов: эфиров холестерина, ди- и триацилглицеридов, фосфатидилхолинов, сфингомиелинов и лизофосфатидилхолинов. Однако высокие концентрации катионизирующих агентов могут быть причиной слишком быстрой кристаллизации матрицы, ведущей к образованию крупных кристаллов, особенно в белом веществе головного мозга. В данной работе предлагается метод допирования в сочетании с нанесением матрицы посредством сублимации и последующим шагом перекристаллизации, повышающими воспроизводимость, чувствительность и пространственное разрешение по сравнению с традиционным методами нанесения матрицы. Проведена оптимизация допирования в отношении исследования подходящей ионной силы растворов солей и сублимации матриц в сочетании с шагом перекристаллизацией в отношении выбора соответствующего растворителя, температуры и времени перекристаллизации, необходимых для лучшей визуализации липидов. Для методов, включающих допирование солями с последующей сублимацией и перекристаллизацией, обнаружено большее количество пиков с более высокими интенсивностью сигнала и отношением сигнал/шум. Оценку аналитической воспроизводимости изображений липидов оценивали для обоих методов без стадии перекристаллизации и с ней. Для второго показана лучшая воспроизводимость. Полученные результаты позволяют предположить, что допирование солями в сочетании с этапами сублимации и перекристаллизации может обеспечить масс-спектрометрическую визуализацию липидов различных классов с хорошей воспроизводимостью и высокой чувствительностью.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования (соглашение № 075-00337-20-02, проект № 0714-2020-0006), с использованием оборудования ЦКП ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОНОПРОВОДЯЩИХ ИОНОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ: ИОННАЯ ЖИДКОСТЬ/ГЛИНА/МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ ЦЕЛЛЮЛОЗА

Шибаева В.Д., Агафонов А.В.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук

В последние годы в центре внимания исследователей находится разработка нового класса квазитвердых гибридных материалов, содержащих иммобилизованные ионные жидкости (ИЖ) — ионогели. Область применения таких нанокомпозитов достаточно широка и растет с каждым днем, но ключевой остается электроэнергетика. Ионогели являются перспективными материалами для получения новых видов электрохимических устройств, преобразователей энергии, гибких экранов и сенсоров, так как сочетают уникальные свойства ионных жидкостей, такие как высокая химическая и электрохимическая стабильность, низкое давление пара и высокая проводимость, а также физико-химические свойства наполнителя.

В таких композитах ИЖ проникает в нанопоры или адсорбируется на поверхности материала. Однако, для получения электролитов для гибких электронных устройств этот композит не подходит, в виду отсутствия пластичности и возможности расслоения ионогеля при длительной выдержке.

Для решения данной проблемы, нами было предложено, на этапе смешения глины с ИЖ, растворять в последней микрокристаллическую целлюлозу (МКР). Это поможет не только улучшить стабилизацию гелеобразного состояния ИЖ при формировании каркасов из наночастиц глины в жидкой матрице, но и усилить адсорбционные взаимодействия на межфазной границе. Так же МКР выступает в качестве стабилизатора системы, препятствуя расслаиванию функционального нанокомпозита.

Объектом исследований нами был выбран 1-бутил-3-метилимидазолий ацетат, так как данная жидкость обладает не только низким давлением пара, высокой ионной активностью, но и способностью растворять микрокристаллическую целлюлозу до 25 мас.%, за счет разрыва разветвленных сетей водородных связей в полимере.

В качестве наполнителя для стабилизации гелеобразования раствора ионная жидкость/микрокристаллическая целлюлоза, применялись две глины: Na-бентонит и галлуазит. Благодаря разному строению слоистых алюмосиликатов, мы смогли сделать выводы о влиянии структуры глинистых минералов на свойства полученных нами биополимерных ионогелей.

Благодаря взаимодействию с глинами, ионные жидкости меняют текучесть, температурный интервал жидкого состояния и термическую стабильность. Физико-химические свойства таких биополимерных ионогелей зависят от взаимодействия ионной жидкости с пористыми пространствами глины.

Ионогели с различным масс.% содержанием микрокристаллической целлюлозы были изучены с помощью различных методов исследования: рентгенофазового и термогравиметрического анализа, ИК — спектроскопии, СЭМ, а так же была установлена зависимости электропроводности образцов от частоты электрического тока.

Мы выяснили, что внедрение в ионогель МКР позволяет не только улучшить пластичность материала, по сравнению с композитами без целлюлозы, но и увеличивает их термическую стабильность и электропроводность практически в 2 раза в широком диапазоне температур, что даже выше чем у чистой ИЖ.

ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА НАНОТРУБОК НА СВОЙСТВА СУСПЕНЗИИ С МИЦЕЛЛЯРНЫМИ ЦЕПЯМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА

Шишханова К.Б., Молчанов В.С., Филиппова О.Е.

МГУ имени М.В. Ломоносова

Длинные червеобразные мицеллы ионных поверхностно-активных веществ (ПАВ), переплетаясь, могут образовывать трёхмерную сетку в растворе, придавая ему вязкоупругие свойства, которые характеризуются такими параметрами, как модулем упругости, высокой вязкостью при нулевой скорости сдвига, временем релаксации и другими. Данные характеристики варьируются в зависимости от концентрации соли, ПАВ, pH среды, температуры. Поэтому червеобразные мицеллы широко используют как загустители с управляемыми свойствами в нефтедобыче, косметике, бытовой химии.

Существует задача увеличения вязкоупругих свойств для расширения областей применения растворов червеобразных мицелл. В данной работе мы предлагаем добавить в систему глину галлуазит -легкодоступный нетоксичный материал, который представляет собой трубки наноразмеров. Ранее в литературе было показано, что неорганические частицы могут встраиваться в мицеллярную сетку в качестве физических сшивок и приводить к увеличению вязкости и времени релаксации в сетке, но влияние нанотрубок глины не исследовали. За счет того, что внутренняя и внешняя поверхности галлуазита различны, а соответственно и их физические свойства, их применяют в качестве наноконтейнеров с пролонгированным выходом. Таким образом, добавление нанотрубок в раствор червеобразных мицелл ПАВ может привнести в систему новые необычные свойства, а также улучшить вязкоупругие, являясь дополнительными сшивками между мицеллами. Мы полагаем, что большая поверхность нанотрубок будет способствовать образованию большого количества сшивок.

Целью данной работы было создание объединённых систем червеобразных мицелл катионного ПАВ и нанотрубок галлуазита и изучение их свойств. Показано, что нанотрубки образуют устойчивые суспензии с мицеллами ПАВ и увеличивают вязкоупругие свойства сеток на порядки. Изучены изменения свойств и структуры совместных систем при варьировании количества нанотрубок, концентрации ПАВ и заряда нанотрубок. Согласно литературе и ранее полученным в лаборатории результатам, взаимодействие между нанотрубками галлуазита и катионным ПАВ происходит в два этапа: 1) адсорбция бислоя ПАВ на поверхности нанотрубки за счет электростатического притяжения и 2) присоединение мицеллярных концов к адсорбированному слою. При увеличении заряда нанотрубок увеличивалось количество адсорбированного ПАВ и вязкоупругие свойства совместных сеток. Впервые было показано, что, варьируя заряд на поверхности нанотрубок, можно управлять силой взаимодействия нанотрубок и мицелл менять значения вязкоупругих свойств сетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 21-73-30013).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УГЛЕРОДНЫХ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ НА СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ

Шиянова К.А., Торкунов М.К., Гудков М.В., Рывкина Н.Г., Гулин А.А., Баженов С.Л., Мельников В.П.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

Разработка электропроводящих материалов стала одной из наиболее важных тем сосредоточения исследований в материаловедении и технологии в последние десятилетия. Материалы с высокой электропроводностью и антистатическими свойствами на основе промышленных полимеров в последние годы широко используются для решения огромного ряда технологических задач. Электропроводящие полимерные композитные материалы (ЭПКМ) используются в электронике, радиоаппаратуре, для снятия статического электричества, экранирование электромагнитных помех и ряда других применений.

В последние годы графен и одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) привлекли большое внимание со стороны как экспериментальных, так и теоретических групп исследователей в качестве наполнителей для композитных материалов в связи

с их уникальными структурными и электрофизическими свойствами.

Данная работа посвящена свойствам полимерных композитов, наполненных ОУНТ и восстановленным оксидом графена (ВОГ). В рамках работы оценивалось влияние ОУНТ (1-D) и ВОГ (2-D) на электрофизические и механические свойства полимерных композитов. Для проведения исследований были получены образцы ЭПКМ на основе сополимера тетрафторэтилена и винилиденфторида (марка «Ф-42В»). Частицы порошка полимера покрывали смесью углеродных наполнителей: оксидом графена и одностенными углеродными нанотрубкам, после чего порошок с покрытием обрабатывали парами гидразингидрата для перевода оксида графена в восстановленную графеноподобную форму. При фиксированном значении суммарной массовой доли смеси наполнителей в композитах (0.5, 1 и 1.5 мас.%) варьировали соотношение ВОГ/ОУНТ.

В работе продемонстрированы зависимости электропроводности и физико-механических характеристик композитов на основе Ф-42В от соотношения ВОГ/ОУНТ в смеси углеродных наполнителей. Также для полученной серии образцов приведены зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости от частоты электрического поля. По этим экспериментальным значениям диэлектрических свойств были рассчитаны коэффициенты поглощения и отражения от передней границы для плоских образцов толщиной от 1 до 5 мм.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90278\20.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ УСИЛЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ АНИЗОТРОПНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ С НЕСКОЛЬКИМИ ПЛАЗМОННЫМИ МОДАМИ ПРИ ДВУХФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Шокова М.А., Боченков В.Е.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Известно, что при взаимодействии наночастиц благородных металлов со светом с длиной волны в видимом диапазоне возможно возбуждение локализованного поверхностно-плазмонного резонанса (ППР), приводящее к появлению вблизи поверхности металла областей с повышенной интенсивностью электромагнитного поля.

В свою очередь, это может значительно повлиять на процессы возбуждения и релаксации молекул флуорофоров, находящихся вблизи наночастиц. В зависимости от степени спектрального перекрывания между полосой ППР и полосой поглощения либо испускания флуорофора можно достичь увеличения констант скоростей возбуждения или испускания.

В последнее время активно изучаются металлические наноструктуры с несколькими плазмонными модами для одновременного перекрывания с полосами поглощения и испускания белка, причем для этого необходимо пространственное совпадение областей повышенного электрического поля для обеих мод.

При однофотонном возбуждении вклады усиления однофотонного поглощения и испускания в усиление сигнала примерно одинаковы.

С практической точки зрения значительный интерес вызывает возможность двухфотонного возбуждения флуоресценции светом ближнего ИК-диапазона.

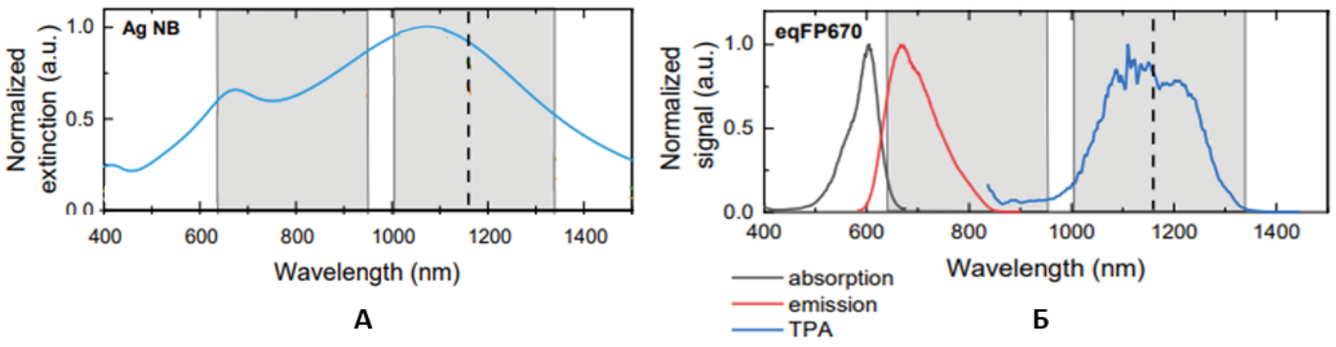


Рис. 1. а) Рассчитанный спектр экстинкции нанобрусков Ag с соотношением длины и ширины 1:1.55; б) Спектры поглощения при одно-(черный) и двухфотонном возбуждении (синий) и спектр испускания (красный) белка eqFP670.

В данной работе с помощью численного моделирования методом конечных разностей во временной области (FDTD) было изучено усиление флуоресценции красного флуоресцентного белка eqFP670 вблизи наночастицы серебра с формой нанобруса и соотношением длины к толщине 1:1.55. Данная частица имеет две плазмонные моды, близкие по энергии к полосе двухфотонного поглощения (1180 нм) и к полосе испускания (670 нм) хромофора eqFP670 (рис.1б). Рассчитанный спектр экстинкции наночастиц серебра представлен на рис.1а. Рассчитанный коэффициент усиления флуоресценции при двухфотонном возбуждении оказался равен 10^3.

Показано, что при двухфотонном возбуждении основной вклад в усиление интенсивности флуоресценции вносит локальное усиление электромагнитного поля на длине волны двухфотонного поглощения флуорофора.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-23-00454.

МЕТОДЫ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ И ДИФФУЗИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР В ОПРЕДЕЛЕНИИ СТРОЕНИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ

Шпотя В.А.[1], Перепухов А.М.[1], Пучкова Ю.А.[2], Гомзяк В.И.[2,3], Седуш Н.Г.[2], Чвалун С.Н.[2,3], Максимычев А.В.[1]

[1]Московский физико-технический институт (НИУ)
[2]НИЦ Курчатовский институт
[3]МИРЭА — Российский технологический университет

Одним из направлений использования функциональных материалов является создание наноконтейнеров для лекарственных средств. Наноконтейнеры позволяют повысить растворимость биоактивных соединений и обеспечить их адресную доставку к нужным клеткам и тканям. В комплексе это ведет к снижению эффективной концентрации лекарственных соединений без превышения порога токсичности. В качестве основы наноконтейнеров можно использовать амфифильные гиперразветвлённые блок-сополимеры, в которых можно менять размеры блоков в зависимости от размеров и особенностей «гостя». Проверка соотношения и размеров блоков после синтеза возможна с помощью методов корреляционной спектроскопии ЯМР, а наличие примесей можно проверить с помощью диффузионных методов ЯМР (DOSY). Совокупность одномерных (^{1}H, ^{13}C) и двумерных гомоядерных и гетероядерных (COSY, HSQC, HMBC) экспериментов позволила обнаружить взаимодействие ядер внутри блоков и на их стыке, интерпретировать одномерные спектры и оценить соотношение блоков и их длины в составе блок-сополимеров. В работе исследовались гиперразветвлённые блок-сополимеры BOLTORN H40/полилактид и линейные блок-сополимеры полилактид/метокси-ПЭГ, а также изучались образцы с L-полилактидом и D,L-полилактидов для сравнения и выбора оптимального состава. Диффузионные эксперименты показали, что в ряде образцов присутствуют включения с большей подвижностью, определены их коэффициенты самодиффузии и массовые доли. На двумерных спектрах удалось обнаружить сигнал от стыковых групп, проследить взаимодействия внутри звеньев различных полимерных блоков, получить финальную интерпретацию одномерных спектров. По одномерным спектрам, с учётом результатов диффузионных экспериментов, было оценено соотношение блоков и количество звеньев внутри каждого полимерного блока.

В итоге нами получена последовательность ЯМР-экспериментов, направленная на анализ строения блок-сополимеров. Последовательность прошла апробацию на блок-сополимерах различной архитектуры (линейной и гиперразветвлённой). Применение полученных результатов позволит унифицировать общий подход к изучению блок-сополимеров, более качественно оценивать их строение и подбирать оптимальные условия синтеза. В дальнейшем планируется исследовать другие блок-сополимеры с помощью предложенной последовательности, а также ещё точнее определить параметры экспериментов для получения информативного результата в кратчайшие сроки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-70.2021.1.3.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОВОЛОКОННОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПВДФ/BCZT

Шуайбов А.О.[1], Рабаданова А.А.[1], Селимов Д.А.[1], Абдурахманов М.Г.[1], Гюлахмедов Р.Р.[1], Смейкалова Т.Б.[2], Собола Д.С.[1], Касткова К.[3], Рамазанов Ш.М.[2], Оруджев Ф.Ф.[1,4]

[1]*ФГБОУ ВО Дагестанский Государственный Университет, Махачкала*
[2]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала*
[3]*Брненский технологический университет, Чешская республика*
[4]*Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград*

Пьезофотокаталитическая (ПФК) очистка воды — наиболее перспективная технология, как с точки зрения окружающей среды, так и с точки зрения энергетики. Одним из перспективных материалов для ПФК является органический полимер поливинилиденфторид (ПВДФ). В данной работе методом электропрядения была синтезирована пьезоактивная нановолоконная композитная пленка ПВДФ\BCZT сочетающая в себе бипьезоэлектрические свойства. Была изучена пьезофотокаталитическая активность при разложении органического красителя Метиленового Синего (МС). На рис. 1 а, б показаны СЭМ изображения нановолокон. Волокна имеют неоднородный диаметр, причем наночастицы равномерно распределены по всему полимеру с небольшой агломерацией в некоторых локализованных областях. На рис. 1. в показаны кинетические кривые разложения МС при облучении УФ-видимым светом и ультразвуковой обработке (УЗ).

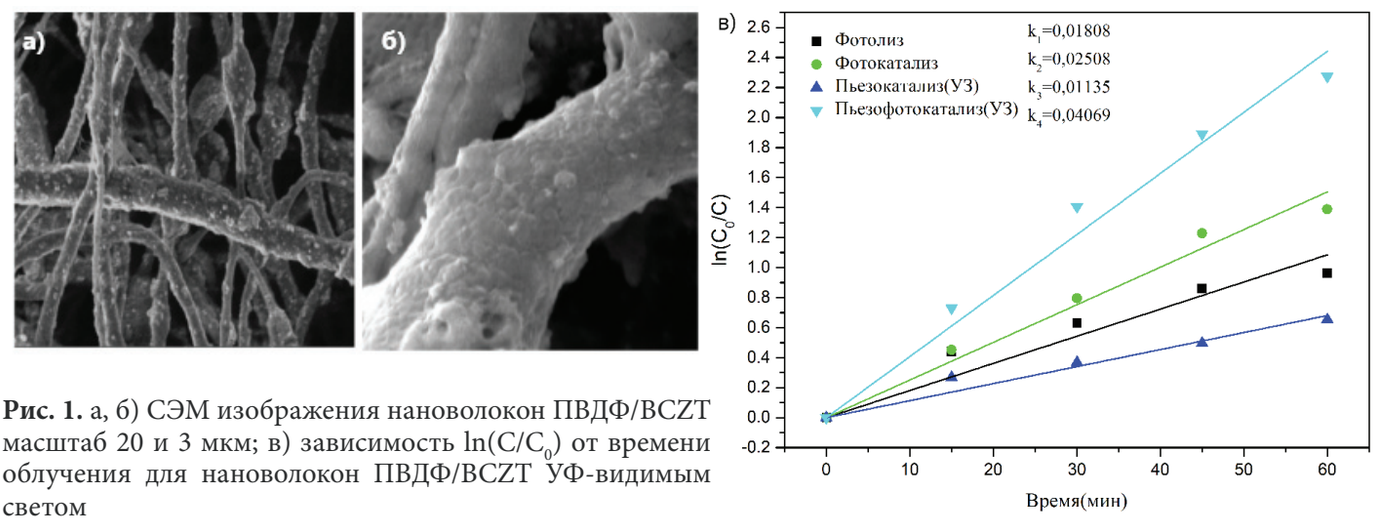


Рис. 1. а, б) СЭМ изображения нановолокон ПВДФ/BCZT масштаб 20 и 3 мкм; в) зависимость $\ln(C/C_0)$ от времени облучения для нановолокон ПВДФ/BCZT УФ-видимым светом

Установлено, что наибольшую активность при разложении МС продемонстрировал ПФК — 89.5 %, сочетающий свет и УЗ. Эффективность разложения МС при фотолизе составила 62 %, что немного выше, чем при пьезокатализе. Из кинетических кривых показанных на рис.1 в. видно, что при совместном воздействии ультразвуковой обработки и облучения УФ-видимым светом скорость реакции увеличивается в 2.2, 1.6 и 3.6 раза по сравнению с фотолизом, фотокатализом и пьезокатализом соответственно. Таким образом, показано, что при УЗ обработке ПВДФ/BCZT генерирует пьезопотенциал. Ускорение скорости при ПФК можно объяснить тем, что генерируемый в композите при УЗ обработке пьезопотенциал влияет на процесс фотокатализа, поскольку пьезополяризованные заряды могут вызывать изгиб полосы на границе раздела ПВДФ/BCZT, способствуя пространственному разделению фотогенерированных носителей и тем самым ограничивая рекомбинацию в BCZT.

СРАВНЕНИЕ МЕТАБОЛИЧЕСКОЙ И ПРОЛИФЕРАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ КЛЕТОК АДЕНОКАРЦИНОМЫ ГОРТАНИ И ЕЕ КЛОНОВ, ЭКСПРЕССИРУЮЩИХ ГЕННОИНЖЕНЕРНЫЕ БЕЛКИ

Юркова А.Ю.[1,2], Жердева В.В.[1], Малошенок Л.Г.[1,3], Богданов А.А. мл.[1]

[1]*ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Росссия, vjerdeva@inbi.ras.ru*
[2]*Московский политехнический университет, Москва, Россия*
[3]*Институт общей генетики им. Н.И. Вавилова РАН, Москва, Россия*

Флуоресцентные цветные белки на протяжении последних десятилетий используются в качестве высокочувствительных маркеров и для создания химерных белковых конструкций и сенсоров на их основе. Они с успехом применяются как в флуоресцентной микроскопии высокого разрешения, так и во флуоресцентном имиджинге мелких лабораторных животных.

Ранее мы использовали флуоресцентные белки для визуализации протеолитической активности, и для разработки подходов визуализации геномных участков с использованием технологии CRISP/Cas9 как в культуре опухолевых клеток, так и в подкожных ксенографтах на животных.

Основной задачей при работе с опухолевыми моделями является сохранение исходных характеристик клеточной линии при оптимальном уровне флуоресцентного сигнала, который позволит получать статистически значимые результаты. В работе с опухолевыми клеточными линиями приходится прибегать к таким процедурам как селекция и клонирование, в частности после трансфекции репортерными генами флуоресцентных белков и сенсорами на их основе.

В данном исследовании нашей задачей являлось сравнение трех клеточных линий: линии аденокарциномы гортани HeP2, гетерогенной популяции трансдуцированных клеток Hep2-TagRP и полученных клонов, отличающихся уровнем экспрессии Tag RFP. В культуре клеток данных линий анализировали длительность прохождения клеточного цикла, а также активность митохондриальных дегидрогеназ.

В работе использовали тимидиновый блок с последующей цитофлуорометрией для оценки клеточного цикла с последующим анализом в программе CytExpert 2.4, и использовали МТТ-тест для оценки активности дегидрогеназ.

Подсчет клеток производили также по гидролизу флуоресцеиндиацетата и подсчетом клеток в камере Горяева. Флуоресцентная микроскопия позволяла оценить уровень флуоресцентного сигнала и рассчитать далее среднюю интегральную интенсивность флуоресценции в клетках с использованием программы Image J.

В результате было показано, что полученные клетки отличались разной скоростью прохождения клеточного цикла и, соответственно, разным временем удвоения, что отражалось на общей скорости пролиферации (увеличение с 18 ч до 48 и более часов). Также клоны и исходные клетки характеризовались разным уровнем активности митохондриальных дегидрогеназ.

В работе использовалось оборудование ЦКП ФИЦ Биотехнологии РАН: планшетного ридера CLARIOstar Plus (BMG LABTECH, ФРГ) и клеточного цитометра CytoFlex LX (Beckman Coulter, Inc., США).

Работа выполнена при поддержке гранта МОН № 14.WO3.3 1.0023.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИММУННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА 3D МОДЕЛИ ГЛИОБЛАСТОМЫ

Калугин И.М. [1], Жукова О.А. [2], Лукина М.[4], Южакова Д.В[4], **Юсубалиева Г.М.** [2,3]

[1] Первый МГМУ им. Сеченова, Москва, Россия
[2]Федеральный научно-клинический центр ФМБА России, Москва, Россия
[3]Инситут молекулярной биологии РАН им. В.А. Энгельгардта, Москва, Россия
[4]Приволжский национальный исследовательский медицинский университет, Н. Новгород, Россия.

В последние годы гетерогенное микроокружение солидной опухоли (TME), в частности, при глиобластоме, вызывает значимый интерес у специалистов в области нейроонкологии. Сложная природа моделей солидных опухолей сильно различаются: от двухмерных (2D) моделей до моделей на животных.

Трехмерные (3D) модели клеточных культур более точно воспроизводят иммунные проявления TME, предоставляя экспериментально доступные человеческие модели для изучения биологических процессов рака. Такие модели необходимы для разработки эффективных терапевтических стратегий, которые могут эффективно снизить резистентность к химиотерапии, а также для мониторинга механизмов, с помощью которых ТМЭ влияет на уклонение от иммунного ответа.

На сегодняшний день существует огромное разнообразие платформ 3D-культуры: сфероиды, органоиды, гидрогели, 3D-каркасы, 3D-биопечать и микрофлюидика.

Для изучения степени инфильтрации иммунных клеток в опухоль, необходима динамическая модель TME, которые позволит исследователям улучшить результаты доклинического скрининга иммунотерапии, с учетом, что последние достижения в исследованиях иммунотерапии сосредоточены на использовании ингибиторов иммунных контрольных точек.

Наша задача разработать 3D-модель, которая отражает взаимодействие TME с модифицированными NK клетками и опухоль инфильтрирующими лимфоцитами.

Пригодность модели для инфильтрации иммунных клеток в опухоль оценивали с помощью гистологии, конфокальной микроскопии и метаболической навигации. Результаты показали, что модифицированные NK-клетки были способны успешно продвигаться вглубь сфероида для взаимодействия с опухолевыми клетками.

ДИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕТАБОЛИТОВ И КРИВАЯ BOLD ОТВЕТА НА КОРОТКИЙ ЗРИТЕЛЬНЫЙ СТИМУЛ, ИЗМЕРЕННЫЕ ПРИ ПОМОЩИ 1H-МРС

Яковлев А.Н.[1,2,3], Грицкова А.В.[4], Ублинский М.В.[1,2], Манжурцев А.В.[1,2,4], Ахадов Т.А.[1,4], Семенова Н.А.[1,2,3,4]

[1]*Научно-исследовательский институт неотложной детской хирургии и травматологии*
[2]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН*
[3]*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН*
[4]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*

Глутамат (Glu) и γ-аминомасляная кислота (ГАМК) являются основными нейромедиаторами (возбуждающим и тормозным, соответственно). В исследованиях с использованием единичного стимула изменение Glu в коротком периоде времени связано с выпуском нейромедиатора из везикул, так как метаболические процессы имеют недостаточную скорость. Косвенным подтверждением является быстрое заполнение везикул нейромедиатором: характерное время процесса от 1 до 20 с. В работах с использованием длительного стимула (от 30 с) изменения, в основном, связывают с метаболизмом. К настоящему времени известно, что средний уровень ГАМК в ответ на стимуляцию снижается. Поскольку ГАМК также является нейромедиатором и упакован в везикулы, при вовлечении тормозных процессов в обработку зрительного стимула, ожидается увеличение интенсивности ЯМР сигнала ГАМК в коротком периоде. Последующая кинетика будет характеризовать возвращение ГАМК в везикулы.

Цель данной работы при помощи 1H-МРС измерить динамику ГАМК в ответ на короткий зрительный стимул. МРТ и протонная МРС выполнены на 3Т томографе Philips Achieva dStream. В исследовании приняло участие 33 здоровых волонтера (13 мужчин; 22.7±2.3 лет). Для зрительной активации использовалась мерцающая с частотой 8 Гц шахматная доска в блоках (3с — стимуляция, 13.5s — черный экран; 15 раз для фМРТ и 40 — МРС). ФМРТ-изображения получены при помощи GE EPI со следующими параметрами TR/TE = 3000/40 мс, угол отклонения = 90°, разрешение = 2.4×2.4 мм, толщина среза = 4 мм, число срезов = 30 (83 накопления). Спектры получены при помощи импульсной последовательности MEGA-PRESS (TR/TE = 1500/68мс, NSA = 802, 30x40x25мм) и локализованы в активированной области зрительной коры. Ширина линии и высота сигналов метаболитов определена из аппроксимации резонансных линий Cr (3 м.д.) и NAA (2 м.д.). Количественная обработка спектров выполнена при помощи LCmodel.

Апостериорный тест Даннета выявил статистически значимые изменения ширины линии и высот резонансных линий Cr и NAA. Ширины линий этих метаболитов уменьшаются, а высоты — увеличиваются, причем максимальное изменение наблюдается на 6-ой секунде. Статистически значимых изменений уровней Glu и ГАМК не выявлено.

Наше исследование демонстрирует применимость протонной МРС для измерения BOLD-ответа, в том числе и его временных характеристик, в группе испытуемых. Данное изменение показывает преимущество использования МРС в сопоставлении нейронной активности (при помощи BOLD-эффекта) и метаболических уровней.

ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Яруллин Д.Т., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский Федеральный Университет

В настоящее время, несмотря на значительное количество исследований, посвященных кинетике кристаллизации, поведение некоторых кинетических характеристик остается малоизученным. Так, например, кинетический фактор кристаллизации (скорость пристёгивания частиц к зародышу) был исследован лишь вблизи критического размера зародышей. Недоступность исследований в области сверхкритических размеров обусловлена отсутствием подходящих симуляционных методов. В настоящей работе будет представлен оригинальный метод оценки скорости пристёгивания, позволяющий производить оценки в области суб- и сверхкритических зародышей.

В качестве исследуемой системы рассматривается однокомпонентная система Леннард-Джонса, состоящая из 13500 частиц, расположенных в кубической ячейке моделирования с параметрами $Lx \approx Ly \approx Lz \approx 15\sigma$. Кристаллизация системы достигается путем её быстрого охлаждения до температуры $0.5\,\epsilon/k_B$ при постоянном давлении $p=2.0\,\epsilon/\sigma^3$, что соответствует переохлаждению $\Delta T/T_m \approx 43\%$. Идентификация упорядоченных структур проводится в ходе кластерного анализа, основанного на расчете параметров локального ориентационного порядка. Скорость пристёгивания оценивается на основе информации о количестве частиц, пристёгивающихся к «первому» зародышу системы за временной интервал Δt, совпадающий с шагом интегрирования уравнений движения.

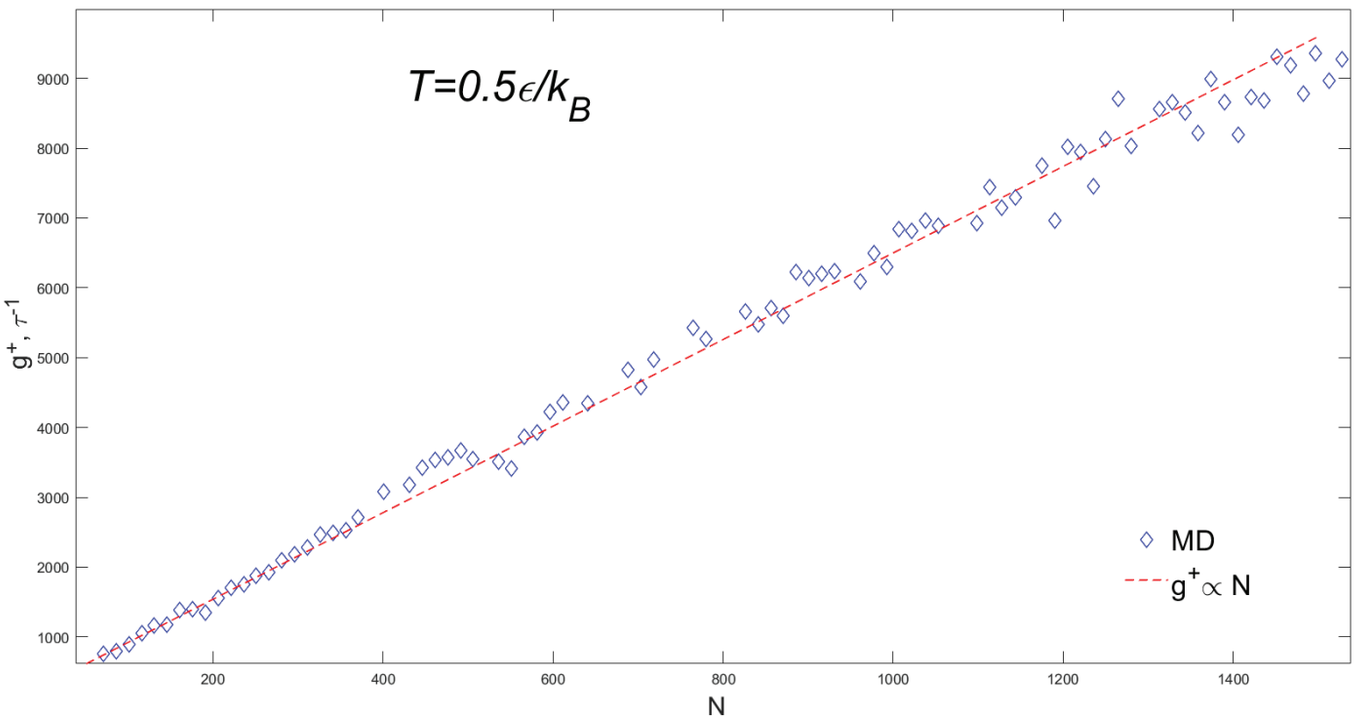


Рис. 1. Скорость пристёгивания g^+ как функция от размера «первого» зародыша системы.

На рисунке 1 представлены результаты оценки скорости пристёгивания как функции от размера «первого» зародыша системы. Как видно из рисунка, поведение *N*-зависимости скорости пристёгивания с высокой точностью может быть описано линейной функцией $g^+ \propto N$.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Проект № 20-1-2-38-3).

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ АБСОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА, ПОЛИГИДРОКСИБУТИРАТА И ХИТОЗАНА

Яхина А.Р., Жорина Л.А., Роговина С.З., Иорданский А.Л.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Постоянно увеличивающееся с ростом промышленных отходов содержание токсичных тяжелых металлов в сточных водах представляет собой угрозу для здоровья человека. Среди различных металлов, встречающихся в водоемах, наиболее распространенными являются ионы железа и хрома, эффективное удаление которых требует создания новых технологий.

Абсорбция ионов металлов с использованием различных биополимеров, способных к биоразложению после окончания срока использования, представляет собой один из наиболее перспективных методов очистки сточных вод. В качестве эффективных селективных абсорбентов большой интерес представляют композиции на основе биополимеров, которые совмещают в себе высокие сорбционные характеристики, хорошие механические параметры, а также биоразлагаемость. К таким полимерным композициям относятся, в частности, абсорбенты на основе полисахарида хитозана, и полиэфиров полилактида (ПЛА) и полигидроксибутирата (ПГБ), синтезируемых из природного сырья.

Смешение исходных полимеров проводили в растворе с последующим получением тройных пленочных композиций ПЛА-ПГБ-хитозан. Для этого к растворам ПЛА и ПГБ в хлороформе при механическом перемешивании добавляли хитозан в виде порошка.

Полученные композиционные пленки помещали в водные растворы солей металлов железа и хрома различной концентрации и выдерживали в растворе в течение определенного времени. Теплофизические характеристики исходных полимеров и их смесей исследовали методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и термогравиметрического анализа (ТГА). Определены температуры и энтальпии фазовых переходов и рассчитана степень кристалличности образцов. Продемонстрировано, что наиболее заметные изменения тер-

мических переходов и наибольшее возрастание степени кристалличности ПЛА наблюдаются при максимальном содержании ПЛА в смеси.

При анализе кривых ДСК композиций, содержащих абсорбированные ионы железа и хрома, обнаружено значительное снижение степени кристалличности обоих полиэфиров, что, вероятно, обусловлено присутствием ионов металлов в растворе, затрудняющих процесс кристаллизации полиэфиров. При этом установлено, что равновесие между сорбированной водой и ионами металлов обуславливается присутствием ионов хрома и железа в композиции, которые активно сорбируются функциональными группами хитозана. Анализ данных ДСК и ТГА позволяет сделать вывод, что хитозан, являясь гидрофильным полимером, образует системы водородных связей с молекулами воды, в результате чего происходит потеря массы относительно исходного образца и изменение энтальпии полимерной системы.

Для определения эффективности использования тройной композиции ПЛА–ПГБ–хитозан с соотношением компонентов 25:25:50 (мас. %) в качестве абсорбента было проведено сравнительное изучение ее абсорбционной способности по отношению к ионам железа и хрома с использованием методов рентгено-флуоресцентного анализа (РФА) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ).

Показано, что с увеличением концентрации солей в растворе происходит рост концентрации абсорбированных ионов. Экспонирование тройной композиции ПЛА–ПГБ–хитозан в концентрированных водных растворах исследуемых электролитов, приводит к заметным морфологическим изменениям полимерной поверхности и к формированию фазы электролитов в виде дисперсных частиц, форма и распределение которых зависят от природы электролита.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абакумов М.А. 68, 121
Абдулагатов А.И. 31, 105
Абдулагатов И.М. 31, 105
Абдурахманов М.Г. 149, 191
Абрамчук С.С. 160
Авдеев К.А. 144
Авдиевская Е.В. 107
Аветисов В.А. 178,
Агафонов А.В. 187
Аджиева А.Б. 6
Адлерберг В.В. 123
Азарова Д.Ю. 6, 31
Айрапетов М.И. 19, 90
Акасов Р.А. 172
Акимов Г.А. 7
Аксенов В.С. 144
Александров Н.В. 8
Алексанян Д.В. 9
Алексанян К.В. 10
Алексеев В.И. 183
Алексеева М.В. 161
Алексеева О.В. 155
Алешина Н.М. 137
Алистер Д.А. 94
Алпатов А.А. 75
Амозова В.И. 10
Ананьев И.В. 86
Андриасян Ю.О. 138
Аникина В.А. 11, 61
Аникина Е.В. 12, 74, 94
Антина Л.А. 140
Антипова А.П. 159
Антонова М.М. 12
Архипова Е.А. 99
Аршинский В.Л. 184
Аслоповский В.Р. 13
Астафьев А.А. 159
Астафьев П.А. 14
Астахов А.А. 98
Астахов М.В. 39
Асякина А.С. 109
Атрошенко Д.Л. 15, 86, 152
Афанасьев А.К. 119
Ахадов Т.А. 40, 193
Ахлюстина Е.В. 36
Ахмад Е.С. 15
Ахметова А.И. 150
Ачох А.Р. 42

Багров Д.В. 123
Баженов С.Л. 171, 189
Бакеева И.В. 150
Бакиров А.В. 46
Балакина А.А. 10
Басалова Н.А. 170
Батаев В.А. 7
Безумова Д.В. 78
Белецан О.Б. 16
Белик К.Д. 17
Беликова А.А. 17
Белов К.В. 18, 156
Белова Е.М. 63, 120, 145, 170
Белоедова Н.С. 51, 135
Белусь С.К. 67, 70
Белькевич А.М. 125
Беляев В.К. 115
Белякова Е.Д. 19
Березникова Л.А. 20
Бескачко В.П. 12
Благов А.Е. 91, 131
Блохина Е.А. 65
Бобров А.В. 21
Богачев Д.Ю. 15
Богданов А.А. 45
Богданов А.А. мл. 91
Богданова А.В. 22
Богословская О.А. 53
Бойченко А.Н. 16, 22
Бондаренко И.Д. 42
Ботин А.С. 132
Ботнарь А.А. 47
Бочаров К.В. 187
Боченков В.Е. 159, 189,
Боченкова А.В. 13, 16, 22, 28, 71, 154, 174
Бревнов П.Н. 41
Брейгина М.А. 183
Бубис Ю.А. 136
Бугрова А.Е. 6, 31
Будков Ю.А. 23, 42, 72
Бузанов Г.А. 67, 70
Букреева Т.В. 24
Бурцев И.Д. 52
Бурьянская Е.Л. 23
Бусленко А.В. 24
Бухарова Т.Б. 179
Бырдин К.А. 25
Бычкова А.Н. 26, 47, 55
Бычковский П.М. 125, 126

Валов А.Ф. 27
Ванцян М.А. 24
Васильева А.Д. 6, 31
Васин А.А. 85
Васютин П.Р. 27
Вашурин А.С. 17, 26, 47, 55, 72, 117
Вдовиченко А.Ю. 79
Веревкин А.А. 109
Верин И.А. 91
Винник Д.А. 28, 178
Виноградов В.В. 101, 163
Витухновский А.Г. 52
Волдаева О.Н. 28
Волков Д.А. 79
Волков Н.Д. 29
Волков П.В. 183
Волкова Е.Н. 57
Волошин С.В. 168
Воронцов С.А. 30

Гаврилина Е.С. 6, 31
Гаджимурадов С.Г. 31
Гайнутдинов Р.В. 86
Галимзянов Б.Н. 32, 48, 122, 174, 182, 193
Галлямов М.О. 160
Галушко А.С. 90
Гамалея А.А. 47, 129, 145, 170
Гамов Г.А. 33, 60
Ганичев Я.А. 33
Гарибян А.А. 34
Гарифуллин А.Д. 168
Гасиева З.А. 90
Гаспарян К.Г. 35
Гасымов М.М. 35
Гатин А.К. 49
Гельперина С.Э. 12
Гладких Е.В. 52
Глинская Е.Г. 36
Глущенко Н.Н. 87
Годунов И.А. 7
Головин С.Н. 37
Гомзяк В.И. 183, 190
Гонгальский М.Б. 106
Горбатова В.Н. 38
Горгола А.О. 39
Гордеева И.В. 38
Гордиевская Ю.Д. 110
Гордиенко Ю.А. 27
Горенберг А.Я. 41
Горшков М.В. 136
Гостева Е.А. 8, 17, 167
Грабельных О.И. 96
Градов О.В. 23
Градова М.А. 23
Гребенев В.В. 168
Грибова Е.Д. 118
Григорьев Т.Е. 79, 177
Григорьева Е.А. 39
Грицкова А.В. 40, 193
Гришин М.В. 49

Громов А.И. 15
Гудков М.В. 41, 101, 171, 189
Гудкова Е.И. 126
Гудырина М.А. 33
Гулин А.А. 41, 171, 189
Гуляева Ю.К. 161
Гурина Д.Л. 42
Гюлахмедов Р.Р. 149, 191

Давыдов Д.В. 28, 42
Давыдова Г.А. 67, 70, 178
Далингер И.Л. 109
Даминдарова В.Н. 43
Дамыров У.Б. 31
Данилов П.А. 144
Даничкина К.В. 44, 187
Дахно П.Г. 44, 100
Деева В.В. 45
Демина Т.С. 148
Дернов Г.В. 63
Десяцкова А.М. 46
Джалагония И.З. 47
Диденко С.И. 84, 108
Дмитрук Е.И. 126
Домарева Н.П. 47
Доронина М.А. 48
Дохликова Н.В. 49
Доценко В.В. 44, 100
Дубенская Н.А. 158
Дубинец Н.О. 49
Дударева Т.В. 38
Духова Ю.С. 50

Евдокимов Н.Д. 51, 135
Евдокимова А.В. 50, 51
Егоров А.Е. 52
Егорова А.А. 78
Елиферов В.А. 187
Еловиков Д.П. 52
Емекеева Д.Д. 53
Емельянова Н.С. 133
Еникеева М.О. 54
Еремеев И.Е. 26, 55
Еремина М.Ю. 55
Еремичев Р.Ю. 170
Ереско С.О. 19, 90
Ерзунов Д.А. 17
Ермилова Т.С. 56, 146
Ермоленко Ю.В. 12
Ефименко А.Ю. 170

Желначева П.В. 57, 90
Жердева В.В. 45, 191
Жидель К.М. 14, 57
Жирова Е.Д. 58
Жорина Л.А. 194
Жуденков К.В. 87
Жуков А.М. 59
Жукова О.А. 192

Заболотнов А.С. 60
Завалишин М.Н. 33, 60
Загоскин Ю.Д. 79, 177
Заколдаев Р.А. 144
Залесский А.Д. 85
Замятина Е.А. 11, 61
Захаров А.С. 62
Захаров Н.И. 63
Захарченко Т.К. 63
Захарян А.А. 165
Зинатуллина К.М. 64
Зубарева П.Д. 17
Зыкова А.А. 65

Ивакин Ю.Д. 27
Иваненко А.Д. 65, 139
Иванов А.С. 99
Иванов В.К. 134
Иванов В.Р. 66
Иванов В.С. 31
Иванов М.В. 136
Иванова А.В. 68
Иванова Е.В. 68
Иванова М.А. 185
Иванова Т.В. 67
Иванова Ю.Б. 133, 180
Иванушкина Н.Е. 10
Ивлев Д.В. 72
Ильин А.С. 69
Ильина Т.С. 23
Индейкина М.И. 6, 31
Иорданский А.Л. 194
Исаев В.В. 70
Искалиева А.Р. 19
Иштеев А.Р. 84, 108

Йованович С. 115

Каберник Н.С. 70
Казакова Е.М. 53
Казанцев С.А. 71
Казарян К.Ю. 72
Казачкина Н.И. 45
Каликин Н.Н. 72
Калиникин Д.А. 73
Калинин К.Т. 73
Калугин И.М. 192
Калягин А.А. 140
Каплун М.В. 74
Карагяур М.Н. 170
Карпова С.Г. 138
Каршиева С.Ш. 36
Касаикина О.Т. 64, 137
Касткова К. 149, 191
Катаев В.С. 75
Кашурин А.И. 103
Квашнин А.Г. 165
Квашнин Д.Г. 165
Ким С.Д. 76
Кириллов В.Е. 77
Кириллова В.А. 77
Киселев В.Г. 109
Киселев Д.А. 23
Киселев М.Г. 72, 118
Клавсюк А.Л. 166
Клещина Н.Н. 28
Клименко Д.И. 78
Кобец К.Д. 120
Ковалева В.В. 79
Ковальчук М.В. 91, 131
Кожухова Е.И. 67, 70
Козловская К.Е. 69, 95
Козмай Я.А. 109
Кокурина Т.В. 80
Колесников А.Л. 30, 72
Колесникова В.Г. 30
Колманович Д.Д. 134
Коломиец Е.В. 80
Колтовской И.И. 113
Колымагин Д.А. 52
Коморников В.А. 168
Комягина А.А. 81
Конарев Д.В. 141
Кондратенко А.Д. 82, 173
Кондратьева Е.О. 83, 143, 151
Коновалова В.С. 83
Кононихин А.С. 6, 31
Кононова М.И. 98
Константинова Е.А. 69
Константинова К.М. 108, 84
Коржов А.Н. 42
Кормухина А.Ю. 84, 133
Корозникова Е.Е. 85
Королева А.В. 69
Корсукова А.В. 96
Косарева Е.К. 86
Коскин А.П. 161
Костров А.Н. 85
Костюков А.А. 52
Кочервинский В.В. 23
Кошелев А.В. 172
Кошелев А.Д. 183
Кошель Е.И. 96
Кошкина М.К. 86
Крамаренко Е.Ю. 110
Крапивко А.Л. 66
Краснякова Т.В. 120
Красоткина И.А. 38

Крашенинников В.Г. 41
Крашенинников С.В. 150
Крестьянинов М.А. 18, 72
Кривицкая А.В. 87, 55
Кувшинов А.Ю. 168
Кудан Е.В. 36
Кудрявцев Д.С. 111
Кудряшов С.А. 166
Кудряшов С.И. 144
Кудряшова Н.О. 87
Кузич А.А. 125
Кузнецов А.А. 184
Кузнецов В.А. 88
Кузнецов Н.М. 79, 150
Кузнецова О.П. 35, 155
Кузьмин В.А. 52
Кузьмина Л.Г. 67, 70
Кулакова А.М. 116
Кулёв В.А. 89
Кулёмина С.Ю. 90
Кулешова Т.Э. 57, 90
Куликов А.В. 124, 133
Куликов А.Г. 91, 131
Купреенко С.Ю. 92, 99
Куприянов В.В. 65
Куранова Н.Н. 94
Кусочек П.А. 71, 93
Куфаров Н.Д. 94
Кушнир Р.А. 94
Кытина Е.В. 95

Лавлинская М.С. 159
Лагунова Е.А. 27
Лазукин А.А. 96, 128
Лазукин А.В. 96
Лаптев А.Ю. 97
Ларионов К.В. 161
Лебедева О.Е. 37, 43, 98, 103, 154, 169
Левада Е.В. 30, 115
Левин М.М. 99
Левина Е.О. 98
Левицкий Л.И. 136
Левченко А.Г. 44, 100
Леончук С.С. 101
Лисенкова Ю.С. 12
Лобанов А.В. 128, 172, 176
Лобова Н.А. 82, 107
Логвинов В.В. 93
Лоза С.А. 42
Ломакин С.М. 35
Ломовкин В.В. 101
Лузанова В.Д. 102
Лукина М. 192
Лунева О.В. 103

Майборода А.Д. 183
Макарова Е.А. 36
Макарян А.В. 103
Максимова Ю.М. 104
Максимычев А.В. 190
Максумова А.М. 31, 105
Максумова И.М. 105
Максутова Д.Е. 106
Малахова Ю.Н. 107
Малошенок Л.Г. 191
Мамед-Набизаде В.В. 183
Манжурцев А.В. 40, 193
Маракасова А.А. 78
Маркина А.А. 130
Мартышов М.Н. 69
Марфин Ю.С. 21, 185
Медведева А.С. 33, 60
Медянцев Е.С. 107
Меерович Г.А. 36
Мелихова Д.О. 84, 108, 183
Мелконян К.И. 109
Мельников В.П. 41, 171, 189
Мельников И.Н. 109
Мельников П.В. 119
Мельников С.С. 42
Мерзлякова Т.Ю. 110
Микушева А.Д. 107
Минаев Н.В. 148
Минаева Е.Д. 148
Минаева С.А. 148
Миненков Ю.В. 115, 127, 141
Миронов И.В. 111
Митченко С.А. 120
Михайлец Э.С. 168
Михальчук А.А.Л. 86
Можаева В.А. 111
Мокшин А.В. 32, 48 122, 182, 193
Молева Н.В. 21
Моллаева М.Р. 112, 157
Молчанов В.С. 62, 179, 188
Мордосова О.В. 113
Москвичев С.С. 114
Моторжина А.В. 115
Мощенков А.Д. 115
Мулашкина Т.И. 116
Муравьев Н.В. 86, 109
Муратов А.Д. 117
Мухина И.В. 153
Мыкина Е.А. 117

Надточенко В.А. 85
Нармания Б.Е. 83
Насиров П.Д. 118
Наумова А.О. 119
Небогатикова Н.А. 130
Незвинский А.А. 120
Нестеренко П.Н. 97, 102
Нешев Н.И. 158
Нигматуллин Д.Р. 29
Никитенко Д.В. 120
Никитин А.А. 121
Никифоров Г.А. 32, 122
Никишин Д.А. 137
Никишин И.И. 123
Николаев А.Ю. 160
Николаев В.А. 101
Николаев Е.Н. 6, 31
Николенко В.Н. 147
Никольская Е.Д. 112, 157
Никольский В.Г. 38
Новиков А.П. 124
Новикова В.О. 124, 133
Новикова Н.Е. 91
Новикова С.А. 118
Новокшонова Л.А. 41
Новоторцев Р.Ю. 92
Носков А.В. 155

Огородников В.Э. 125, 126
Одинцова Е.Г. 42
Ольхов А.А. 172
Опарин Р.Д. 72
Орехова А.В. 64
Оруджев Ф.Ф. 149, 191
Осипов А.А. 127
Осипова Е.А. 184
Осминкина Л.А. 106
Осокин В.С. 89
Осыко А.В. 83
Отлётов А.А. 115, 127, 141

Павленко А.В. 57
Павлов К.И. 126
Павлова А.Ю. 128
Павлова П.А. 96, 128
Павловский Ф.Н. 129
Панина О.Ю. 15
Панова Г.Г. 90
Парфенова Д.А. 78
Патлажан С.А. 142
Пеганов Е.А. 76
Пеков С.И. 44, 164, 186, 187
Первушин Н.Ю. 106
Перепухов А.М. 190
Пестрикова А.А. 81, 160
Петровский В.С. 130
Петякин Н.В. 130
Пещерова С.М. 184
Пивкина А.Н. 109
Пигалёва М.А. 81, 160
Пиляк Ф.С. 131

Писаревский Ю.В. 91, 131
Платонов В.Б. 69
Платонова Я.Б. 77
Плащина И.Г. 64
Плоскирев А.Е. 132
Плотникова А.О. 133, 180
Плотникова Л.В. 168
Погодина Е.И. 33
Погонин А.Е. 185
Покидова О.В. 84, 124, 133
Полевова С.В. 183
Полотнянко Н.А. 33, 135
Поляничко А.М. 168
Пономаренко Е.А. 107
Попов А.А. 39, 138
Попов А.Л. 134
Попов В.А. 120
Попов В.К. 172, 179
Попов Е.А. 138
Попов З.И. 20, 165
Попов И.А. 44, 164, 176, 187
Попова Н.Р. 11, 61
Порошин М.А. 51, 135
Постоенко В.И. 136
Потапова Н.В. 64, 137
Почетная П.А. 137
Правада Е.С. 138
Прищепа А.В. 121
Прохоров К.А. 111
Прут Э.В. 155
Психа Б.Л. 158
Пуховская С.Г. 133, 180
Пучков А.А. 139
Пучкова Ю.А. 46, 65, 139, 190
Пшеничников С.Е. 115

Рабаданова А.А. 149, 191
Рабчинский М.К. 101
Равин Н.В. 65
Равчеева Е.А. 140
Разуваева Е.В. 46
Рамазанов Ш.М. 149, 191
Решетько С.С. 92
Роговина С.З. 10, 35, 194
Родионова В.В. 30
Рожманова Н.Б. 97, 102
Розенфельд М.А. 6, 31
Розов Т.П. 141
Романенко Г.А. 183
Романенко Н.Р. 141
Рощин Д.Е. 142
Руденко Е.И. 49
Рукк Н.С. 67, 70
Рулев А.А. 143
Рупасов А.Е. 144
Русинова Т.В. 109
Рывкина Н.Г. 41, 171, 189
Рябков Е.Д 66

Савин С.С. 15, 86, 152
Савина А.С. 78
Савчук Т.П. 95
Садыков И.А. 144
Сайфулина К.Э. 145
Салецкий А.М. 166
Салимзаде Э.А.О. 146
Санина Н.А. 10, 84, 124, 133
Санькова М.В. 147
Сарвадий С.Ю. 49
Сафандеев В.В. 51, 135, 147
Седов А.С. 47, 63, 120, 129, 170
Седова Ю.К. 148
Седуш Н.Г. 65, 73, 114, 139, 190,
Селимов Д.А. 149, 191
Семенов Д.С. 15
Семенова Н.А. 40, 193
Семкина А.С. 150
Сенковенко А.М. 123
Сенотрусова С.А. 150
Сергеев А.В. 83, 151
Сергеев Е.П. 152
Сергомасова А.А. 152
Сивачев А.А. 183
Сидоров Е.А. 153
Силкин С.В. 187
Синев М.Ю. 27
Синенко Г.Д. 154
Скрябин Г.О. 123
Смальченко Д.Е. 103, 154
Смейкалова Т.Б. 191
Сметанюк В.А. 25
Смирнов Н.А. 144
Смирнова Д.Н. 155
Смыковская Р.С. 155
Собола Д.С. 149, 191
Соболев К.В. 30
Соборнова В.В. 18, 156
Советников Т.О. 157
Сокол М.Б. 112, 157
Соколова Е.М. 158
Соловьева А.А. 98
Солодилов В.И. 59
Соломевич С.О. 125, 126
Солоп Е.А. 109
Сопова Н.С. 159
Сорокин А.В. 159
Сорокин П.Б. 161
Сорокина С.С. 11
Спивак И.М. 111
Стамер К.С. 160
Старков В.В. 8
Степаненко С.А. 161
Степанов И.Г. 162
Степанова Х.С. 161
Степин С.С. 7
Столяров А.Ф. 134
Столярова Д.Ю. 101
Стрыканова В.В. 163
Студеникина Л.Н. 164
Ступина Т.С. 10
Ступников А.А. 107, 164
Ступникова Г.С. 164
Сулейманов С.И. 31
Суханова Е.В. 20, 165
Сызганцева М.А. 166
Сырбу С.А. 180
Сыромятников А.Г. 166

Тамбура М. 167
Тарасенко Е.А. 103
Тарасова И.А. 53
Татьяненко Л.В. 84
Тельная Е.А. 168
Тимаков И.С. 168
Тимофеева В.В. 169
Тимченко А.С. 170
Титов Е.Н. 154
Тихомирова Т.В. 26, 47, 55, 72, 117
Тихонова А.А. 66
Тишков В.И. 15, 86, 152
Толстолужинская А.Е. 170
Томский А.А. 47, 63, 129, 145, 170
Торкунов М.К. 171, 189
Трифанова Е.М. 172
Трушина Д.Б. 24
Тюбаева П.М. 35, 172
Тюрин А.В. 33, 135

Ублинский М.В. 40, 193
Усейнов А.С. 52
Усова С.В. 47
Успенская М.В. 103
Ушакова Ю.А. 15

Фальчевская А.С. 101
Фараонов М.А. 141, 173
Фархутдинова Д.А. 13, 154, 174
Фатеева Е.С. 107
Фатихова Л.Р. 174
Федотов М.А. 75
Фетисова В.Э. 175
Филатова Е.В. 176
Филиппова О.Е. 62, 179, 188
Филюшкина В.И. 145, 170

Флисюк Е.В. 181
Фомина Ю.С. 177
Фомичёв И.А. 28, 70, 178
Фролкина М.А. 178
Фролов С.М. 25

Хабадзе З.С. 6
Хао У. 179
Харламова К.И. 104
Хворостина М.А. 179
Ходов И.А. 18, 156
Хомякова П.С. 29
Хороненкова С.В. 15
Храмеева Н.П. 64
Хренова М.Г. 55, 87, 98, 116
Хрушкова Ю.В. 180

Церковная К.М. 181
Цирельсон В.Г. 98
Цыганков А.А. 182

Чареев Д.А. 33, 135
Чвалун С.Н. 46, 73, 79, 101, 107, 114, 177, 190
Чевкина Е.М. 123
Чепкасов И.В. 165
Черкасова А.В. 125, 126
Чернышев Д.А. 168
Чернышов М.П. 183
Черняк Д.М. 183
Чесноков С.А. 52
Чиркина М.В. 112, 157
Чубич Д.А. 52
Чувашкин С.И. 183
Чудаков Е.А. 184
Чуешова А.Г. 184
Чукавин Н.Н. 134

Шабров В.Н. 181
Шагурин А.Ю. 185
Шамарина Е.В. 186
Шамраева М.А. 44, 186, 187
Шамшин И.О. 144
Шарапова А.В. 58
Шахов А.М. 10, 159
Шевелёва М.П. 61
Шевченко В.Г. 35
Шеломов М.Д. 15, 86, 152
Шемяков А.Е. 11
Шерстнева А.А. 148
Шибаева В.Д. 187
Шитова Е.С. 76
Шишкин Д.В. 184
Шишханова К.Б. 188
Шиянова К.А. 41, 171, 189
Шокова М.А. 189
Шорохова Т.В. 180
Шпотя В.А. 107, 190
Шуайбов А.О. 149, 191
Шуб Б.Р. 49

Щербаков Д.А. 52
Щербаков К.А. 76

Южакова Д.В. 192
Юрина Л.В. 6, 31
Юрков Г.Ю. 59
Юркова А.Ю. 191
Юркштович Т.Л. 125, 126
Юсубалиева Г.М. 192
Яббаров Н.Г. 112, 157
Яковлев А.В. 40
Яковлев А.Н. 193
Яминский И.В. 150, 157
Япрынцев М.Н. 37, 43
Яруллин Д.Н. 33
Яруллин Д.Т. 193
Ястремский Е.В. 46
Яхина А.Р. 194

ФИЦ ХФ РАН

CONTENTS

Аджиева А.Б., *Хабадзе З.С.*
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОЛЛАГЕНОВОЙ МАТРИЦЫ ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ ОБЪЕМА МЯГКИХ ТКАНЕЙ, КАК АЛЬТЕРНАТИВА АУТОТРАНСПЛАНТАТАМ 6

Азарова Д.Ю., *Гаврилина Е.С., Юрина Л.В., Васильева А.Д., Индейкина М.И., Бугрова А.Е., Кононихин А.С., Николаев Е.Н., Розенфельд М.А.*
ОКИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФИБРИНОГЕНА, ВЫЗВАННЫЕ СВОБОДНО-РАДИКАЛЬНЫМ ОКИСЛЕНИЕМ 6

Акимов Г.А., *Степин С.С., Батаев В.А., Годунов И.А.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ С ЦИКЛОПРОПАНОВЫМ КОЛЬЦОМ 7

Александров Н.В. *Гостева Е.А., Старков В.В.*
ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ 8

Алексанян Д.В.
ПИНЦЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ. ОТ «ЗЕЛЕНЫХ» МЕТОДОВ СИНТЕЗА ДО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ 9

Алексанян К.В., *Роговина С.З., Шахов А.М., Иванушкина Н.Е.*
ПОЛУЧЕНИЕ ТРОЙНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПЭНП–ПОЛИЛАКТИД–КРАХМАЛ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ 10

Амозова В.И., *Ступина Т.С., Санина Н.А., Балакина А.А.*
ВЛИЯНИЕ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С N-ЭТИЛТИОМОЧЕВИНОЙ НА АКТИВАЦИЮ NRF2-ЗАВИСИМЫХ ПРОЦЕССОВ В ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТКАХ 10

Аникина В.А., *Сорокина С.С., Попова Н.Р., Замятина Е.А., Шемяков А.Е.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННОГО ДЕРМАТИТА, ИНДУЦИРОВАННОГО ПЛОТНОИОНИЗИРУЮЩИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ НА МЫШАХ 11

Аникина Е.В., *Бескачко В.П.*
ДЕКОРИРОВАННЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ: ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ ВОДОРОДА 12

Антонова М.М., *Лисенкова Ю.С., Ермоленко Ю.В., Гельперина С.Э.*
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ ЭТОПОЗИДА НА ОСНОВЕ ГИДРОФОБИЗИРОВАННОЙ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ 12

Аслоповский В.Р., *Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.*
РАСЧЕТ СЕЧЕНИЯ ДВУХТОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МУТАНТНЫХ ФОРМ БЕЛКА EGFP 13

Астафьев П.А., *Жидель К.М.*
РАДИОПОГЛОЩАЮЩИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ BFO-PFN НА МИКРОПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ В СВЧ-ДИАПАЗОНЕ 14

Атрошенко Д.Л., *Шеломов М.Д., Хороненкова С.В., Ушакова Ю.А., Савин С.С., Тишков В.И.*
ПОЛУЧЕНИЕ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОКСИДАЗ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ *OGATAEA PARAPOLYMORPHA* DL-1 15

Панина О.Ю., ***Ахмад Е.С.,*** *Богачев Д.Ю., Семенов Д.С., Громов А.И.*
РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ЭМУЛЬСИЙ В ЦЕЛЯХ КОНТРОЛЯ РЕЖИМОВ ЖИРОПОДАВЛЕНИЯ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ 15

Белецан О.Б., *Бойченко А.Н., Боченкова А.В.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПРИ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ АВТОЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ СЛАБОСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ АНИОНОВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ 16

Гостева Е.А., ***Белик К.Д.,*** *Зубарева П.Д.*
ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, ДИОКСИДА ТИТАНА И УГЛЕРОДА В ЖИВЫХ ОРГАНИЗМАХ 17

Беликова А.А., *Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.*
CLAM-SHELL ФТАЛОЦИАНИНЫ МАГНИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ 17

Белов К.В., *Киселев М.Г., Соборнова В.В., Крестьянинов М.А., Ходов И.А.*
КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ТОЛФЕНАМОВОЙ КИСЛОТЫ ПО ДАННЫМ NOESY 18

Белякова Е.Д., *Искалиева А.Р., Ереско С.О., Айрапетов М.И.*
НЕЙРОПРОТЕКТОРНОЕ ДЕЙСТВИЕ ГИНЗЕНОЗИДОВ..... 19

Березникова Л.А., *Суханова Е.В., Попов З.И.*
ИССЛЕДОВАНИЕ НОВОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ СОСТАВА MOX2 (X=S, SE) В КАЧЕСТВЕ АНОДА ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ..... 20

Бобров А.В., *Молева Н.В., Марфин Ю.С.*
СИНТЕЗ СЕНСОРНЫХ ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ С BODIPY 21

Богданова А.В.
ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПЕСТИЦИДА, ПРОИЗВОДНОГО СЛОЖНОГО 2-ЭТИЛГЕКСИЛОВОГО ЭФИРА, В ТРЕХМЕСЯЧНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ 22

Бойченко А.Н., *Боченкова А.В.22*
ОПИСАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ СОЛЬВАТАЦИИ НА ВЕРТИКАЛЬНЫЕ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ В РАСТВОРЕ 22

Будков Ю.А.
МОДИФИЦИРОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА-БОЛЬЦМАНА И СООТВЕТСТВУЮЩИЕ ИМ ТЕНЗОРЫ НАПРЯЖЕНИЙ. ПРИЛОЖЕНИЕ К НЕОДНОРОДНЫМ ИОННЫМ ЖИДКОСТЯМ И РАСТВОРАМ ЭЛЕКТРОЛИТОВ..... 23

Бурьянская Е.Л., *Градова М.А., Градов О.В., Киселев Д.А., Ильина Т.С., Кочервинский В.В.*
СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СОПОЛИМЕРОВ ВИНИЛИДЕНФТОРИДА, ДОПИРОВАННЫХ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ 23

Бусленко А.В., *Ванцян М.А., Трушина Д.Б., Букреева Т.В.*
ЧАСТИЦЫ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ КАК НОСИТЕЛИ ИНТРАНАЗАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ..... 24

Быр дин К.А., *Сметанюк В.А., Фролов С.М.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТОПЛИВНОЙ СТРУИ 25

Бычкова А.Н., *Еремеев И.Е., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.*
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФТАЛОЦИАНИНОВ, СОДЕРЖАЩИХ НА ПЕРИФЕРИИ АЗОХРОМОФОРЫ 26

Валов А.Ф.
ОСОБЕННОСТИ ФЛУКТУАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ ИДЕАЛЬНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОЛЕЦ С БОЛЬШИМ РАДИУСОМ ИНЕРЦИИ 27

Васютин П.Р., *Синев М.Ю., Лагунова Е.А., Ивакин Ю.Д., Гордиенко Ю.А.*
СТРУКТУРИРОВАНИЕ И ОБРАЗОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ И ФАЗ ПРИ ОБРАБОТКЕ ВОДНЫМИ ФЛЮИДАМИ ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ КАТАЛИЗАТОРОВ LA/AL_2O_3 27

Винник Д.А., *Фомичёв И.А., Давыдова Г.А.*
РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАРРАГИНАНА..... 28

Волдаева О.Н., *Клещина Н.Н., Боченкова А.В.*
РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ ИНДИКАТОРОВ КАЛЬЦИЯ..... 28

Волков Н.Д., *Хомякова П.С., Нигматуллин Д.Р.*
МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ МОНОГАЛОГЕНЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛОВ 29

Воронцов С.А., *Соболев К.В., Колесникова В.Г., Родионова В.В., Левада Е.В.*
ОСОБЕННОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ SMART-КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНОГО МАГНИТНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ 30

Васильева А.Д., Юрина Л.В., Азарова Д.Ю., ***Гаврилина Е.С.,*** *Иванов В.С., Индейкина М.И., Бугрова А.Е., Кононихин А.С., Николаев Е.Н., Розенфельд М.А.*
ВЛИЯНИЕ ГИПОХЛОРИТ- И ПЕРОКСИД- ИНДУЦИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ПЛАЗМИНОГЕНА НА ПОВРЕЖДЕНИЕ СТРУКТУРЫ И БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ 31

Максумова А.М., ***Гаджимурадов С.Г.,*** *Дамыров У.Б., Сулейманов С.И., Абдулагатов И.М., Абдулагатов А.И.*
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ И ГРАВИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РОСТА ПЛЕНОК ОКСИДА МОЛИБДЕНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ АТОМНО-СЛОЕВОГО ОСАЖДЕНИЯ 31

Галимзянов Б.Н., *Никифоров Г.А., Мокшин А.В.*
ПОРИСТЫЕ БИОСОВМЕСТИМЫЕ СПЛАВЫ И ПРОБЛЕМЫ ИХ ИССЛЕДОВАНИЯ 32

Гамов Г.А., *Яруллин Д.Н., Медведева А.С., Гудырина М.А., Погодина Е.И., Завалишин М.Н.*
ПРОТОНИРОВАНИЕ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ЗНАЧЕНИЙ ИОННОЙ СИЛЫ 33

Ганичев Я.А., *Полотнянко Н.А., Тюрин А.В., Чареев Д.А.*
ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕСТЕРИТА 33

Гарибян А.А.
ТЕРМОДИНАМИКА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С БАРИЦИТИНИБОМ — ИММУНОМОДУЛЯТОРОМ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ 34

Гаспарян К.Г., *Тюбаева П.М.*
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОПУЛЯРНЫХ МАРОК МОЛОТОГО КОФЕ 35

Гасымов М.М., *Роговина С.З., Ломакин С.М., Кузнецова О.П., Шевченко В.Г.*
ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИЛАКТИД-ВОССТАНОВЛЕННЫЙ ОКСИД ГРАФЕНА, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ СПОСОБАМИ 35

Глинская Е.Г., *Каршиева С.Ш., Ахлюстина Е.В., Макарова Е.А., Меерович Г.А., Кудан Е.В.*
ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНОСТИ ТЕТРАКАТИОННОГО ПРОИЗВОДНОГО БАКТЕРИОХЛОРИНА НА КЛЕТКАХ В 2D- И 3D-УСЛОВИЯХ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ 36

Головин С.Н., *Япрынцев М.Н., Лебедева О.Е.*
ПОЛУЧЕНИЕ ЛАНТАНИД-СОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ 37

Горбатова В.Н., *Гордеева И.В., Дударева Т.В., Красоткина И.А., Никольский В.Г.*
ВЛИЯНИЕ ПОРОШКОВЫХ ЭЛАСТОМЕРНЫХ МОДИФИКАТОРОВ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ 38

Горгола А.О., *Астахов М.В.*
МОДИФИКАЦИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНОЙ ЛЕНТЫ GMCC ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ 39

Григорьева Е.А., *Попов А.А.*
СОЗДАНИЕ ПОРИСТЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СПОСОБНОСТИ К БИОРАЗЛОЖЕНИЮ 39

Грицкова А.В., *Яковлев А.В., Манжурцев А.В., Ублинский М.В., Ахадов Т.А., Семенова Н.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИДЕОСТИМУЛЯЦИИ НА УРОВЕНЬ ГОМОКАРНОЗИНА И КИСЛОТНОСТИ В ЗРИТЕЛЬНОЙ КОРЕ ЧЕЛОВЕКА 40

Гудков М.В., *Бревнов П.Н., Рывкина Н.Г., Шиянова К.А., Гулин А.А., Крашенинников В.Г., Горенберг А.Я., Новокшонова Л.А., Мельников В.П.*
ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛИМЕР-ГРАФЕНОВЫХ АЭРОГЕЛЕЙ ПУТЕМ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МОНОМЕРА ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НЕПОСРЕДСТВЕННО НА ГРАФЕНОВЫХ ЧАСТИЦАХ 41

Гурина Д.Л., *Одинцова Е.Г., Будков Ю.А.*
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 1-ЭТИЛ-3-МЕТИЛИМИДАЗОЛИЙ ТЕТРАФТОРБОРАТА В ЗАРЯЖЕННЫХ ПЛОСКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПОРАХ 42

Давыдов Д.В., *Мельников С.С., Ачох А.Р., Коржов А.Н., Лоза С.А., Бондаренко И.Д.*
ПОЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОЭНЕРГИИ ИЗ ГРАДИЕНТА КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕТОДОМ ОБРАТНОГО ЭЛЕКТРОДИАЛИЗА 42

Даминдарова В.Н., *Япрынцев М.Н., Лебедева О.Е.*
ПОЛУЧЕНИЕ ОЛОВОСОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ РАЗЛИЧНЫЕ ДВУХВАЛЕНТНЫЕ КАТИОНЫ 43

Даничкина К.В., *Шамраева М.А., Пеков С.И., Попов И.А.*
КАТИОНИЗАЦИЯ IN SITU И РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ MALDI-МАТРИЦЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИПИДНОГО СОСТАВА ТКАНЕЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА 44

Дахно П.Г., *Левченко А.Г., Доценко В.В.*
2,2′-(1,2,4-ТИАДИАЗОЛ-3,5-ДИИЛ)БИС(3-(2-ХЛОРФЕНИЛ)ОКСИРАН-2-КАРБОКСАМИД): СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ 44

Деева В.В., *Жердева В.В., Казачкина Н.И., Богданов А.А.*
ОЦЕНКА ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И БИОДЕГРАДАЦИИ ПОЛИЭФИРНЫХ СОПОЛИМЕРОВ IN VITRO В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БИОСОВМЕСТИМЫХ МАТЕРИАЛОВ 45

Десяцкова А.М., *Разуваева Е.В., Пучкова Ю.А., Ястремский Е.В., Бакиров А.В., Чвалун С.Н.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТЕРЕОКОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЛАКТИДА И ОКСИДА ЭТИЛЕНА НА ИХ САМООРГАНИЗАЦИЮ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИЦЕЛЛ В РАЗБАВЛЕННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ 46

Джалагония И.З., *Усова С.В., Гамалея А.А., Томский А.А., Седов А.С.*
НЕЙРОННАЯ АКТИВНОСТЬ В БЛЕДНОМ ШАРЕ У ПАЦИЕНТОВ С DYT1 47

Домарева Н.П., *Ботнарь А.А., Бычкова А.Н., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.*
СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ В РАСТВОРЕ ФТАЛОЦИАНИНАТОВ ЛАНТАНИДОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ 47

Доронина М.А., *Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.*
ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В СИСТЕМЕ NI-NB ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ 48

Дохликова Н.В., *Гатин А.К., Сарвадий С.Ю., Руденко Е.И., Гришин М.В., Шуб Б.Р.*
DFT- МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА И КИСЛОРОДА НА НАНОЧАСТИЦАХ БЛАГОРОДНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ, НАНЕСЕННЫХ НА ПОДЛОЖКУ ГРАФИТА 49

Дубинец Н.О.
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСИПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА В ОРГАНИЧЕСКИХ ФОТОВОЛЬТАИКАХ 49

Духова Ю.С., *Евдокимова А.В.*
РАЗРАБОТКА АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ 50

Евдокимов Н.Д., *Порошин М.А., Белоедова Н.С., Сафандеев В.В.*
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭТОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРИМЕРЕ ТЕСТА «ОТКРЫТОЕ ПОЛЕ» И «НОРКОВОГО ТЕСТА» 51

Евдокимова А.В.
СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ СТАБИЛЬНОЙ ДИСПЕРСИИ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА 51

Егоров А.Е., *Костюков А.А., Бурцев И.Д., Щербаков Д.А., Колымагин Д.А., Чубич Д.А., Гладких Е.В., Усейнов А.С., Чесноков С.А., Витухновский А.Г., Кузьмин В.А.*
ФОТОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НОВОГО ФОТОИНИЦИАТОРА В ПРОЦЕССАХ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ 52

Еловиков Д.П.
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ГИДРОТЕРМАЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ НА ФОРМИРОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЯ $BIAL_3(PO_4)_2(OH)_6$ СО СТРУКТУРОЙ ВЕЙЛЕНДИТА 52

Емекеева Д.Д., *Казакова Е.М., Богословская О.А., Тарасова И.А.*
ЦИФРОВАЯ МОРФОМЕТРИЯ РАСТЕНИЙ НА ОСНОВЕ PYTHON ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ 53

Еникеева М.О.
СИНТЕЗ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОРОШКА $LA_{0.9}Y_{0.1}PO_4$ СО СТРУКТУРОЙ МОНАЦИТА И ИХ ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ 54

Еремеев И.Е., *Бычкова А.Н., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.*
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ФТАЛОНИТРИЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ АЗОФЕНОКСИЛЬНЫЕ ГРУППЫ И КОМПЛЕКСЫ НА ИХ ОСНОВЕ 55

Еремина М.Ю., *Кривицкая А.В., Хренова М.Г.*
МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНГИБИРОВАНИЯ ПЕНИЦИЛЛИН-СВЯЗЫВАЮЩЕГО БЕЛКА 2 ШТАММА 35/02 NEISSERIA GONORRHOEAE АНТИБИОТИКОМ ЦЕФТРИАКСОНОМ 55

Ермилова Т.С.
МИНЕРАЛОГОРМОНАЛЬНЫЙ ПРОФИЛЬ НОВОРОЖДЕННЫХ ТЕЛЯТ С ВНУТРИУТРОБНОЙ ЗАДЕРЖКОЙ РАЗВИТИЯ 56

Желначева П.В., *Волкова Е.Н., Кулешова Т.Э.*
ЗАВИСИМОСТЬ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ПИТАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В РАСТИТЕЛЬНО-МИКРОБНОМ ТОПЛИВНОМ ЭЛЕМЕНТЕ 57

Жидель К.М., *Павленко А.В.*
СВОЙСТВА СЛОЕВ В ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ BFO/STO/AL_2O_3 ПО ДАННЫМ СПЕКТРОЭЛЛИПСОМЕТРИИ 57

Жирова Е.Д., *Шарапова А.В.*
ЛИПОФИЛЬНОСТЬ НОВЫХ БИОАКТИВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТИАДИАЗОЛА 58

Жуков А.М., *Солодилов В.И., Юрков Г.Ю.*
ВЛИЯНИЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ НА БИОЦИДНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПРОПИЛЕНА 59

Заболотнов А.С., *Новокшонова Л.А.*
КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА СО СВЕРХМАЛЫМ СОДЕРЖАНИЕМ НАПОЛНИТЕЛЯ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ 60

Завалишин М.Н., *Медведева А.С., Гамов Г.А.*
ГИДРАЗОН ВИТАМИНА B_6 И 2-МЕТИЛ-3-ФУРОИЛКАРБОГИДРАЗИДА: СИНТЕЗ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ ZN^{2+} В РАСТВОРЕ 60

Замятина Е.А., *Попова Н.Р., Аникина В.А., Шевелёва М.П.*
ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ШТОБЕРА НА ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ 61

Захаров А.С., *Молчанов В.С., Филиппова О.Е.*
ГЕЛЕПОДОБНЫЕ КОЛЛОИДНЫЕ ВОДНЫЕ СУСПЕНЗИИ ЧАСТИЦ ГЛИНЫ СОВМЕСТНО С ЧЕРВЕОБРАЗНЫМИ МИЦЕЛЛАМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ (ПАВ) 62

Захаров Н.И., *Белова Е.М., Томский А.А., Седов А.С.*
ОСОБЕННОСТИ НЕЙРОННОЙ АКТИВНОСТИ В ОБЛАСТЯХ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА, ВЫБРАННЫХ ДЛЯ УСТАНОВКИ DBS-ЭЛЕКТРОДА У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА 63

Захарченко Т.К., *Дернов Г.В.*
ВЫСОКОЭФФЕКТИВНАЯ ФИКСАЦИЯ АЗОТА В ЛИТИЙ-АЗОТНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ 63

Зинатуллина К.М., *Орехова А.В., Касаикина О.Т., Храмеева Н.П., Потапова Н.В., Плащина И.Г.*
ВЛИЯНИЕ PH И ИОННОГО СОСТАВА СРЕДЫ НА РЕАКЦИИ ПРИРОДНЫХ ТИОЛОВ 64

Зыкова А.А., *Блохина Е.А., Куприянов В.В., Равин Н.В.*
ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОГО САМОСОБИРАЮЩЕГОСЯ ПЕПТИДА, НЕСУЩИХ АНТИГЕНЫ ВИРУСА ГРИППА А 65

Иваненко А.Д., Пучкова Ю.А., Седуш Н.Г.
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЛАКТИДА И ЭТИЛЕНОКСИДА — ПЕРСПЕКТИВНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ 65

Иванов В.Р., Тихонова А.А., Рябков Е.Д, Крапивко А.Л.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОЗДАНИЯ НИКЕЛЕВО-ПАЛЛАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА МЕТОДОМ РЕПЛИК 66

Рукк Н.С., *Иванова Т.В.,* Бузанов Г.А., Кузьмина Л.Г., Давыдова Г.А., Белусь С.К., Кожухова Е.И.
МНОГОЯДЕРНЫЙ КОМПЛЕКС БРОМИДА МЕДИ(II) С АЦЕТАМИДОМ: СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА 67

Иванова А.В., Абакумов М.А.
НАНОЧАСТИЦЫ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ СТРУКТУР В СВЕРХВЫСОКОМ РАЗРЕШЕНИИ 68

Иванова Е.В., Иванова А.В., Абакумов М.А.
СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ СТРУКТУР 68

Ильин А.С., Козловская К.Е., Платонов В.Б., Королева А.В., Мартышов М.Н., Константинова Е.А.
ВЛИЯНИЕ ЦИНКА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА $ZN_xCO_{3-x}O_4$ 69

Исаев В.В.
КИНЕТИКА РЕАКЦИИ РЕДОКС-МЕДИТОРА И LI_2O_2 В LI–O_2 АККУМУЛЯТОРАХ 70

Рукк Н.С., *Каберник Н.С.,* Бузанов Г.А., Кузьмина Л.Г., Давыдова Г.А., Фомичев И.А., Белусь С.К., Кожухова Е.И.
КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПЕРХЛОРАТА МЕДИ(II) С АНТИПИРИНОМ И НИКОТИНАМИДОМ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ 70

Казанцев С.А., Кусочек П.А., Боченкова А.В.
ВЛИЯНИЕ БЕЛКОВОГО ОКРУЖЕНИЯ РЕТИНАЛЯ НА СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ МИКРОБИАЛЬНОГО РОДОПСИНА KR2 71

Казарян К.Ю., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.
СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОГЕКСИЛФЕНОКСИФТАЛОЦИАНИНОВ 72

Каликин Н.Н., Будков Ю.А., Колесников А.Л., Ивлев Д.В., Крестьянинов М.А., Опарин Р.Д., Киселев М.Г.
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ КЛАССИЧЕСКОГО ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАСТВОРИМОСТИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ФЛЮИДЕ 72

Калиникин Д.А.
СОЛЬВАТОХРОМНЫЙ ЭФФЕКТ В РАСТВОРАХ АНТОЦИАНОВ: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ АНТОЦИАНА И СВОЙСТВ РАСТВОРИТЕЛЯ 73

Калинин К.Т., Седуш Н.Г., Чвалун С.Н.
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ЛАКТИДА МЕТОДОМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ 73

Каплун М.В., Аникина Е.В.
ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА ДВУХСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ 74

Катаев В.С., Федотов М.А., Алпатов А.А.
ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОЗОЛЕЙ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ГИДРОПОНИКИ МИКРОЗЕЛЕНИ 75

Квашнин Д.Г.
ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ И ВНЕШНИХ ВОЗМУЩЕНИЙ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ. DFT РАСЧЕТЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ 76

Ким С.Д., *Пеганов Е.А., Щербаков К.А., Шитова Е.С.*
ФОРМИРОВАНИЕ ИМИТИРУЮЩЕГО УРАН-ПЛУТОНИЕВОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТАБИЛЬНОГО ЦЕРИЯ ДЛЯ ОТРАБОТКИ МЕТОДОВ ЛАЗЕРНОЙ ДЕЗАКТИВАЦИИ 76

Кириллов В.Е.
ПОЛИПРОПИЛЕНОВЫЕ НИТИ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ 77

Кириллова В.А., *Платонова Я.Б.*
ФТАЛОЦИАНИН ПАЛЛАДИЯ, ИММОБИЛИЗОВАННЫЙ НА СИЛИКАГЕЛЕ: ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ 77

Клименко Д.И., *Егорова А.А., Парфенова Д.А., Безумова Д.В., Маракасова А.А., Савина А.С.*
ВЛИЯНИЕ НЕКОТОРЫХ МЕТИЛКСАНТИНОВ НА ПСИХОФИЗИОЛОГИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ОРГАНИЗМА 78

Ковалева В.В.[1], *Кузнецов Н.М., Загоскин Ю.Д., Волков Д.А., Вдовиченко А.Ю., Григорьев Т.Е., Чвалун С.Н.*
ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СУСПЕНЗИЙ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЧАСТИЦ ВЫСОКОПОРИСТОГО ХИТОЗАНА, ДОПИРОВАННОГО НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА, В ПОЛИДИМЕТИЛСИЛОКСАНЕ 79

Кокурина Т.В.
СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ВАНИЛИН-ЗАМЕЩЕННОГО КОМПЛЕКСА BODIPY 80

Коломиец Е.В.
НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕНОПАУЗАЛЬНОЙ ФИТОТЕРАПИИ 80

Комягина А.А., *Пигалёва М.А., Пестрикова А.А.*
БИОСОВМЕСТИМЫЕ ХИТОЗАНОВЫЕ ПАТЧИ С ЭСТРАДИОЛОМ, ПОЛУЧЕННЫЕ В ЭКОЛОГИЧНЫХ СРЕДАХ, СОДЕРЖАЩИХ CO_2 ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ 81

Кондратенко А.Д., *Лобова Н.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ КРАУНСОДЕРЖАЩИХ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ И ОСОБЕННОСТЕЙ ИХ ФОТОРЕАКЦИЙ 82

Кондратьева Е., *Сергеев А.В.*
МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА В ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ ЛИТИЯ 83

Коновалова В.С., *Нармания Б.Е., Осыко А.В.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЬМАТАЦИИ КАПИЛЛЯРНО-ПОРИСТОГО ТЕЛА 83

Константинова К.М., *Мелихова Д.О., Иштеев А.Р., Диденко С.И.*
ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СВИНЦОВО ГАЛОГЕНИДНОГО ПЕРОВСКИТА $CH_3NH_3PBBR_3$ 84

Кормухина А.Ю., *Татьяненко Л.В., Покидова О.В., Санина Н.А.*
ДЕЙСТВИЕ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА С ТИОСУЛЬФАТНЫМИ И ТИОМОЧЕВИННЫМИ ЛИГАНДАМИ НА АКТИВНОСТЬ ФОСФОДИЭСТЕРАЗЫ ЦИКЛИЧЕСКОГО ГУАНОЗИНМОНОФОСФАТА 84

Корозникова Е.Е., *Васин А.А., Костров А.Н., Залесский А.Д., Надточенко В.А.*
ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В БИОИМИДЖИНГЕ 85

Косарева Е.К., *Гайнутдинов Р.В., Михальчук А.А.Л., Ананьев И.В., Муравьев Н.В.*
НАНОМАСШТАБНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА КРИСТАЛЛЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ 86

Кошкина М.К., *Атрошенко Д.Л., Шеломов М.Д., Савин С.С., Тишков В.И.*
ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ ТЕРМОИНАКТИВАЦИИ ОКСИДАЗЫ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ *OGATAEA PARAPOLYMORPHA* DL-1 (OPADAAO1) 86

Кривицкая А.В.[1], *Хренова М.Г.*
МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИИ ГИДРОЛИЗА ИМИПЕНЕМА МЕТАЛЛО-БЕТА-ЛАКТАМАЗАМИ L1 И NDM-1 87

Кудряшова Н.О., *Жуденков К.В., Глущенко Н.Н.*
СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД В ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ С РАЗНЫМИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В СОСТАВЕ РАНОЗАЖИВЛЯЮЩИХ ПРЕПАРАТОВ **87**

Кузнецов В.А.
ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ — ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА И ИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ С СИНТЕЗОМ **88**

Кулёв В.А., *Осокин В.С.*
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ХЛОРИДА КАЛЬЦИЯ В КАЧЕСТВЕ ТЕМПЛАТА ДЛЯ СИНТЕЗА ОКТАКАРБОКСИФТАЛОЦИАНИНАТА **89**

Кулёмина С.Ю., *Ереско С.О., Айрапетов М.И.*
ВЛИЯНИЕ ГРЕЛИНА НА НЕЙРОВОСПАЛЕНИЕ **90**

Кулешова Т.Э., *Желначева П.В., Гасиева З.А., Галушко А.С., Панова Г.Г.*
БИОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ ИСТОЧНИК ТОКА НА ОСНОВЕ ГРАДИЕНТА КОНЦЕНТРАЦИЙ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В КОРНЕОБИТАЕМОЙ СРЕДЕ РАСТЕНИЙ **90**

Куликов А.Г., *Новикова Н.Е., Благов А.Е., Писаревский Ю.В., Верин И.А., Ковальчук М.В.*
ОБНАРУЖЕНИЕ НЕОБЫЧНОЙ ДЕФОРМАЦИИ В КРИСТАЛЛАХ БИФТАЛАТА КАЛИЯ В ПОПЕРЕЧНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМУ ПОЛЮ НАПРАВЛЕНИИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕЁ СТРУКТУРНОЙ ОБУСЛОВЛЕННОСТИ **91**

Купреенко С.Ю., *Новоторцев Р.Ю., Решетько С.С.*
ОСОБЕННОСТИ АДСОРБЦИИ ПАРОВ БЕНЗОЛА НА ПОРИСТЫХ УГЛЯХ И КРЕМНЕЗЁМАХ (ПРОДУКТАХ ПЕРЕРАБОТКИ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ) **92**

Кусочек П.А., *Логвинов В.В.*
РОЛЬ СТРУКТУРЫ АКТИВНОГО ЦЕНТРА РАЗЛИЧНЫХ МИКРОБИАЛЬНЫХ И ЖИВОТНЫХ РОДОПСИНОВ В ДИНАМИКЕ ФОТОХРОМНЫХ РЕАКЦИЙ НА РАННИХ ВРЕМЕНАХ **93**

Куфаров Н.Д., *Аникина Е.В.*
СРАВНЕНИЕ DFT ПАКЕТОВ: АТОМНОПОДОБНЫЕ ОРБИТАЛИ (SIESTA) VS ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ (VASP) **94**

Кушнир Р.А., *Алистер Д.А., Куранова Н.Н.*
СОЛЬВАТАЦИЯ Г-ЦИКЛОДЕКСТРИНА В РАСТВОРИТЕЛЕ H_2O-ЕТОН **94**

Кытина Е.В., *Козловская К.Е., Савчук Т.П.*
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ПРИРОДУ И СВОЙСТВА ДЕФЕКТОВ В НАНОТРУБКАХ ДИОКСИДА ТИТАНА **95**

Лазукин А.А., *Павлова П.А., Кошель Е.И.*
МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОДОВ МИКРОБНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА ДЛЯ ЗНАЧИТЕЛЬНОГО УВЕЛИЧЕНИЯ ЕГО МОЩНОСТИ И ПИТАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ **96**

Лазукин А.В., *Корсукова А.В., Грабельных О.И.*
ПРЕДПОСЕВНАЯ ОБРАБОТКА ПШЕНИЦЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМОЙ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ: СРАВНЕНИЕ С ХОЛОДОВЫМ ЗАКАЛИВАНИЕМ И ДЕЙСТВИЕМ ТЕБУКОНАЗОЛ-СОДЕРЖАЩЕГО ПРОТРАВИТЕЛЯ **96**

Лаптев А.Ю., *Рожманова Н.Б., Нестеренко П.Н.*
РОЛЬ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В ГИДРОФИЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ УГЛЕВОДОВ **97**

Лебедева О.Е., *Соловьева А.А., Кононова М.И.*
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ОЧИСТКИ ВОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТХОДОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ **98**

Левина Е.О., *Хренова М.Г., Астахов А.А., Цирельсон В.Г.*
КЕТО-ЕНОЛЬНАЯ ТАУТОМЕРИЯ С ПОЗИЦИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ **98**

Левин М.М., *Иванов А.С., Архипова Е.А., Купреенко С.Ю.*
ТЕТРААЛКИЛАММОНИЕВЫЕ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ: МЕХАНИЗМЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕГРАДАЦИИ И НЕИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА РАЗЛОЖЕНИЯ **99**

Левченко А.Г., *Дахно П.Г., Доценко В.В.*
N-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)ТИОАМИДЫ: СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ 100

Леончук С.С., *Фальчевская А.С., Николаев В.А., Виноградов В.В.*
РЕАКЦИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ЗАМЕЩЕНИЯ В НЕВОДНОЙ СРЕДЕ: НОВЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ 101

Ломовкин В.В., *Столярова Д.Ю., Рабчинский М.К., Гудков М.В., Чвалун С.Н.*
ИЗМЕНЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЙ ОКСИДА ГРАФЕНА В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМОСТАТИРОВАНИЯ 101

Лузанова В.Д., *Рожманова Н.Б., Нестеренко П.Н.*
ФОЖАЗИТ КАК НЕПОДВИЖНАЯ ФАЗА ДЛЯ ВЭЖХ 102

Лунева О.В., *Кашурин А.И., Успенская М.В.*
СОЗДАНИЕ ПОРИСТЫХ ГИДРОГЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АКРИЛАТОВ И КОЛЛАГЕНА 103

Макарян А.В., *Тарасенко Е.А., Смальченко Д.Е., Лебедева О.Е.*
СИНТЕЗ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ КАТИОНАМИ МЕДИ (II) 103

Максимова Ю.М., *Харламова К.И.*
ВЛИЯНИЕ КРУПНЫХ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ НАПОЛНИТЕЛЯ С ДИАМЕТРОМ БОЛЕЕ 50 МКМ НА ПРОЧНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕРМОПЛАСТИЧНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ 104

Максумова А.М., *Максумова И.М., Абдулагатов И.М., Абдулагатов А.И.*
АТОМНО-СЛОЕВОЕ ОСАЖДЕНИЕ ТИТАН-МОЛИБДЕНОВЫХ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ $TiCl_4$, $MoOCl_4$ И H_2O 105

Максутова Д.Е., *Первушин Н.Ю., Гонгальский М.Б., Осминкина Л.А.*
ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОКОНТЕЙНЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ, ЗАГРУЖЕННЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫМ ПРЕПАРАТОМ СУНИТИНИБОМ, С РАКОВЫМИ КЛЕТКАМИ HCT116 106

Малахова Ю.Н., *Пономаренко Е.А., Авдиевская Е.В., Фатеева Е.С., Микушева А.Д., Ступников А.А., Чвалун С.Н.*
ОСОБЕННОСТИ ГИДРОЛИТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЭТИЛЕНОКСИДА С ЛАКТИДОМ, ЭТИЛЕНОКСИДА С КАПРОЛАКТОНОМ ЛИНЕЙНОЙ И РАЗВЕТВЛЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ МОНОСЛОЯХ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКИХ СРЕД РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА 107

Медянцев Е.С., *Шпотя В.А., Лобова Н.А.*
ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИМЕТИЛАМИНО-ЗАМЕЩЁННЫХ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ В ПРОТОНИРОВАННОЙ И НЕПРОТОНИРОВАННОЙ ФОРМАХ 107

Мелихова Д.О., *Константинова К.М., Иштеев А.Р., Диденко С.И.*
СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ И ПЕРОВСКИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК 108

Мелконян К.И., *Русинова Т.В., Козмай Я.А., Асякина А.С., Солоп Е.А., Веревкин А.А.*
ОЦЕНКА МЕСТНОЙ ТОКСИЧНОСТИ БИОПЛАСТИЧЕСКОГО РАНЕВОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ДЕРМЫ СВИНЬИ 109

Мельников И.Н., *Киселев В.Г., Далингер И.Л., Муравьев Н.В., Пивкина А.Н.*
КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ 6,8-ДИНИТРОТРИАЗОЛО[1,5-A]ПИРИДИНОВ ПО ДАННЫМ ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА И КВАНТОВОЙ ХИМИИ 109

Мерзлякова Т.Ю., *Гордиевская Ю.Д., Крамаренко Е.Ю.*
РАСТЯЖЕНИЕ ЦЕПИ С ПОЛЯРНЫМИ ГРУППАМИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ 110

Миронов И.В., *Спивак И.М.*
ВОЗМОЖНАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ СВЯЗЬ ДЛИНЫ ТЕЛОМЕР И ТЯЖЕСТИ ТЕЧЕНИЯ ПНЕВМОНИЙ РАЗЛИЧНОЙ ЭТИОЛОГИИ 111

Можаева В.А., Кудрявцев Д.С., Прохоров К.А.
АНАЛИЗ ИЗОМЕРОВ ПЕПТИДНЫХ ТОКСИНОВ С ПОМОЩЬЮ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ 111

Моллаева М.Р., Яббаров Н.Г., Сокол М.Б., Чиркина М.В., Никольская Е.Д.
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ PLGA НАНОЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ МЕЗО-ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ..... 112

Мордосова О.В., Колтовской И.И.
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТИ МЕЗОСФЕРЫ НАД ВОСТОЧНОЙ СИБИРЬЮ..... 113

Москвичев С.С., Седуш Н.Г., Чвалун С.Н.
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ L-ЛАКТИДА В ПРИСУТСТВИИ TI(TBSE)$_2$ МЕТОДОМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ..... 114

Моторжина А.В., Пшеничников С.Е., Беляев В.К., Йованович С., Левада Е.В.
НАНОКОМПОЗИТ ЗОЛОТО/КОБАЛЬТОВЫЙ ФЕРРИТ, ЛЕГИРОВАННЫЙ ЦИНКОМ, КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ АГЕНТ ДЛЯ ФОТОТЕРМИИ..... 115

Мощенков А.Д., Отлётов А.А., Миненков Ю.В.
РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОГО ПОДХОДА ДЛЯ НАДЕЖНОГО ПРЕДСКАЗАНИЯ КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ОТКРЫТЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ОБОЛОЧКАМИ..... 115

Мулашкина Т.И., Кулакова А.М., Хренова М.Г.
ВЛИЯНИЕ УХОДЯЩЕЙ ГРУППЫ НА ГИДРОЛИЗ ОРГАНОФОСФАТОВ ФЕРМЕНТОМ ИЗ БАКТЕРИИ PSEUDOMONAS DIMINUTA..... 116

Муратов А.Д.
ОГРУБЛЁННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТИМУЛО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СТЕРЕОРЕГУЛЯРНЫХ ПОЛИМЕРОВ..... 117

Мыкина Е.А., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ФТАЛОЦИАНИНОВ ЦИНКА, СОЧЕТАЮЩИХ НА ПЕРИФЕРИИ ГАЛОГЕНЫ И ФЕНОКСИЛЬНЫЕ ГРУППЫ..... 117

Насиров П.Д., Новикова С.А., Грибова Е.Д.
ХАЛЬКОГЕНИДНЫЕ И УГЛЕРОДНЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ..... 118

Наумова А.О., Афанасьев А.К., Мельников П.В.
ВЛИЯНИЕ ТИПА ПАВ НА РЕАКЦИЮ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННОГО ФОТООСНОВАНИЯ 119

Незвинский А.А., Белова Е.М., Попов В.А., Седов А.С.
РОЛЬ АЛЬФА-ОСЦИЛЛЯЦИЙ В НАРУШЕНИИ ДВИГАТЕЛЬНОГО КОНТРОЛЯ У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА..... 120

Никитенко Д.В., Краснякова Т.В., Кобец К.Д., Митченко С.А.
ИДЕНТИФИКАЦИЯ СТЕРЕОИЗОМЕРОВ ВИНИЛХЛОРИДА МЕТОДОМ ЯМР..... 120

Никитин А.А., Прищепа А.В., Абакумов М.А.
НАНОЧАСТИЦЫ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ МАГНИТО-МЕХАНИЧЕСКОЙ МАНИПУЛЯЦИИ БИОМОЛЕКУЛАМИ 121

Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.
МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА..... 122

Никишин И.И., Адлерберг В.В., Сенковенко А.М., Чевкина Е.М., Скрябин Г.О., Багров Д.В.
РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ..... 123

Новикова В.О., Покидова О.В., Куликов А.В., Санина Н.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С N-ЭТИЛТИОМОЧЕВИННЫМИ ЛИГАНДАМИ В МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ С ГЕМОГЛОБИНОМ..... 124

Новиков А.П.
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПЕРРЕНАТОВ И ПЕРТЕХНЕТАТОВ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ПУРИНОВОГО РЯДА 124

Огородников В.Э., *Соломевич С.О., Черкасова А.В., Белькевич А.М., Кузич А.А., Юркштович Т.Л., Бычковский П.М.*
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ФОСФОРИЛИРОВАННОЙ ОКИСЛЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ 125

Огородников В.Э., *Соломевич С.О., Дмитрук Е.И., Черкасова А.В., Павлов К.И., Гудкова Е.И., Юркштович Т.Л., Бычковский П.М.*
ФАРМАКОКИНЕТИКА ДОКСОРУБИЦИНА И ИНДОМЕТАЦИНА, СОРБИРОВАННЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ 126

Осипов А.А.
РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В НЕЙРАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТКАХ 127

Отлётов А.А., *Миненков Ю.В.*
ТОЧНОСТЬ КЛАСТЕРНО-КОНТИНУУМНОГО ПОДХОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СОЛЬВАТАЦИИ ИОНА NA^+ 127

Павлова А.Ю., *Лобанов А.В.*
СОВРЕМЕННЫЕ ПРИНЦИПЫ ИНТЕГРАЦИИ ХИМИИ И БИОЛОГИИ НА ПРИМЕРЕ БАКТЕРИЦИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ 128

Павлова П.А.[1], *Лазукин А.А.*
ГИПЕРОКСИГЕНАЦИЯ КАТОДНОЙ КАМЕРЫ МИКРОБНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА В КАЧЕСТВЕ ВАРИАНТА УВЕЛИЧЕНИЯ ЕГО МОЩНОСТИ 128

Павловский Ф.Н., *Гамалея А.А., Томский А.А., Седов А.С.*
НЕЙРОННАЯ АКТИВНОСТЬ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА У ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА С ВЫРАЖЕННОЙ КЛИНИЧЕСКОЙ АСИММЕТРИЕЙ 129

Петровский В.С., *Маркина А.А.*
БИСТАБИЛЬНАЯ ДИНАМИКА ДЮФФИНГА В ОЛИГОМЕРАХ ПИРИДИН-ФУРАНА 130

Петякин Н.В., *Небогатикова Н.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДИФИКАЦИЯ ПЛЕНОК ЧАСТИЧНО ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА РАЗНОЙ СТЕПЕНИ МОДИФИКАЦИИ 130

Пиляк Ф.С., *Куликов А.Г., Писаревский Ю.В., Благов А.Е., Ковальчук М.В.*
РАЗДЕЛЕНИЕ ВКЛАДОВ ФОТОИНДУЦИРОВАННЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ $LINBO_3$:FE С ПОМОЩЬЮ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ 131

Ботин А.С., ***Плоскирев А.Е.***
ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПО СУБЪЕКТАМ РФ ИНФЕКЦИИ, ВЫЗВАННОЙ SARC-COV-2 132

Плотникова А.О., *Иванова Ю.Б., Пуховская С.Г.*
СПЕКТРАЛЬНЫЕ И КООРДИНАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОРФИРИНОВ С АСИММЕТРИЧНОЙ СИСТЕМОЙ ЗАМЕЩЕНИЯ 133

Покидова О.В., *Емельянова Н.С., Кормухина А.Ю., Новикова В.О., Куликов А.В., Санина Н.А.*
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ТИОМОЧЕВИННЫМИ И ТИОСУЛЬФАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ С АЛЬБУМИНОМ 133

Попов А.Л., *Колманович Д.Д., Столяров А.Ф., Чукавин Н.Н., Иванов В.К.*
НАНОДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ЦЕРИЙ-СОДЕРЖАЩИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТОЧЕК ДЛЯ ЦЕЛЕЙ БИОИМИДЖИНГА 134

Попов Е.А., *Полотнянко Н.А., Тюрин А.В., Чареев Д.А.*
ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИТЕЛЛУРИДА РУТЕНИЯ 135

Порошин М.А., *Евдокимов Н.Д., Сафандеев В.В., Белоедова Н.С.*
СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТОДОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ГИДРОАЭРОЗОЛЕ 135

Постоенко В.И., *Иванов М.В., Бубис Ю.А., Левицкий Л.И., Горшков М.В.*
РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УРОВНЯ ЛОЖНОПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ СООТНЕСЕНИЙ ПЕПТИДНЫХ СИГНАЛОВ В МАСС-СПЕКТРАХ ПЕРВОГО И ВТОРОГО УРОВНЕЙ В ПРОТЕОМИКЕ 136

Потапова Н.В., *Касаикина О.Т.*
ГЕНЕРИРОВАНИЕ РАДИКАЛОВ ПРИ УЧАСТИИ ХОЛИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ 137

Почетная П.А., *Алешина Н.М., Никишин Д.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОСТИ СЕМИСПИРАЛЬНЫХ РЕЦЕПТОРОВ В КЛЕТКАХ ГРАНУЛЕЗЫ МЫШИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКИ КОДИРУЕМЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БИОСЕНСОРОВ 137

Правада Е.С., *Андриасян Ю.О., Карпова С.Г., Попов А.А.*
ПОЛУЧЕНИЕ ХЛОРСОДЕРЖАЩЕГО ДИЕНОВОГО КАУЧУКА МЕТОДОМ МЕХАНОХИМИЧЕСКОЙ ГАЛОИДНОЙ МОДИФИКАЦИИ, ИНИЦИИРОВАННОЙ ДАВЛЕНИЕМ НАБУХАНИЯ 138

Пучков А.А., *Седуш Н.Г.*
ЗВЕЗДООБРАЗНЫЕ БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ЛАКТИДА ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ 139

Пучкова Ю.А., *Иваненко А.Д., Седуш Н.Г.*
ОРГАНОКАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ЛИНЕЙНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ НОСИТЕЛЕЙ ПРОТИВОРАКОВЫХ ПРЕПАРАТОВ 139

Равчеева Е.А., *Калягин А.А., Антина Л.А.*
МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ АГЕНТЫ BIS(BODIPY) 140

Розов Т.П., *Отлётов А.А., Миненков Ю.В.*
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ГИББСА СОЛЬВАТАЦИИ КАТИОНА NA^+ В ДМСО ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ 141

Романенко Н.Р., *Фараонов М.А., Конарев Д.В.*
СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ АНИОН-РАДИКАЛЬНЫХ И ДИАНИОННЫХ СОЛЕЙ ТРАНС-ПЕРИНОНА 141

Рощин Д.Е., *Патлажан С.А.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В МИКРОКАПЛЕ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ НА ПОВЕРХНОСТИ 142

Рулев А.А., *Кондратьева Е.О.*
МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ НЕСТАБИЛЬНОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ЛИТИЯ 143

Рупасов А.Е., *Данилов П.А., Смирнов Н.А., Кудряшов С.И., Заколдаев Р.А.*
ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР В ОБЪЕМЕ И НА ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИКОВ 144

Садыков И.А., *Авдеев К.А., Аксенов В.С., Фролов С.М., Шамшин И.О.*
НОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ПРЯМОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ТОПЛИВА В КИНЕТИЧЕСКУЮ ЭНЕРГИЮ ДВИЖЕНИЯ ЗАБОРТНОЙ ВОДЫ 144

Сайфулина К.Э., *Белова Е.М., Филюшкина В.И., Гамалея А.А., Томский А.А., Седов А.С.*
БЕТА-АКТИВНОСТЬ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА ПРИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА 145

Салимзаде Э.А.О., *Ермилова Т.С.*
ГОРМОНАЛЬНЫЕ ПРЕДИКТОРЫ ДИСПЕПСИИ У НОВОРОЖДЕННЫХ ТЕЛЯТ 146

Санькова М.В., *Николенко В.Н.*
КЛЕТКИ ПАНЕТА – УНИКАЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРИЯ МНОГОЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧИМЫХ БИОХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ 147

Сафандеев В.В.
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ И АЛГОРИТМ СОЗДАНИЯ МОДЕЛИ ПОДОПЫТНЫХ ЖИВОТНЫХ В НАУЧНЫХ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ 147

Седова Ю.К., *Шерстнева А.А., Минаева Е.Д., Минаева С.А., Минаев Н.В., Демина Т.С.*
ПОЛИМЕРНЫЕ БИОСОВМЕСТИМЫЕ ГИБРИДНЫЕ МИКРОЧАСТИЦЫ ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНО-СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЕКАНИЯ 148

Селимов Д.А., *Гюлахмедов Р.Р., Рабаданова А.А., Шуайбов А.О., Абдурахманов М.Г., Собола Д.С., Касткова К., Рамазанов Ш.М., Оруджев Ф.Ф.*
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ 149

Семкина А.С., *Бакеева И.В., Кузнецов Н.М., Крашенинников С.В.*
СВОЙСТВА НОВЫХ ГИБРИДНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА 150

Сенотрусова С.А., *Ахметова А.И., Яминский И.В.*
МИКРОЛИНЗОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ ФИЗИКИ, БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЫ 150

Сергеев А.В., *Кондратьева Е.*
АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОДИФФУЗИИ ЛИТИЯ НА ГРАНИЦАХ ЗЁРЕН 151

Сергеев Е.П., *Атрошенко Д.Л., Шеломов М.Д., Савин С.С., Тишков В.И.*
ВЛИЯНИЕ PH НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ОКСИДАЗЫ D-АМИНОКИСЛОТ ИЗ ДРОЖЖЕЙ OGATAEA PARAPOLYMORPHA DL-1 152

Сергомасова А.А.
ИОННАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ 152

Сидоров Е.А., *Мухина И.В.*
ОРИЕНТИРОВАННАЯ КОНЪЮГАЦИЯ ГИДРОФИЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С АНТИТЕЛАМИ К ВИРУСУ SARS-COV-2 153

Синенко Г.Д., *Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.*
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАНОНА-2 154

Смальченко Д.Е., *Титов Е.Н., Лебедева О.Е.*
СЛОИСТЫЕ ДВОЙНЫЕ ГИДРОКСИДЫ КАК МАТРИЦА ДЛЯ СТАБИЛИЗАЦИИ КАТИОНОВ FE (II) 154

Смирнова Д.Н., *Алексеева О.В., Носков А.В.*
БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ И СВОЙСТВА КОМПОЗИТА ГАЛЛУАЗИТ/МАГНЕТИТ 155

Смыковская Р.С., *Кузнецова О.П., Прут Э.В.* .....
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ ПОЛИЭТИЛЕН/КЕРАТИН, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ 155

Соборнова В.В., *Белов К.В., Ходов И.А.*
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОЛЕЙ КОНФОРМЕРОВ МЕФЕНАМОВОЙ КИСЛОТЫ ПРИ ПОМОЩИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР 156

Советников Т.О., *Яминский И.В.*
СКАНИРУЮЩАЯ КАПИЛЛЯРНАЯ МИКРОСКОПИЯ 157

Сокол М.Б., *Яббаров Н.Г., Моллаева М.Р., Чиркина М.В., Никольская Е.Д.*
ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА НОВОЙ НАНОСОМАЛЬНОЙ ФОРМЫ ПАКЛИТАКСЕЛА 157

Соколова Е.М., *Дубенская Н.А., Психа Б.Л., Нешев Н.И.*
КИНЕТИКА ОКСИДАТИВНОГО ГЕМОЛИЗА ЭРИТРОЦИТОВ ИНИЦИИРУЕМОГО ТРЕТ-БУТИЛГИДРОПЕРОКСИДОМ 158

Сопова Н.С., *Шахов А.М., Астафьев А.А., Боченков В.Е.*
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОДВИЖНОСТИ ЗЕЛЕНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА С ПОМОЩЬЮ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ФОТОКОНВЕРСИИ 159

Антипова А.П., ***Сорокин А.В.,*** *Лавлинская М.С.*
ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ГРАФТ-СОПОЛИМЕРОВ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА 159

Стамер К.С., *Пигалёва М.А., Пестрикова А.А., Николаев А.Ю., Абрамчук С.С., Галлямов М.О.*
СПЕЦИАЛЬНЫЕ СРЕДЫ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ CO_2 ДЛЯ СОЗДАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ 3D-МОРФОЛОГИЙ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И МЕДИ 160

Степаненко С.А., *Гуляева Ю.К., Алексеева М.В. и Коскин А.П.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНА **161**

Степанова Х.С., *Ларионов К.В., Сорокин П.Б.*
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЯ, УСИЛЕННОГО СВЕРХТОНКИМИ АЛМАЗНЫМИ ПЛЕНКАМИ (ДИАМАНОМ): AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ **161**

Степанов И.Г.
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ИОНОВ В ТРОПОСФЕРЕ: ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ И ПРИЛОЖЕНИЯ **162**

Стрыканова В.В., *Виноградов В.В.*
РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОРОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЁРТЫВАЕМОСТИ КРОВИ **163**

Студеникина Л.Н.
РАЗРАБОТКА КОМПОСТИРУЕМЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА **164**

Ступникова Г.С., *Кузин А.А., Пеков С.И., Попов И.А.*
РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОЛИ ФОСФОРИЛИРОВАННОГО БЕТА-АМИЛОИДА В ОБРАЗЦЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ MALDI-TOF МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ **164**

Суханова Е.В., *Квашнин А.Г., Чепкасов И.В., Захарян А.А., Квашнин Д.Г., Попов З.И.*
НЕОЖИДАННЫЕ ДВУМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ **165**

Сызганцева М.А.
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ В МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ **166**

Сыромятников А.Г., *Кудряшов С.А., Клавсюк А.Л., Салецкий А.М.*
СОЗДАНИЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК С ПОМОЩЬЮ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ **166**

Тамбура М., *Гостева Е.А.*
ОБЗОР ИНКАПСУЛАНТОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ ПАНЕЛЕЙ **167**

Тельная Е.А., *Михайлец Э.С., Чернышев Д.А., Плотникова Л.В., Гарифуллин А.Д., Волошин С.В., КувшиновА.Ю., Поляничко А.М.*
ФУРЬЕ-ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ БЕЛКОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ БОЛЬНЫХ МНОЖЕСТВЕННОЙ МИЕЛОМОЙ **168**

Тимаков И.С., *Гребенев В.В., Коморников В.А.*
ПРОТОНПРОВОДЯЩИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОВ СУПЕРПРОТОННИКОВ **168**

Тимофеева В.В., *Лебедева О.Е.*
ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРИМОСТИ И СКОРОСТИ РАСТВОРЕНИЯ ФУМАРОВОЙ КИСЛОТЫ В СОСТАВЕ ТВЁРДЫХ ДИСПЕРСИЙ С ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯМИ И ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНАМИ **169**

Тимченко А.С., *Филюшкина В.И., Белова Е.М., Гамалея А.А., Томский А.А., Седов А.С.*
ФАЗОВО-АМПЛИТУДНАЯ МОДУЛЯЦИЯ В ЛОКАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ СУБТАЛАМИЧЕСКОГО ЯДРА ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА **170**

Толстолужинская А.Е., *Басалова Н.А., Карагяур М.Н., Еремичев Р.Ю., Ефименко А.Ю.*
ВЫЯСНЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ УЧАСТИЯ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТРОМАЛЬНЫХ КЛЕТОК В РЕГУЛЯЦИИ ДИФФЕРЕНЦИРОВКИ ФИБРОБЛАСТОВ **170**

Торкунов М.К., *Шиянова К.А., Гудков М.В., Гулин А.А., Рывкина Н.Г., Баженов С.Л., Мельников В.П.*
ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ, НАПОЛНЕННЫХ ГРАФЕНОМ, МНОГОСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ИХ СМЕСЯМИ **171**

Трифанова Е.М., *Акасов Р.А., Кошелев А.В., Попов В.К.*
БИОСОВМЕСТИМОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФОТОАКТИВНЫХ ПОЛИЭФИРНЫХ МАТРИКСОВ ДЛЯ ТКАНЕИНЖЕНЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ **172**

Тюбаева П.М., *Ольхов А.А., Лобанов А.В.*
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ДОБАВОК НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НЕТКАНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-3-ГИДРОКСИБУТИРАТА 172

Фараонов М.А., *Конарев Д.В.*
КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ ВОССТАНОВЛЕННЫХ МЕТАЛЛОФТАЛОЦИАНИНОВ И РОДСТВЕННЫХ ИМ МАКРОЦИКЛОВ 173

Фархутдинова Д.А., *Боченкова А.В.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТА-ХРОМОФОРА ЗЕЛЕНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА 174

Фатихова Л.Р., *Галимзянов Б.Н.*
УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ В КИНЕТИКЕ ПЛАВЛЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 174

Фетисова В.Э.
ВЛИЯНИЕ ВКЛЮЧЕНИЯ ФАКТОРОВ РОСТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВУХСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ КОЖНЫХ ПОКРОВОВ 175

Филатова Е.В., *Лобанов А.В.*
МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ БИОЛОГО-ХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ 176

Фомина Ю.С., *Загоскин Ю.Д., Григорьев Т.Е., Чвалун С.Н.*
ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ТРОЙНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ С АМОРФНЫМ ГИДРОФОБНЫМ БЛОКОМ P(D,L)LA-PEG-P(D,L)LA 177

Фомичёв И.А., *Винник Д.А., Давыдова Г.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И БИОСОВМЕСТИМОСТЬ ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ 178

Фролкина М.А., *Аветисов В.А.*
ЛОКАЛЬНАЯ БИСТАБИЛЬНОСТЬ И СИНХРОНИЗАЦИЯ В МОДУЛЬНЫХ СЕТЯХ 178

Хао У., *Молчанов В.С., Филиппова О.Е.*
КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ СМЕШАННЫХ ЧЕРВЕОБРАЗНЫХ МИЦЕЛЛ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ 179

Хворостина М.А., *Бухарова Т.Б., Попов В.К.*
ТРЕХМЕРНАЯ КРИОПЕЧАТЬ ГЕН-АКТИВИРОВАННЫХ МАТРИКСОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ КОСТНОЙ ТКАНИ 179

Хрушкова Ю.В., *Шорохова Т.В., Иванова Ю.Б., Пуховская С.Г., Плотникова А.О., Сырбу С.А.*
СПЕКТРАЛЬНЫЕ, КООРДИНАЦИОННЫЕ И ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НЕСИММЕТРИЧНО-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТЕРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ 180

Церковная К.М., *Флисюк Е.В., Шабров В.Н.*
ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ НА КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕЕ МЕТАБОЛИТА МЕТОДОМ ВЭЖХ-МС/МС 181

Цыганков А.А., *Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.*
ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В АМОРФНОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА 182

Чернышов М.П., *Мелихова Д.О., Алексеев В.И., Черняк Д.М., Мамед-Набизаде В.В., Майборода А.Д., Сивачев А.А., Волков П.В., Полевова С.В., Брейгина М.А.*
ИССЛЕДОВАНИЕ СПОРОПОЛЛЕНИНА ПЫЛЬЦЫ CORYLUS AVELLANA L., КАК ПЕРСПЕКТИВНОГО НАНОМАТЕРИАЛА 183

Чувашкин С.И., *Романенко Г.А., Кошелев А.Д., Гомзяк В.И.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ВИНИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ В ПРИСУТСТВИИ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ 183

Чудаков Е.А.
ТЕОРЕМА ВЗАИМНОСТИ ДЛЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ 184

Чуешова А.Г., *Пещерова С.М., Осипова Е.А., Аршинский В.Л., Шишкин Д.В., Кузнецов А.А.*
АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ОРИЕНТАЦИИ ЗЁРЕН В МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ 184

Шагурин А.Ю., *Иванова М.А., Погонин А.Е., Марфин Ю.С.*
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ШИРОКОГО РЯДА БОРФТОРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДИПИРРИНА И АЗА-ДИПИРРИНА 185

Шамарина Е.В., *Шамраева М.А., Пеков С.И., Попов И.А.*
МЕТОДИКА КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ ПРИ ПОМОЩИ ПРЯМОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРИСТЫХ ПРОБООТБОРНИКОВ 186

Шамраева М.А., *Пеков С.И., Елиферов В.А., Даничкина К.В., Силкин С.В., Бочаров К.В., Попов И.А.*
КУМУЛЯТИВНОЕ ВЛИЯНИЕ КАТИОНИЗАЦИИ В СОЧЕТАНИИ С СУБЛИМАЦИЕЙ/ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ MALDI МАТРИЦЫ ПРИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЛИПИДОВ 187

Шибаева В.Д., *Агафонов А.В.*
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОНОПРОВОДЯЩИХ ИОНОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ: ИОННАЯ ЖИДКОСТЬ/ГЛИНА/МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ ЦЕЛЛЮЛОЗА 187

Шишханова К.Б., *Молчанов В.С., Филиппова О.Е.*
ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА НАНОТРУБОК НА СВОЙСТВА СУСПЕНЗИИ С МИЦЕЛЛЯРНЫМИ ЦЕПЯМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА 188

Шиянова К.А., *Торкунов М.К., Гудков М.В., Рывкина Н.Г., Гулин А.А., Баженов С.Л., Мельников В.П.*
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УГЛЕРОДНЫХ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ НА СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ 189

Шокова М.А., *Боченков В.Е.*
ЭФФЕКТИВНОСТЬ УСИЛЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ АНИЗОТРОПНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ С НЕСКОЛЬКИМИ ПЛАЗМОННЫМИ МОДАМИ ПРИ ДВУХФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ 189

Шпотя В.А., *Перепухов А.М., Пучкова Ю.А., Гомзяк В.И., Седуш Н.Г., Чвалун С.Н., Максимычев А.В.*
МЕТОДЫ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ И ДИФФУЗИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР В ОПРЕДЕЛЕНИИ СТРОЕНИЯ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ 190

Шуайбов А.О., *Рабаданова А.А., Селимов Д.А., Абдурахманов М.Г., Гюлахмедов Р.Р., Смейкалова Т.Б., Собола Д.С., Касткова К., Рамазанов Ш.М., Оруджев Ф.Ф.*
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОВОЛОКОННОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПВДФ/BCZT 191

Юркова А.Ю., *Жердева В.В., Малошенок Л.Г., Богданов А.А. мл.*
СРАВНЕНИЕ МЕТАБОЛИЧЕСКОЙ И ПРОЛИФЕРАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ КЛЕТОК АДЕНОКАРЦИНОМЫ ГОРТАНИ И ЕЕ КЛОНОВ, ЭКСПРЕССИРУЮЩИХ ГЕННОИНЖЕНЕРНЫЕ БЕЛКИ 191

Калугин И.М., Жукова О.А., Лукина М., Южакова Д.В., ***Юсубалиева Г.М.***
ИССЛЕДОВАНИЕ ИММУННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА 3D МОДЕЛИ ГЛИОБЛАСТОМЫ 192

Яковлев А.Н., *Грицкова А.В., Ублинский М.В., Манжурцев А.В., Ахадов Т.А., Семенова Н.А.*
ДИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕТАБОЛИТОВ И КРИВАЯ BOLD ОТВЕТА НА КОРОТКИЙ ЗРИТЕЛЬНЫЙ СТИМУЛ, ИЗМЕРЕННЫЕ ПРИ ПОМОЩИ 1H-МРС 193

Яруллин Д.Т., *Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.*
ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 193

Яхина А.Р., *Жорина Л.А., Роговина С.З., Иорданский А.Л.*
ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ АБСОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА, ПОЛИГИДРОКСИБУТИРАТА И ХИТОЗАНА 194

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ 196



ФИЦ ХФ РАН