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

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

XII ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ МОЛОДЕЖНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ

«ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ»

Москва
14–16 октября 2026 года

УДК 50(063)
ББК 2я431

Сборник тезисов докладов XII Всероссийской научной молодежной школы-конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции», 14–16 октября 2026 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 ….., 2026. — 316 с.

ISBN 978-5-

В сборнике тезисов представлены материалы ***XII Всероссийской молодежной школы-конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции»***, проведенной Советом молодых ученых ФИЦ ХФ РАН 14–16 октября 2026 года в г. Москве. Освещаются результаты междисциплинарных исследований, охватывающих такие тематики, как высокомолекулярные соединения, функциональные и композиционные материалы, химию и технологию функциональных материалов, современные методы для исследования материалов, химическую физику, химическую кинетику и катализ, горение и взрыв, термодинамику, гидродинамику, газодинамику, физику атмосферы и гидросферы, биохимию, биофизику, биотехнологию, биомедицину, биомедицину и технологии для терапии и диагностики, разработку лекарственных препаратов и математическое и компьютерное моделирование. Представленные работы получены студентами, аспирантами и молодыми учеными академических институтов, ВУЗов и научно-исследовательских организаций.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель	Иким Мария Ильинична	с.н.с., к.ф.-м.н.
Ученый секретарь	Веденкин Александр Сергеевич	н.с.
Члены оргкомитета	Басакина Светлана Сергеевна	н.с., к.ф.-м.н. м.н.с.
	Гаврюшова Варвара Дмитриевна	м.н.с.
	Горбатова Виктория Николаевна	м.н.с.
	Демина Варвара Анатольевна	с.н.с., к.ф.-м.н.
	Зубачева Екатерина Константиновна	с.н.с., к.ф.-м.н.
	Курьянова Анастасия Сергеевна	н.с., к.х.н.
	Мельников Игорь Никитич	м.н.с.
	Мощенков Андрей Дмитриевич	м.н.с.
	Назарова Амина Аликовна	м.н.с.
	Осыченко Алина Анатольевна	с.н.с., к.б.н.
	Отлетов Арсений Андреевич	м.н.с., к.х.н.
	Садыков Ильяс Александрович	с.н.с., к.ф.-м.н.
	Сиротин Максим Андреевич	м.н.с.
	Смыковская Регина Сергеевна	н.с., к.х.н.
	Филюшкина Вероника Игоревна	н.с., к.б.н
	Шершнев Илья Валерьевич	с.н.с., к.х.н.
	Шиянова Ксения Алексеевна	с.н.с., к.х.н.



УВАЖАЕМЫЕ КОЛЛЕГИ!

XII Всероссийская молодежная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции» проходила **с 14 по 16 октября 2026 года** в г. Москва на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН). Конференция была приурочена к двум знаковым историческим датам — 95-летию со дня образования Института Химической Физики и 70-летию получения Нобелевской премии по химии Николаем Николаевичем Семеновым. Организатором конференции выступил Совет молодых ученых ФИЦ ХФ РАН при поддержке Фонда развития химической физики, компании Триалог и Первичной профсоюзной организации ИХФ РАН.

Целью проведения молодежной школы конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции» является развитие научного потенциала молодых ученых и формирование инновационной среды для междисциплинарных научных исследований в области материалов, физико-химических процессов, биологии и математического моделирования.

Конференция направлена на решение следующих ключевых задач: создание платформы для обмена знаниями и опытом между молодыми учеными, работающими в различных областях науки, с акцентом на междисциплинарное взаимодействие; развитие компетенций в области исследования новых материалов, включая их синтез, изучение структуры и свойств, а также практическое применение полученных результатов; продвижение современных подходов к изучению физико-химических процессов и их применению для решения актуальных научных и технологических проблем; укрепление связей между фундаментальной и прикладной биологией, химией, физикой и медициной для развития инновационных подходов к решению биологических и медицинских задач; развитие методов математического и компьютерного моделирования как инструмента для проведения междисциплинарных исследований и получения новых научных результатов.

ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ

ФИЦ ХФ РАН

Данная конференция призвана стать значимой площадкой для развития научного сотрудничества между молодыми учеными, способствующего развитию научных связей и коллабораций между исследовательскими группами, обмена инновационными идеями и формирования новых исследовательских направлений на стыке различных научных дисциплин.

Организаторы конференции выражают благодарность пленарным докладчикам: Шевалеевскому Олегу Игоревичу, Ягофарову Михаилу Искандеровичу, Молчанову Вячеславу Сергеевичу, Холявке Марине Геннадьевне, Бочарову Эдуарду Валерьевичу, Хреновой Марии Григорьевне и Павлову Александру Александровичу. Организационный комитет выражает благодарность всем участникам молодежной школы конференции за интересные доклады и активное участие.

Сборник тезисов выпущен по итогам работы школы-конференции, при его издании проведено только техническое редактирование представленных материалов без изменения сущности научных текстов. Ответственность за научное содержание материалов несут авторы.

1. **ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ.**
2. **СЕКЦИЯ «МАТЕРИАЛЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ»**
3. **СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ БИОЛОГИЯ: ОТ ХИМИИ И ФИЗИКИ К МЕДИЦИНЕ»**
4. **СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»**

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ГИББСА (ΔG = ΔH — TΔS) ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ

Ягофаров М.И.[1], Соломонов Б.Н.[1]

[1] Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, MilYagofarov@kpfu.ru

Уравнение Гиббса является одним из наиболее используемых соотношений в химической термодинамике. Тем не менее, долгое время остается предметом дискуссий вопрос о существовании дополнительных соотношений между изменениями энергии Гиббса (Δ*G*), энтальпии (Δ*H*) и энтропии (Δ*S*) в сериях физико-химических процессов. В настоящей работе на основе систематизации массива экспериментальных данных (более 5000 измерений) нами был проведен количественный анализ взаимосвязи Δ*G* и Δ*H* для процессов межфазного распределения и комплексообразования [1, 2]. Проведенная классификация систем «растворенное вещество — растворитель» с учетом их склонности к водородному связыванию позволила обобщить характер взаимосвязи Δ*G* и Δ*H* в термодинамике сольватации и испарения и вывести соотношения между этими параметрами для процессов водородного связывания и образования комплексов с переносом заряда в растворе и газовой фазе. Для рассмотренных процессов взаимосвязь термодинамических функций подчиняется общему выражению:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S(\text{comp}) - T\Delta S(\text{noncomp}) = 0{,}660 \cdot \Delta H - T\Delta S(\text{noncomp}),$$

где Δ*S*(comp) и Δ*S*(noncomp) — компенсированный и некомпенсированный (не зависящий от энтальпии) вклады в энтропию, причем величина *T*Δ*S*(comp) составляет 0,34Δ*H*. Примечательно, что данное выражение остается неизменным независимо от природы межмолекулярных взаимодействий (парных, коллективных, ван-дер-Ваальсовых, специфических) и структуры взаимодействующих молекул. Обобщение обширного экспериментального материала, охватывающего разнообразные процессы, классы соединений и типы взаимодействий, позволяет сделать вывод, что выявленные закономерности следует рассматривать как фундаментальную особенность, присущую межмолекулярным взаимодействиям органических неэлектролитов.

Исследование выполнено за счёт средств гранта Российского научного фонда (проект № 26-73-10127).

Список использованной литературы

1. Solomonov B.N., Yagofarov M.I. // J. Mol. Liq. 2025, 424, 127053.
2. Sokolov A.A., Khisamiev M.B., Solomonov B.N., Yagofarov M.I. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2025, 27, 26139–26151.

ЭВОЛЮЦИЯ САМОСОБИРАЮЩИХСЯ СЕТЧАТЫХ СТРУКТУР И ПЕРФОРИРОВАННЫХ ВЕЗИКУЛ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Молчанов В.С., Хао У., Филиппова О.Е.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет,
molchan@polly.phys.msu.ru

Образование мицеллярных агрегатов в водных растворах и изменения в их морфологии имеют решающее значение для многочисленных практических применений поверхностно-активных веществ (ПАВ) от бытовой химии и нефтедобычи до направленной доставки лекарств. Тем не менее, структурные переходы в сложных самособирающихся системах остаются малоизученными. Переход от сферических к цилиндрическим агрегатам ПАВ хорошо изучен как теоретически, так и экспериментально. В то же время превращение цилиндров в бислои или везикулы изучено гораздо меньше. Теоретические работы предсказывают, что переход от цилиндрических (червеобразных) мицелл к везикулам может происходить по мере увеличения параметра молекулярной упаковки через формирование промежуточных форм агрегатов: насыщенной сетки и перфорированных везикул, которые в итоге превращаются в обычные везикулы с гладкой поверхностью. Хотя переход был предсказан теоретически, он не был обнаружен экспериментально.

В данной работе впервые была обнаружена и изучена эволюция агрегатов ПАВ: линейные червеобразные мицеллы → разветвленные червеобразные мицеллы → насыщенные сетки → перфорированные везикулы — везикулы [1]. Обнаружено, что преобразования происходят за счет увеличения числа точек ветвления, содержащих участок бислоя, и уменьшения доли цилиндрических субцепей и полусферических торцевых частей. Перфорированные везикулы были обнаружены при условиях, когда длина субцепей стала намного короче персистентной длины, в результате чего трехмерная структура трансформировалась в двумерную. Впервые показано, что насыщенные сетки и перфорированные везикулы образованы одинаковыми структурными элементами — трехфункциональными сшивками и цилиндрическими субцепями, имеющими широкое распределение по длинам.

Список использованной литературы

1. W. Hao, Y. M. Chesnokov, V. S. Molchanov, P. R. Podlesniy, A. I. Kuklin, V. V. Skoi, and O.
2. E. Philippova, —Cryo-electron tomography study of the evolution of wormlike micelles to saturated networks and perforated vesicles, Journal of Colloid and Interface Science, vol. 672, pp. 431–445, 2024.

ОТ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРОГНОЗА К ЭФФЕКТИВНОМУ БИОКАТАЛИЗАТОРУ. ИММОБИЛИЗАЦИЯ ФЕРМЕНТОВ: ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Холявка М.Г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет», Воронеж, holyavka@rambler.ru

Современная молекулярная биофизика все активнее смещает фокус на изучение способов модуляции активности ферментов, в том числе путем иммобилизации их молекул. Ключевой драйвер этого интереса — экономическая эффективность гибридных биокатализаторов: гетерогенный режим (молекулы ферменты закреплены на нерастворимом носителе) на порядок выгоднее гомогенного с точки зрения промышленного масштабирования, поскольку существенно упрощает и удешевляет производственный цикл.

В последние десятилетия на смену эмпирическому перебору пар «фермент-носитель» приходит принципиально иная стратегия. Интеграция компьютерного и математического моделирования в алгоритмы изучения влияния реального микроокружения на активность ферментов позволяет не только сократить затраты на скрининг иммобилизационных агентов и раскрыть механизмы процесса, но и выйти на уровень направленного конструирования материалов — лигандов, подложек, сшивок. Чтобы создать востребованный препарат, исследователю уже недостаточно классической биофизики: ему необходимо владеть арсеналом теоретических расчетных методов — от квантовой химии и полноатомной молекулярной динамики до гибкого докинга, прогнозирования биологической активности и высокопроизводительного виртуального скрининга.

Наш коллектив последовательно реализует этот подход. К настоящему моменту мы детально охарактеризовали физико-химические, кинетические и структурно-функциональные особенности инулиназ и трех цистеиновых протеаз — бромелина, папаина и фицина — в разных микроокружениях. В сравнительном аспекте были проанализированы способы регуляции активности этих гидролаз, дана оценка гетерогенным препаратам на основе иммобилизованных ферментов и намечены пути их практического применения.

Мы убедительно показали, что иммобилизация — это один из самых действенных инструментов регуляции и стабилизации активности изученных гидролаз. В то же время мы констатируем: универсального метода иммобилизации не существует — у каждого свои сильные и слабые стороны. Выбор конкретного подхода диктуется исключительно задачами исследования и целевым применением ферментного препарата в науке или производстве.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 25–74-20024.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ФИЗИЧЕСКИ ОБОСНОВАННЫЕ МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ПРОЦЕССОВ В БИОМАКРОМОЛЕКУЛАХ

Хренова М.Г.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет

В докладе будет обсуждаться совместное применение методов искусственного интеллекта и молекулярного моделирования для анализа механизмов ферментативных реакций, фотофизических и фотохимических процессов.

Будет рассмотрен пример применения нейросетевых моделей для прогнозирования профилей субстратной специфичности гидролаз. Показано как модели машинного обучения позволяют детализировать механизмы ферментативных реакций из анализа динамического поведения фермент-субстратного комплекса. В этих моделях критерии реакционной способности определяются через дескрипторы электронной плотности.

Будет продемонстрировано построение модели машинного обучения, использующей геометрические характеристики хромофора и его ближайшего окружения в основном электронном состоянии, а также квадратичный эффект Штарка для определения положения максимума полосы поглощения флуоресцентного белка.

ХЕМОИНФОРМАТИКА: ТЕКУЩИЕ ВЫЗОВЫ И ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ

Павлов А.А.

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

Одной из основополагающих задач химической науки является разработка новых химических процессов, веществ и материалов. Для успешного осуществления данной научной деятельности необходимо учитывать в работе все известные данные, как минимум, в рамках исследуемого направления. Сегодня, в цифровую эпоху, объем доступной информации кратно превышает возможности человека или даже целой научной группы. Технологии искусственного интеллекта (ИИ) в химии выполняют единственную задачу — дают возможность охватить и учесть в исследованиях большой объем научных данных.

Однако к настоящему моменту не наблюдается систематического внедрения методов ИИ в химической науке и производстве, что обусловлено рядом барьеров, определяемых сложностью и спецификой предметной области. Свойства вещества определяются не только его структурой, но и условиями эксперимента, включая состав среды, режим синтеза и морфологию образца. Упрощенная схема «структура-свойство», доминирующая в открытых базах данных, теряет такие переменные, и их вариация становится неотличимой от экспериментального шума. В докладе на примере экстракционных систем редких металлов показано, что прогресс в области определяется прежде всего качеством данных и корректностью процедур оценки, а не усложнением архитектуры моделей.

Отдельно обсуждается вопрос о границах применимости моделей. Согласно распространенной практике, объект относят к области доверия при его структурной близости к обучающей выборке, например по коэффициенту сходства Танимото. Проведенный анализ показывает, что такая близость слабо упорядочивает фактическую ошибку. Структурно похожие соединения нередко предсказываются неверно, тогда как удаленные от обучающей выборки могут получать точную оценку. Частота встречаемости структурного фрагмента в обучающих данных также не служит надежным индикатором качества. Более информативна собственная оценка неопределенности модели, если ее калибровка проверена на удержанных данных сопоставлением заявленной неуверенности с реальной ошибкой.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта №075-15-2025-584).

СЕКЦИЯ
«МАТЕРИАЛЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ»

ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ЖЕСТКОЙ И МОБИЛЬНОЙ АМОРФНОЙ ФРАКЦИЙ В ФОРМИРОВАНИИ СВОЙСТВ ПОЛУКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛИГИДРОКСИАЛКАНОАТОВ

Тюбаева П.М.[1,2], ***Ольхов А.А.***[1,2], ***Попов А.А.***[1,2]

[1] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, Москва, polina-tyubaeva@yandex.ru*

[2] *Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва*

Сегодня большой интерес представляет создание новых материалов на основе биоразлагаемых и биосовместимых полимеров. Полигидроксиалканоаты (ПГА) являются перспективным классом полиэфиров бактериального происхождения, удовлетворяющих этим требованиям [1]. Несмотря на значительную интерес большого числа научных коллективов к ПГА, открытыми остаются вопросы, связанные с надмолекулярной структурой этих высокомолекулярных соединений. Вопрос о сущности полукристаллической природы ПГА, а также о свойствах, которые определяются соотношением жесткой аморфной фракции (Rigid amorphous fraction, RAF), мобильной аморфной фракции (Mobile amorphous fraction, MAF) и кристаллической фазы остается открытым [2].

Целью данной работы было исследование структуры RAF и MAF ПГА с различной степенью развития поверхности, а также установление роли RAF в формировани ключевых эксплуатационных характеристик ПГА. Исследование надмолекулярной структуры полимера проводились комплексов методов ТГА, ДСК, ЭПР, РСА.

Полученные в работе результаты позволили установить, что метод выработки, а также степень развития поверхности существенно влияют на соотношение RAF и MAF в аморфнйо фазе ПГА. Кроме того, площадь поверхности влияет на возможность мобилизации RAF, так как определяет наличие напряженных жестких цепей, формирующих ее. С ростом площади поверхности возрастает число напряженных участков полимерной цепи, входящих в RAF, что выражается в изменении формы и характера смещения пиков плавления и холодной кристаллизации на ДСК.

Список используемой литературы

1. Muhammadi S., Afzal M., Hameed S. // *Letters and Reviews*, 2015, №8. P. 56-77.
2. Di Lorenzo M.L., Gazzano M., Righetti M.C. // *Macromolecules,* 2012, V. 45, №14. P. 5684–5691.

КИНЕТИЧЕСКИЙ АСПЕКТ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ ЛИНЕЙНЫХ ДИПЕПТИДОВ: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ДИПЕПТИДА НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ

Миргазиева Э.Р., Зиганшин М.А.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань,
mirgazieva02@mail.ru

Циклические дипептиды, или производные 2,5-дикетопиперазинов (ДКП) обладают антибактериальными, противовирусными, антималярийными, нейропротекторными свойствами, способны преодолевать гематоэнцефалический барьер, а также применяются в качестве противодиабетических препаратов, противогрибковых и противораковых агентов. Наноструктуры, полученные в результате их самосборки и самоорганизации, могут использоваться в качестве оптических волноводов, высокопрочных материалов, микрофлюидных устройств, наногенераторов, систем сбора и хранения энергии. Активное применение циклических дипептидов в различных областях определяет актуальность задач по разработке методов их синтеза.

Известными методами получения производных ДКП являются выделение из биологических объектов и синтез в растворе, в частности, под действием микроволнового излучения или с использованием твердой подложки. Однако стоить отметить, что такие методы являются трудоемкими, многостадийными и требуют выделения и очистки конечного продукта. Альтернативой перечисленным методам является синтез ДКП в твердой фазе. Вместе с тем, следует отметить, что метод твердофазного синтеза на сегодняшний день изучен недостаточно. Исследователи сталкиваются с рядом проблем, осложняющих изучение таких реакций: испарение воды из фазы дипептида, сублимация реагентов и циклических продуктов, термическая деструкция ДКП. Остаются малоизученными вопросы о влиянии последовательности аминокислотных остатков в молекуле дипептида на термические свойства и кинетические параметры твердофазной циклизации.

Поэтому в настоящей работе были изучены реакции циклизации ряда линейных дипептидов в твердой фазе при нагревании. Структуры продуктов твердофазных реакций были охарактеризованы комплексом физических и физико-химических методов. Были определены температуры начала реакций. С использованием методов изоконверсионной кинетики был проведен расчет кинетических параметров этих реакций, определены кинетические триплеты и кинетические модели, описывающие эти реакции. Проведен анализ влияния структуры линейного дипептида на кинетические параметры циклизации в твердой фазе.

Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2026-0026.

ПЛАЗМОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА/ХЛОРИН Е6: МОРФОЛОГИЯ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

***Кравчинский Д.М.*[1], Карцева М.Е.[1], Бычкова К.С.[2], Плужникова М.Е.[3], Ларкина Е.А.[3]**

[1] Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва, d.kravchinskiytron@gmail.com

[2] Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва

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

Фотодинамическая терапия является современным методом лечения онкологических заболеваний, эффективность которого определяется не только химической природой фотосенсибилизаторов (ФС), но и их локальным окружением, пространственным положением и способом организации в составе средств доставки. Перспективным подходом к управлению этими параметрами является использование в качестве носителей ФС плазмонных нанокомпозитов со структурой ядро/оболочка. Изменение размера и морфологии плазмонного ядра позволяет регулировать его оптические свойства, тогда как гидрофильная оболочка обеспечивает перенос водонерастворимых ФС в водную среду.

В работе исследованы композитные наночастицы (КНЧ) с золотым ядром и органокремнеземной оболочкой в качестве платформы для иммобилизации хлорина е6 (Се6). Синтезировано производное Се6 с малеимидной группой на периферии макроцикла. Получены КНЧ с золотым ядром и оболочкой различной толщины на основе γ-меркаптопропилтриметоксисилана. Разработан способ ковалентного конъюгирования Се6 с оболочкой по реакции тиол-малеимид.

Исследовано влияние плотности прививки Се6 к КНЧ на оптические характеристики конъюгатов. Оценено влияние расстояния между фотосенсибилизатором и поверхностью наночастицы, а также стерических эффектов, на фотофизические свойства малеимидных производных Се6 с линкерами различной длины (С2 и С8). Также изучено влияние длины волны возбуждения и толщины органокремнеземной оболочки на фотоактивацию Се6.

Оценено влияние формы ядра КНЧ с привитым Се6 на эффективность генерации им активных форм кислорода.

Работа выполнена по заданию Министерства науки и высшего образования РФ.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ПОЛИСАХАРИДА НА СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ИХ ОСНОВЕ

***Делич М.*[1], Ванчугова Л.В.[2], Горшкова М.Ю.[2], Кусков А.Н.[1]**

[1]ФГБОУ ВО Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, delichma@yandex.ru

[2] ФГБУН Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Актуальная задача химии \ полимеров медико-биологического назначения — создание современных полифункциональных материалов, в том числе гидрогелей. Перспективным путем решения этой задачи представляется синтез гибридных гидрогелей, что позволяет расширить функциональность итогового материала за счет сочетания свойств составляющих его компонентов. Синтез гибридных гидрогелей на основе альгината натрия (АЛГ) и ковалентно сшитых сополимеров диэтилакриламида (ДЭАА) с акриловой кислотой (АК) обеспечивает получение высоко набухающих гидрогелей, проявляющих термо- и pH-чувствительность [1]. Однако АЛГ не проявляет заметной биологической активности, в то время как хитозан (ХТЗ) обладает выраженным бактерицидным действием, что может быть использовано для повышения функциональности гелей. Цель настоящей работы заключалась в изучении влияния природы полисахарида на свойства гибридных гидрогелей на их основе. Гидрогели получали радикальной сополимеризацией ДЭАА с АК в присутствии сшивающего агента диакрилата ПЭГ13 и полисахаридов, отличающихся по типу функциональных групп — карбоксилатных АЛГ и амино- групп ХТЗ. Изучена кинетика сорбции воды и определены значения констант уравнения Фика, согласно которым сорбция гидрогелей с АЛГ характеризуется специфическим связыванием воды; а ХТЗ гелей — замедленной диффузией. Синтезированные гидрогели проявляли pH-чувствительность (значения равновесных степеней набухания гидрогелей в кислых средах 4 и 3; в воде 130 и 24; в слабо щелочных 146 и 120 для АЛГ и ХТЗ гелей соответственно); претерпевали температурные конформационные переходы при 47°C — АЛГ и 36°C — ХТЗ. Гидрогели различались по механической прочности — АЛГ выдерживали нагрузку до 30 КПа, а ХТЗ — не более 7 КПа. Выявленная разница в свойства гидрогелей определяется их морфологией, которая по данным СЭМ, является слоисто-сетчатой в случае АЛГ и плотными сетками в случае ХТЗ. Таким образом, показано, что природа полисахарида, входящего в состав гидрогеля определяет его морфологию и свойства. Полученные гидрогели могут быть использованы в качестве стимул-чувствительной основы систем доставки лекарств и материалов медицинского назначения.

Список используемой литературы

L.V. Vanchugova, M.V. Mironova, et al. Stimuli-sensitive superswellable alginate/ poly (N, N-diethylacrylamide co acrylic acid) hydrogels // Journal of Polymer Research, 2026, 33. 265.

ФОТОКОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АКРИЛАТНЫХ МОНОМЕРОВ, ИНИЦИИРУЕМАЯ КОМПЛЕКСАМИ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА

Бадюков В.А.[1], Левшуков А.А.[2], Гульник М.И.[1], Костюк С.В.[2]

[1]Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск

[2] Sorbonne Universite, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moleculaire, Equipe Chimie des Polymeres, 4 place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

Биоконъюгация — это химическое связывание двух молекул, одна из которых обладает биологической активностью. Примером реализации данного подхода являются конъюгаты типа биомолекула-полимер, нашедшие применение в медицине и биоаналитике.

Grafting-from является одним из подходов для синтеза такого рода конъюгатов, предполагающий использование биологически активной молекулы в качестве инициатора для полимеризации. Среди прочих методов полимеризации в таком случае выделяется фотоконтролируемая радикальная полимеризация, предполагающая мягкие условия реакции и предсказуемые молекулярно-массовые характеристики получаемого полимера [1]. Сложность осуществления grafting-from подхода заключается в необходимости предварительной многостадийной модификации субстрата для осуществления последующей полимеризации. В связи с этим, перспективными являются каталитические системы, позволяющие проводить полимеризацию с минимальной модификацией субстрата [1].

В настоящей работе предлагается каталитическая система, позволяющая применять производные карбоновых кислот, первичных аминов и спиртов (модификация в одну стадию) при помощи комплексов с переносом заряда (КПЗ) для инициирования «фотоинифертер» RAFT полимеризации в рамках grafting-from подхода. В результате были синтезированы полиакрилаты с узким ММР и практически полной (>99%) головной функционализацией полимерной цепи (Рис. 1) [2].

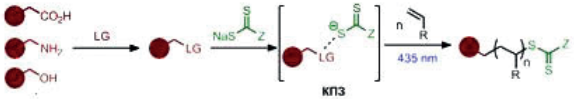


Рисунок 1. Предлагаемая каталитическая система [2]

Работа выполнена при поддержке государственной программы научных исследований «Химические процессы и технологии», 2026-2030 гг. (задание 2.1.01.01, № гос. регистрации 20261334)

Список используемой литературы

1. R. A. Olson et al, Chem. Sci. 11, 5142–5156, 2020.
2. Leushukou, A.A. et al, J. Am. Chem. Soc. 147, 38331–38340, 2025.

РАЗРАБОТКА КЛЕЕВЫХ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ СШИТОЙ ИЛИ ЛИНЕЙНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ С ТВЕРДЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ NASICON LATP

***Гильмиева Д.Р.**, Захарова Д.В., Гаянов Р.И., Визгалов В.А., Морозова С.М.*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, gilmieva.dr@phystech.edu

Твердые неорганические электролиты (ТНЭ) представляют собой перспективную замену жидким электролитам в литий-ионных аккумуляторах благодаря электрохимической стабильности, безопасности и высокой ионной проводимости до 10^{-3} См·см$^{-1}$ [1]. Однако у ТНЭ, типа керамики NASICON LATP, граничная проводимость падает до 10^{-5} См·см$^{-1}$, а также существует проблема деградации при длительном контакте с литием.

Целью данной работы стала разработка клеевого состава на основе полимерной матрицы для снижения межфазного сопротивления на границе ТНЭ NASICON LATP с литием и увеличения проводимости системы Li | клей | NASICON LATP | клей | Li (см. рисунок 1а) по сравнению с системой без клея. Такой состав ограничивает прямой контакт керамики с литием, при котором начинается деградация электролита. Задачами исследования стали синтез ион-проводящего мономера DADMATFSI и линейного полимера poly-DADMATFSI, изготовление клея на основе сшитого и линейного полимера с содержанием соли LiTFSI от 30 wt% до 60 wt%, измерение годографа импеданса электрохимических ячеек, расчет величин ионной проводимости и чисел переноса для всех полученных образцов.

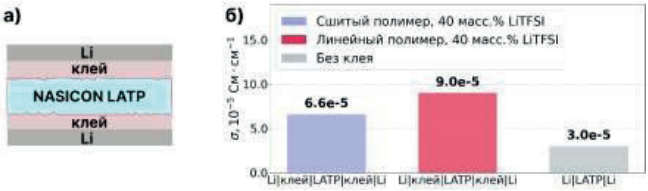


Рисунок 1. а) электрохимическая ячейка Li | клей | NASICON LATP | клей | Li, б) значения ионной проводимости для различных систем

Использование полимерного клея позволяет повысить ионную проводимость ячейки до $9.0 \cdot 10^{-5}$ См·см$^{-1}$ по сравнению с системой без ион-проводящего клея ($3.0 \cdot 10^{-5}$ См·см$^{-1}$) при комнатной температуре (см. рисунок 1б).

Данный проект был поддержан Министерством науки и высшего образования РФ (госзадание), проект № FSMG-2024-0046.

Список используемой литературы

1. Воропаева Д.Ю., Стенина И.А. и др. Твердые электролиты: на пути к повышению мощности литий-ионных аккумуляторов // Усп. хим., 2024, т. 93, вып. 6, RCR5126.

ВЛИЯНИЕ СУБСАЛИЦИЛАТА ВИСМУТА НА КИНЕТИКУ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ С РАСКРЫТИЕМ ЦИКЛА D,L-ЛАКТИДА И СВОЙСТВА ПОЛИ(D,L-ЛАКТИДА)

***Атаманова А.А.*[1], *Дмитряков П.В.*[2], *Седуш Н.Г.*[1]**

[1] *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, a.atamanova@ispm.ru*

[2] *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва*

Поли(D,L-лактид) представляет интерес для медицинских применений благодаря биосовместимости и способности к биодеградации. Традиционно полимеризацию лактида с раскрытием цикла проводят с использованием 2-этилгексаноата олова(II), обладающего высокой каталитической активностью. Однако потенциальная токсичность соединений олова стимулирует поиск альтернативных каталитических систем. В качестве перспективной альтернативы может служить субсалицилат висмута (BiSS), характеризующийся низкой токсичностью и рентгеноконтрастными свойствами.

В настоящей работе исследована полимеризация D,L-лактида в расплаве при 160 °C в присутствии субсалицилата висмута в концентрации 250–30000 ppm и изучено влияние содержания катализатора на кинетику реакции, молекулярно-массовые характеристики и термическую стабильность полученных поли(D,L-лактидов). Конверсию мономера определяли методом ^{1}H ЯМР. Установлено, что увеличение концентрации BiSS от 250 до 5000 ppm существенно ускоряет полимеризацию. При концентрации 250 ppm конверсия 94% достигалась за 28 ч, при 500 ppm — за 8 ч, при 2500 ppm — за 60 мин. При увеличении концентрации BiSS до 5000 ppm за 60 мин достигалась конверсия 96,4%. Дальнейшее повышение содержания катализатора не приводило к существенному ускорению процесса. Полученные полимеры характеризуются средневесовой молекулярной массой в диапазоне от

46 до 149 кДа. Термостабильность образцов была исследована методом термогравиметрического анализа (ТГА). Показано, что материалы сохраняют стабильность до 100 °C, после чего начинается двухстадийная терми-ческая деструкция. Результаты ТГА указывают на присутствие двух фракций, различающихся по термостабильности, что связано с изменением концентрации субсалицилата висмута.

Таким образом, субсалицилат висмута является эффективным катализатором полимеризации D,L-лактида, позволяющим получать поли(D,L-лактид) с высокой конверсией и молекулярной массой до 149 кДа, что свидетельствует о перспективности его дальнейшего исследования для полимеризации лактида с раскрытием цикла.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание FFSM-2025-0003).

КОМПЛЕКСЫ ЧАСТИЦ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С КАТИОННЫМИ ПОЛИМЕРАМИ

***Бадикова А.Г.*[1,2], *Жучкова В.И.*[1], *Ефимова А.А.* [1,2],
Фомин Е.О.[1], *Синицын А.П.*[1], *Ярославов А.А.*[1,2]**

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, badikovaag@my.msu.ru*
[2] *Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород*

Микропластик (МП) — полимерные частицы до 5 мм, образующиеся при распаде пластиков и накапливающиеся в среде. Опасность МП связана со способностью адсорбировать и переносить токсичные вещества, что может усиливать их негативное воздействие. Решением этой проблемы считаются биодеградируемые материалы, которые не должны накапливаться в окружающей среде. Однако при их деградации также образуются частицы микронных размеров. Адсорбция загрязнителей на таких частицах может замедлять их деструкцию и влиять на взаимодействие с клетками. В роли таких загрязнителей могут выступать катионные полимеры, используемые в пищевой промышленности, биомедицине и очистке сточных вод, однако их влияние на свойства биодеградируемого МП мало изучено.

В работе в качестве модельных частиц использовали отрицательно заряженные частицы целлюлозы (200 нм). Изучено их взаимодействие с тремя катионными полимерами: полилизином, каустамином и поли(N-этил-4-винилпиридиний)бромидом (ПЭВП). Показано, что поликатионы связываются с поверхностью частиц, образуя как положительные, так и отрицательные комплексы в зависимости от соотношения компонентов. Установлено, что присутствие поликатиона существенно замедляет ферментативную деградацию: за время полного разрушения чистых частиц деструкции комплексов не происходит. Исследование цитотоксичности показало, что частицы целлюлозы нетоксичны, а цитотоксичность комплексов определяется общим количеством поликатиона, а не зарядом комплекса. При взаимодействии с модельными липидными мембранами (липосомами) частицы целлюлозы не нарушали их целостность, тогда как поликатионы вызывали высвобождение содержимого, причем характер высвобождения зависел от типа поликатиона. Комплексы поликатионов с частицами взаимодействуют с липосомами аналогично индивидуальным поликатионам.

Таким образом, адсорбция поликатионов не только препятствует биодеградации целлюлозных частиц, но и определяет их цитотоксичность и характер взаимодействия с липидными мембранами. Полученные результаты указывают на необходимость учета эффектов адсорбции загрязнителей при оценке безопасности биодеградируемого МП.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственный контракт № 075-15-2024-629, МегаГрант).

ПОЛУЧЕНИЕ РЕНТГЕНОКОНТРАСТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНОГО ПОЛИУРЕТАНА И НАНОЧАСТИЦ $BASO_4$

Пешкина Е.А.*, Князев Н.В., Ступников А.А., Дмитряков П.В., Малахов С.Н., Крупнин А.Е., Кузнецов Н.М.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Термопластичный полиуретан (ТПУ) — один из наиболее востребованных материалов в медицинских устройствах, включая имплантируемые. Структура ТПУ сочетает в себе жесткие сегменты, обеспечивающие прочность, и мягкие, которые отвечают за эластичность. Благодаря этому балансу характеристик материал подходит для сердечно-сосудистых имплантатов, тканевой инженерии, кардиоваскулярной хирургии и систем доставки лекарств. Кроме, того к преимуществам ТПУ относятся биосовместимость и низкая тромбогенность [1]. Термопластичность полиуретана позволяет применять экструзионную 3D-печать для переработки, что открывает перспективы создания персонализированных устройств со сложной геометрией [2].

Однако ТПУ характеризуется слабой рентгеноконтрастностью, что усложняет неинвазивный контроль положения имплантата с помощью флюороскопии, компьютерной или магнитно-резонансной томографии и пр. Решением может стать введение рентгеноконтрастных наполнителей, таких как наночастицы сульфата бария ($BaSO_4$). Сульфат бария отличается доступностью, биосовместимостью и термостабильностью [3].

В работе были получены методом экструзии и исследованы композиты на основе медицинского ТПУ и наночастиц $BaSO_4$ с массовой концентрацией наполнителя 0, 2.5, 5, 7.5 и 10%. Изучена возможность переработки полученного композиционного материала методом 3Д печати. Выявлено влияние содержания наночастиц на физико-химические и механические свойства композиционного материала.

Работа выполнена в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования ресурсных центров ОРЦ КК НБИКС-ПТ.

Список используемой литературы

1. Miri Z., Farè S., Ma Q., Haugen H.J. Updates on polyurethane and its multifunctional applications in biomedical engineering // Progress in Biomedical Engineering, 2023, № 4. 042001.
2. Ilyas S., Kumar H. Investigating the versatility of thermoplastic polyurethane (TPU): A comprehensive survey for its integration in 3D printing application // AIP Conference Proceedings, 2025, № 1. 020010.
3. Montazerian M., Gonçalves G.V.S., Barreto M.E.V. и др. Radiopaque crystalline, non-crystalline and nanostructured bioceramics // Materials, 2022, № 21. 7477.

ПРИМЕНЕНИЕ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ ГИДРОФОБНЫХ ЛИГАНДОВ В СОСТАВЕ ГИБРИДНЫХ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСИСТЕМ

Тунгусов Д.С. [1], ***Торопцева А.В.*** [1], ***Иванов А.М.*** [1], ***Золотцев В.А.*** [2], ***Бычкова А.В.*** [1]

[1] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, intidigilyano@yandex.ru*

[2] *НИИ биомедицинской химии им. В. Н. Ореховича, Москва*

Гибридные полифункциональные наносистемы являются многокомпонентной структурой, включающей: наночастицу в качестве основы, стабилизирующее покрытие и функциональные лиганды терапевтического, диагностического и/или нацеливающего назначения. Одной из ключевых физико-химических характеристик указанных систем является количественное содержание функциональных лигандов в составе покрытия. Особую сложность представляет количественная оценка гидрофобных лигандов в коллоидно-стабильных водных наносистемах, поскольку в водной среде гидрофобные лиганды склонны к самоагрегации, что изменяет их свойства и затрудняет анализ. В настоящей работе для решения этой задачи рассматривается применение твердофазной экстракции пирофеофорбида *а* (ПФ*Фа*) в качестве гидрофобного лиганда с поверхности гибридных наносистем в подготовленную среду (экстрагент); полнота извлечения оценивается спектральным анализом. Модельным объектом являются наносистемы на основе наночастиц магнетита (Fe_3O_4) с устойчивым покрытием из человеческого сывороточного альбумина, модифицированные ПФФ*а*.

Проведена твердофазная экстракция ПФФ*а* в различных условиях: % об. содержание ДМСО и кукурузного масла в экстрагенте, время экстракции, скорость работы гомогенизатора. Экстракция ПФФ*а* была осуществлена для систем разной сложности состава, а именно: нативного ПФФ*а* в смешанном растворителе, а также ПФФ*а* в составе белкового покрытия гибридных наносистем.

Работа выполнена при поддержке из средств федерального бюджета Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ИБХФ РАН (№ гос. регистрации 125020601631-3).

СИНТЕЗ МИКРОСВИТКОВ AG-CeO_2 С УЧАСТИЕМ РЕАКЦИЙ КОНТРОЛИРУЕМОГО ГИДРОЛИЗА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ ВОДНЫЙ РАСТВОР СОЛЕЙ-ВОЗДУХ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ

***Ермакова К.Е.*[1], *Гулина Л.Б.*[1]**

[1] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, st117578@student.spbu.ru*

Активность твердофазных катализаторов зависит от содержания активных центров, подходящих значений удельной поверхности и морфологии, обеспечивающей диффузию реагентов и продуктов. Полые материалы, например, с морфологией микросвитков, могут демонстрировать улучшенные транспортные функции, повышенную активность и устойчивость к агломерации по сравнению с традиционными порошками, поэтому разработка маршрутов получения наноматериалов с многоуровневой иерархией остается актуальной задачей.

Материалы на основе CeO_2 демонстрируют каталитическую активность в реакциях окисления благодаря кислородным вакансиям и нестехиометрическим состояниям, а также обладают ферментоподобной активностью. Включение серебра способствует снижению температуры спилловера кислорода, усилению фотокаталитической и антибактериальной активности.

Целью работы являлось исследование возможности получения микросвитков Ag-CeO_2 и изучение их антиоксидантной активности. В качестве основной реакции синтеза выбрано взаимодействие на границе раздела фаз жидкость-газ, позволяющее контролировать морфологию продуктов и формировать градиентную пленку, которая при высушивании трансформируется в микросвитки [1]. В докладе будет впервые показана возможность получения микросвитков Ag-CeO_2 с толщиной стенки 1-5 мкм, диаметром до 100 мкм и длиной до 1 мм, представлены данные их характеризации методами РСМА, РФА, СЭМ и ПЭМ, и приведены результаты изучения антиоксидантной активности новых материалов.

Авторы благодарят сотрудников ресурсных центров «Нанотехнологии» и «Рентгенодифракционные методы исследования» СПбГУ за помощь в исследованиях.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-79-20013, https://rscf.ru/project/25-79-20013/.

Список используемой литературы

1. Gulina L.B., Tolstoy V.P., et al. Gas-Solution Interface Technique as a simple method to produce inorganic microtubes with scroll morphology // Progress in Natural Science: Materials International, 2020, Vol. 30, № 3. P. 279-288.

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ И ОТЖИГА НА СПИНОВЫЕ ЦЕНТРЫ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ АНОДНОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ

Кытина Е.В.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, kata13012002@mail.ru

В настоящее время одним из перспективных направлений в сфере нанотехнологий является разработка оптических биосенсоров, отличающихся высокой чувствительностью и селективностью [1]. Одним из материалов, которые активно используются для создания такихбиосенсоров, является наноструктурированный анодный оксид алюминия (нано–Al_2O_3) [2]. Его основными преимуществами являются простота и дешевизна синтеза, отсутствие контактов и быстродействие. Известно, что спиновые центры (дефекты) в наноразмерных оксидах металлов играют важную роль в физико-химических процессах, имеющих место в данных материалах. Основной задачей данной работы было изучение типа, концентрации спиновых центров в нано–Al_2O_3 и влияния на них красителя Родамина Б (модельный биомаркер) и процессов химического травления и отжига после синтеза с целью управления основными характеристиками спиновых центров. Синтез нано-Al_2O_3 проводили методом анодного окисления в разбавленных растворах серной и селеновой кислот в гальваностатическом режиме. Образцы были получены Назаркиной Ю.В. (НИУ МИЭТ). Образцы обозначим в соответствии с используемыми для синтеза кислотами и типом обработки: нано-Al_2O_3-H_2SO_4, нано-Al_2O_3-H_2SeO_4.

Методом ЭПР-спектроскопии во всех образцах нано-Al_2O_3 обнаружены кислородные вакансии (F+ центры). В образцах, синтезированных в селеновой кислоте, обнаружены также дополнительно кислородные радикалы. Концентрация спиновых центров в исходных образцах была порядка 10^{16} $г^{-1}$. Установлено, что химическое травление приводит к немонотонному росту концентрации всех спиновых центров в нано-Al_2O_3-H_2SO_4, нано-Al_2O_3-H_2SeO_4, в то время как отжиг сопровождается уменьшением их концентрации с ростом температуры отжига. Нанесение на поверхность красителя (10^{-5} М) приводит к вариациям концентрации спиновых центров, зависящим от типа и параметров постобработки нано-Al_2O_3-H_2SO_4, нано-Al_2O_3-H_2SeO_4. Это свидетельствует о процессах взаимодействия красителя с дефектами, которые расположены преимущественно на поверхности образцов. Полученные данные могут быть использованы для создания оптической сенсорной платформы для детектирования биомаркеров.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00402, https://rscf.ru/project/24-19-00402/.

Список используемой литературы

1. Li M., Bae J. Comprehensive review on DNA hydrogels and DNA origami-enabled wearable and implantable biosensors// Biosensors, 2025, 15(12). 819.
2. Abd-Elnaiem A. M., Mohamed Z. A. et al. Synthesis, characterization, and optical sensing of hydrophilic anodic alumina films// Opt. Mater., 2024, 157. 116390.

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ С ВНЕДРЕННОЙ СЕТКОЙ НАНОТРУБОК ГАЛЛУАЗИТА

Сторожук А.П.*, *Молчанов В.С.*, *Филиппова О.Е.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия, zhuka04@mail.ru

Гидрогели на основе природных полисахаридов перспективны как экологически безопасные «зеленые» чернила для экструзионной 3D печати. Биосовместимый полисахарид альгинат натрия перспективен для создания гидрогелей для 3D печати, но низкие механические свойства ограничивают применение в данной области. В работе предлагается ввести в сетку полисахарида нанотрубки глины галлуазит, которые могут формировать жесткую перколяционную сетку, увеличивая упругость гидрогеля, но не ограничивают обратимое перестроение геля при течении, необходимое для экструзии.

В работе исследованы реологические свойства композитных гидрогелей альгината натрия и природных алюмосиликатных нанотрубок галлуазита (5,4 об.%) при варьировании концентрации полимера от 2,7 до 13 мас.% без добавления сшивателей. Испытания проводили на ротационном реометре в режимах осцилляционного сдвига, стационарного течения и циклического изменения скорости сдвига.

С ростом концентрации полимера до 13 мас.% модуль упругости достигает 10 кПа, а предел текучести — 2 кПа, что обеспечивает сохранение формы напечатанной конструкции без растекания. Выявленные степенные зависимости указывают на рост числа топологических зацеплений в двойной сетке «нанотрубки–полимер».

Все составы демонстрируют выраженное псевдопластичное течение: вязкость падает более чем на 3 порядка при увеличении скорости сдвига. После снятия нагрузки структура быстро восстанавливается.

Таким образом, реологические свойства разработанных гидрогелей соответствуют требованиям для чернил для экструзионной 3D-печати. Для получения изделия после печати образцы отверждали, помещая в раствор с ионами Ca^{2+}. Показано, что модуль Юнга нанокомпозитов в 3–6 раз превышает показатели образцов без нанотрубок, достигая 1300 кПа. Отсутствие токсичных компонентов делают данные материалы перспективными для применения в тканевой инженерии, мягкой робототехнике и гибкой электронике.

Список используемой литературы

1. Молчанов В.С., Сторожук А.П., Филиппова О.Е. Механические свойства гелей альгината натрия и наночастиц природного происхождения до и после сшивания ионами кальция // Высокомолекулярные соединения. Сер. А. 2025. Т. 67, № 4. С. 234–241.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНВИНИЛАЦЕТАТА И ПЕРХЛОРАТА АММОНИЯ

***Сафронова В.А.*[1,2], Моногаров К.А.[1], Пивкина А.Н.[1]**

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, nika0safronova@list.ru

[2]Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский институт) имени И.М. Губкина

Перспектива применения 3D-печати для создания энергетических материалов и изделий со сложной геометрией обусловлена возможностью оптимизации соотношения прочности к весу, а также высокой энергетической эффективностью и низкой чувствительностью изделий к внешним воздействиям.

В качестве наполнителя был рассмотрен перхлорат аммония (ПХА). В качестве полимерной матрицы был выбран перспективный этиленвинилацетат. Он является прочным и термостабильным полимером с низкой температурой плавления. В качестве его источника были выбраны 3 коммерчески доступные марки термоклея на основе этиленвинилацетата, различающиеся вязкостью на порядок.

С помощью термодинамического расчета оптимизирован состав энергетических композитов по максимальной адиабатической температуре и по удельному импульсу. Затем каждый оптимизированный состав был изготовлен в двух вариантах — с мелким (~10 мкм) и крупным (~100 мкм) ПХА для определения возможных пределов регулирования скорости горения. Далее для всех составов определена скорость горения в диапазоне давлений до 100 атм. С помощью синхронного термического анализа оценена термостабильность изготовленных композитов. На основе полученных данных сделан вывод о том, что рассмотренные составы являются перспективными благодаря высоким значениям расчетного удельного импульса и возможности регулирования скоростей горения в широком диапазоне.

Однако в экспериментах на экструзионном пластометре обнаружено, что составы имеют чрезвычайно высокую вязкость, из-за чего нуждаются в улучшении реологических свойств для возможности их использования в качестве материалов для 3D-печати. Для оптимизации реологических свойств использовались 3 подхода: использование двух-фракционного состава наполнителя, добавление в состав поверхностно активного вещества и увеличение количества полимера. В результате получены оптимизированные рецептуры энергетических композитов на основе этиленвинилацетата и перхлората аммония, которые пригодны для 3D-печати методом послойного наплавления и имеют приемлемые энерго-баллистические характеристики.

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ГАЗОГЕНЕРИРУЮЩИХ МАЛОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Пущин О.Д, Путис С.М.

ФГУП «Специальное конструкторско-технологическое бюро «Технолог», Санкт-Петербург, Putis@sktb-technolog.ru

Работы по созданию боеприпасов с пониженной уязвимостью (программа LOVA) начались с конца 60-х годов 20 века с получения нечувствительного к различным поражающим факторам артиллерийского пороха, при этом обладающего высокой эффективностью [1]. Однако, у малочувствительных составов, существует и существенные недостатки, к основным из которых можно отнести сложность подбора основных компонентов (наполнителей, обеспечивающих необходимые реологические и физико-механические характеристики, и характеристики по чувствительности), а также трудность воспламенения [2]. В свою очередь, наиболее подходящим наполнителем для создания газогенерирующих составов является FOX-7, т.к. обладает низкой чувствительностью (чувствительность к удару около 0%, к трению — около 4000 кгс/см^2), при этом составы на его основе обладают хорошими реологическими и физико-механическими характеристиками [3].

В настоящей работе нами получены несколько газогенерирующих составов и изучены их скорости горения в манометрической бомбе на цилиндрических образцах (d = 6 мм, m около 1,5 г) содержащих в качестве наполнителя FOX-7. Бесканальный образец ($U = 0{,}063 \cdot P$, 32,0 мм/с при 200 атм); одноканальный образец ($U = 0{,}084 \cdot P$, 38,4 мм/с при 200 атм); одноканальный образец с заменой 50 % коллоксилина Н на среднеазотистую нитроцеллюлозу ($U = 0{,}132 \cdot P$, 53 мм/с при 200 атм).

Из данных полученных в ходе экспериментов можно сделать вывод, что скорость горения одноканального состава на основе FOX-7, выше на 20 % бесканального образца; замена 50 % коллоксилина Н на СА НЦ приводит к увеличению скорости на 40%, при этом чувствительности полученных составов практически одинакова и составляет 10 % и 3200 кгс/см^2.

Список используемой литературы

1. Жегров Е.Ф. Химия и технология баллиститых порохов, твердых ракетных и специальных топлив / Е. Ф. Жегров, Ю. М. Милехин, Е. В. Берковская ; Т.1: Монография — Москва: РИЦ МГУП им. Федорова, 2011. — 400 с, ISBN 978-5-8122-1121-9.
2. Фиошина М.А., Русин Д.Л. Основы химии и технологии порохов и твердых ракетных топлив: Учеб. пособие / РХТУ им. Д.И. Менделеева. — Москва, 2001.
3. M. Anniyappan, M. B. Talawar, et.al. Обзор современных энергетических материалов для разработки малочувствительных боеприпасов // Физика горения и взрыва. — 2020. — Т. 56, № 5. — С. 3-31. — DOI 10.15372/FGV20200501

АЛЮМИНИЗИРОВАННЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНВИНИЛАЦЕТАТА ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ

***Аристархов Л.К.*, *Моногаров К.А.*,**
Назарова А.А.*, *Сафронова В.А.*, *Пивкина А.Н.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва,
leonid.aristarkhov@mail.ru

Основными способами заряжания ракетного двигателя твердым топливом являются заливка его в камеру с последующим отверждением или вкладывание (вклеивание) внутрь камеры зарядов твердого топлива готовой формы. Однако этими способами затруднительно получать заряды сложной геометрии в связи с длительностью процессов отверждения или необходимостью в дополнительной оснастке. Эта проблема может быть решена с помощью активно развивающихся в настоящее время аддитивных технологий, в частности — 3D-печати методом послойного наплавления (FDM).

Объектами исследования в работе являлись образцы из модельных составов на основе этиленвинилацетата, перхлората аммония и алюминия, которые изготавливались как традиционным методом прессования, так и с помощью 3D-печати. Теоретически определена рецептура, обладающая оптимальными баллистическими свойствами — максимальными удельным импульсом или адиабатической температурой сгорания. Для прессованных образцов различного компонентного и гранулометрического состава получены законы горения, определено время зажигания под действием лазерного излучения. Выбран состав, обладающий наилучшими баллистическими характеристиками.

Для изготовления образцов указанного состава методом 3D-печати изучены реологические свойства (температура начала течения и зависимость вязкости от температуры) с целью обеспечения вязкости, достаточной для стабильной печати при температуре, допустимой для безопасного обращения с энергонасыщенным компонентом. Оптимизация реологических свойств проведена различными методами (изменение гранулометрического состава, вида и содержания ПАВ, увеличение количества полимера). Получен состав, обладающий требуемой вязкостью, методом 3D-печати изготовлены образцы различной формы. Показано, что напечатанные образцы обладают параметрами горения, совпадающими с таковыми для прессованных, продемонстрирована возможность изготовления образца сложной геометрии из полученной композиции с помощью метода послойного наплавления.

ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНАГРЕВА

***Гирина С.А.*[1,2], *Шаповалова О.В.*[1],**
***Иншаков Е.А.*[3], *Рабчинский М.К.*[3], *Шиянова К.А.*[1]**

[1] Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва, girina.s.a@mail.ru
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный
[3] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург

Одной из важных практических задач, стоящих перед современной наукой, остается проблема надежного и энергоэффективного обогрева поверхностей различной формы, эксплуатируемых в экстремально низких температурах, при этом традиционные нагревательные системы часто оказываются недостаточно гибкими, тяжелыми или подверженными коррозии и механическим повреждениям. В качестве решения данных проблем предлагают гибридные материалы армированные углеродными наноматериалами. Использование такого наполнителя позволяет достичь уникальных свойств и характеристик у полимера, таких как повышенная электропроводность и теплоперенос. Несмотря на заметный прогресс и постоянно растущее количество научных публикаций в данной области, остаются серьезные препятствия, начиная от выбора наполнителя, соответствующего ряду требований.

В данной работе были исследованы пленки размером 10×4 см различной толщины (от 10 до 100 мкм), нанесенные методом аэрографии из дисперсий на основе поливинилбутираля и углеродных нанотрубок. Электрофизические испытания показали, что удельное электрическое сопротивление полученных образцов находится в пределах 100–150 мОм×м, а при подаче напряжения 110 В имеют тепловую мощность 5–20 Вт/м^2. Полученные покрытия успешно справляются с удалением ледяной корки толщиной 2–3 мм и способны обеспечивать длительный прогрев до температур 50–60 °C, сохраняя при этом целостность структуры. Полученные результаты показывают, что выбранные углеродные материалы — перспективные наполнители для таких систем. Дальнейшая оптимизация состава и метода приготовления позволит достичь удельной мощности в 100–300 Вт/м^2.

Работа выполнена за счет субсидии Министерства науки и высшего образования России, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания № 125012200595-8.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОГО КАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА FECONICU МЕТОДОМ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Ромазева К.А., Пугачева Е.В., Борщ В.Н.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедениям. А.Г. Мержанова (ИСМАН), г.Черноголовка xenia_romazeva@ism.ac.ru

В данной работе методом жидкофазного самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) был синтезирован многокомпонентный сплав $FeCoNiCuAl_x$. Этот сплав был использован в качестве прекурсора для получения полиметаллического катализатора FeCoNiCu. Для формирования развитой наноструктурированной поверхности прекурсор подвергался выщелачиванию в 20% растворе NaOH с последующей стабилизацией в 10% растворе H_2O_2 [1]. Были проведены физико-химические исследования катализаторов и прекурсоров методами рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре ДРОН-3, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с EDS-приставкой (Zeiss Ultra plus microscope + INCA Energy 350 XT energy-dispersive spectrometer), методом БЭТ, а также каталитические испытания.

Полученный катализатор с составом FeCoNiCu был протестирован в реакциях разложения метана, гидрирования CO_2 при атмосферном давлении и глубокого окисления пропана и CO. В процессе разложения метана зафиксирована стабильная конверсия (30%) в течение 2,5 часов, сопровождающаяся ростом углеродных нанотрубок. В реакции метанирования CO_2 при температуре 400°C достигается конверсия 50,6 % при селективности по метану 77,6 %. В процессе глубокого окисления CO полностью сгорает при температуре 250°C, а конверсия пропана при 400°C составляет 92,26% [2].

Полученные данные подтверждают конкурентоспособность разработанного катализатора. В перспективе планируется исследование его эффективности в синтезе Фишера-Тропша и процессах гидрирования под давлением.

Список используемой литературы

1. Pugacheva E., et al. Combined Centrifugal Casting–Self-Propagating High-Temperature Synthesis Process of High-Entropy Alloys FeCoNiCu(Me)Al (Me = Cr, Cr + Mn, Cr + La, and Cr + Ce) as Precursors for Preparation of Deep Oxidation Catalysts / Metals, 2025, Vol. 15, No. 12, PP. 1381
2. Pugacheva E., et al. Multifunctional Catalysts Based on High-Entropy Transition Metal Alloys / Int. J. of SHS, 2024,Vol. 33, No. 3 , PP. 200–208

ОЦЕНКА ОСТАТОЧНОГО ЗАРЯДА ЭЛЕКТРОФОРМОВАННЫХ НЕЙЛОНОВЫХ МЕМБРАН МЕТОДОМ АДСОРБЦИИ ЗАРЯЖЕННЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Петелина Е.А., Рамонова А.А., Багров Д.В.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет, Москва,
ek4terina.petelina@yandex.ru

Электроспиннинг является перспективным методом получения нановолокнистых материалов с высокой пористостью и большой удельной поверхностью. В процессе формирования волокна приобретают электрический заряд, знак которого определяется полярностью электрода. Это свойство может быть использовано для создания фильтров с электростатическим механизмом захвата частиц, но количественная оценка заряда мембран остается сложной задачей.

В работе предложен подход к оценке остаточного заряда электроформованных нейлоновых мембран с использованием адсорбции заряженных красителей. Мембраны получали при положительной (Nylon+) и отрицательной (Nylon–) полярности. С помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) была подтверждена волокнистая структура этих мембран, средние диаметры волокон составили 364 ± 106 нм и 302 ± 93 нм для Nylon+ и Nylon– соответственно. Для оценки заряда использовали катионный краситель акридиновый оранжевый и анионный сульфородамин Б. Показано, что Nylon+ лучше адсорбирует сульфородамин Б, а Nylon– сравнительно хорошо адсорбирует акридиновый оранжевый, что подтверждает наличие остаточного заряда на волокнах.

Для количественного анализа адсорбции сульфородамина Б на Nylon+ строили изотермы адсорбции в воде и в 1М растворе NaCl при 4°C и 37°C. Изменение энергии Гиббса при адсорбции составило порядка 10 кДж/моль, что типично для неспецифической адсорбции (K_d~1-10 мМ). Не все изотермы адсорбции хорошо аппроксимировались моделью Ленгмюра, поэтому количественно оценить вклад электростатических взаимодействий в адсорбцию пока не удалось.

Метод адсорбции заряженных красителей позволяет оценить остаточный заряд электроформованных мембран и может быть полезен для развития их приложений для тканевой инженерии и разработки сенсоров.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ СОРБЕНТОВ CO_2 НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА С ПРИМЕНЕНИЕМ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ДОБАВОК

***Шешковас А.Ж.*, Веселовская Ж.В., Люлюкин М.Н., Селищев Д.С., Козлов Д.В.**

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090, Новосибирск, sheshkovas@catalysis.ru

Мировые выбросы CO_2 превышают 38 млрд. тонн/год, при этом их объем ежегодно растет. Значительный антропогенный вклад в эмиссию парниковых газов побудил мировое сообщество к снижению углеродного следа в экономике. Ключевым этапом реализации данной стратегии является разработка сорбентов с высокой сорбционной емкостью по CO_2, высокой скоростью сорбции/десорбции и циклической стабильностью. При этом материал должен характеризоваться низкими энергозатратами на регенерацию и соответствовать принципам зеленой химии. Одними из наиболее перспективных хемосорбентов CO_2 являются аминосодержащие полимеры, в частности полиэтиленимин (ПЭИ), благодаря низкой летучести и умеренной $T_{регенерации}$ (80-100°C). Однако чрезвычайно высокая вязкость таких материалов существенно ограничивает кинетику сорбции. Поэтому для устранения диффузионных затруднений ПЭИ наносят на пористые носители. Целью работы является синтез низкотемпературных композитных сорбентов CO_2 на основе ПЭИ и исследование их сорбционных свойств с использованием модельных смесей газов.

В результате исследований наибольшей сорбционной емкостью обладают композиты на основе полимерной матрицы СДВБ. Так, материал 40ПЭИ/СДВБ имеет сорбционную емкость 152,4 мг(CO_2)/г, что составляет более 99% от теоретической значения. В ходе циклических испытаний показано, что за 12 циклов с $T_{регенерации}$ 100°C сорбционная емкость материала снижается менее, чем на 1%. Для материалов были измерены теплоты сорбции CO_2, а также теплоемкость активных компонентов и ряда носителей. Измеренные значения позволили оценить Q_{TEC} (тепловые затраты на регенерацию), которые оказались в 1,6 раза ниже (2,4 кДж/г(CO_2)), чем для традиционных водно-аминовых растворов (3,9 кДж/г(CO_2)). В ходе работы также показано, что регенерацию материалов можно проводить фототермически при введении в состав образцов фоточувствительных добавок. При содержании добавок менее 5 масс.% композитный материал способен разогреваться выше 100°C под действием светодиода видимого диапазона, что обеспечивает полную регенерацию сорбента.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-23-20135, https://rscf.ru/project/26-23-20135/, и Новосибирской области (соглашение № 30-2026-001276 от 16.04.2026).

НОВЫЕ ГАЗОРАЗДЕЛИТЕЛЬНЫЕ ПОЛИСИЛОКСАНОВЫЕ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ПОЛИЭТИЛЕНА

***Рохманка Т.Н.*[1], *Грушевенко Е.А.*[1], *Атласов В.Р.*[1], *Голубев Г.С.*[1], *Дементьев К.И.*[1]**

[1] *Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук, Москва, rokhmankatn@ips.ac.ru*

Современное мембранное материаловедение направлено на разработку полимеров с улучшенными транспортными характеристиками. Несмотря на эффективность получаемых материалов, изготовление мембран на их основе может быть затруднено высокой стоимостью. Вовлечение продуктов переработки полиолефинов в получение мембранных материалов позволяет одновременно решить проблему утилизации пластиков и снизить себестоимость продукции. Процесс термолиза полиолефинов позволяет получать концентрат олефинов, который может быть применен к синтезу полисилоксановых мембран, успешно применяемых для кондиционирования природного и попутного нефтяного газа. В данной работе впервые синтезированы полиалкилметилсилоксаны (ПАМС) из фракции C_9–C_{11} (146-196°C) термолизата полиэтилена по реакции гидросилилирования полиметилгидросилоксана. Для формирования механически стабильных пленок были исследованы сшивающие агенты различной длины и строения: 1,7-октадиен, полидиметилсилоксан винилтерминированный с Mn = 500 г/моль (ПДМС 500) и 28000 г/моль (ПДМС28). Изучение газотранспортных характеристик ПАМС показало, что переход от углеводородной сшивки к полисилоксановой приводит к росту коэффициентов проницаемости индивидуальных газов (N_2, CH_4, C_2H_6, C_4H_{10}) на 15-21%. Это обусловлено увеличением диффузионной составляющей переноса: коэффициент диффузии CH_4 увеличился с 4479 до 6127, а C_4H_{10} с 1420 до $2061 \cdot 10^{-8}$ см^2/с, соответственно. Дальнейшее увеличение длины сшивки (ПДМС28 (ПС9-С11МС/ПДМС28)) не приводит ожидаемому росту газоразделительных характеристик ввиду увеличения свободного объема. Сравнительный анализ показал, что образец ПС9-С11МС/ПДМС28, при сохранении высокой селективности разделения CH_4/N_2 (3.4), характеризуется в 1.7 раз большими коэффициентами проницаемости в сравнении с полисилоксаном, замещенным индивидуальным 1-деценом. Кроме того, селективность по паре C_4H_{10}/N_2 увеличивается с 68.5 до 74.8. Таким образом, впервые показана возможность получения конкурентоспособных мембранных материалов из вторичного сырья, что позволит создать научную основу для разработки экономически эффективных мембранных технологий в рамках циркулярной экономики.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта 25-79-10222.

ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТ КОБАЛЬТА: ЭЛЕКТРОСИНТЕЗ — РАЗМЕР КРИСТАЛЛОВ — ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗ ОКИСЛЕНИЯ КОРОТКИХ ПЕПТИДОВ

***Бибик К.В.*, Супрун Е.В.**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва, k2so.878@gmail.com

Гексацианоферрат(II) кобальта(II) (ГЦФСо) — электрокатализатор окисления различных соединений (гидразин, сульфиты, нитриты, каптоприл) [1], включая протеиногенные аминокислоты [2]. Целью данной работы было выявление зависимости между условиями электросинтеза ГЦФСо на поверхности печатных графитовых электродов (ПГЭ), размером и поверхностной концентрацией образующихся кристаллов (Γ, нмоль/см^2)) и электрокаталитической активностью в отношении реакции окисления коротких пептидов. В качестве субстрата был выбран дипептид Про-Гли, который относится к классу биоактивных пептидов «глипролины» и состоит из «неэлектроактивных» аминокислот [2].

Модификацию ПГЭ ГЦФСо проводили методом циклической вольтамперометрии, варьируя концентрацию и соотношение $CoCl_2$ и $K_3[Fe(CN)_6]$ в растворе для синтеза, скорость развертки потенциала (v) и количество циклов. Из вольтамперограмм по пику $Co^{3+/2+}$ рассчитывали Γ. Сенсоры ПГЭ/ГЦФСо использовали для детектирования Про-Гли методом проточно-инжекционного анализа при 0.95 В в фосфатном буфере, pH 8.0. Поверхность модифицированных и чистых ПГЭ изучали с помощью сканирующей электронной микроскопии. На снимках видно, что поверхность ПГЭ покрыта чешуйками графита и кристаллами ГЦФСо кубической формы. При снижении v с 25 мВ/с до 2 мВ/с при фиксированном количестве циклов (5 циклов) средний размер кристаллов увеличился в 4 раза, а Γ увеличилась с 1 до 18 нмоль/см^2. Чувствительность определения Про-Гли увеличивалась с 0.055 мкА/мМ (чистый ПГЭ) до 0.540 мкА/мМ с ростом Γ, выходя на предел при Γ = 9 нмоль/см^2. Таким образом, меняя условия электросинтеза ГЦФСо, можно варьировать аналитические характеристики получаемых сенсоров для определения Про-Гли и других соединений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-13-00049, https://rscf.ru/project/24-13-00049/.

Список используемой литературы

1. Matos-Peralta Y., Antuch M. Review—Prussian Blue and Its Analogs as Appealing Materials for Electrochemical Sensing and Biosensing // *J. Electrochem. Soc.*, 2020, 167. 037510.
2. Bibik K.V., Suprun E.V. et al. Electrocatalytic oxidation of —electroactive and —non-electroactive protein amino acids by transition metal hexacyanoferrates // *J. Electroanal. Chem.*, 2026, 1016. 120192.

УЛЬТРАЗВУКОВАЯ АКТИВАЦИЯ $CASN(OH)_6$

Азаров К.В.,[1,2] Богдан Т.В.,[1,2] Мащенко Н.В.,[1]
Богородский С.Э.,[1] Богдан В.И. [1,2]

[1]ФГБУН институт органической химии им. Н. Д. Зелинского,
Российской академии наук, Москва, Россия
[2]Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

Гегксагидроксистаннат кальция является достаточно перспективным катализатором для реакции альдольно-кротоновой конденсации карбонильных соединений с получением ряда ценных продуктов, которые потенциально могут служить компонентами для лекарственных препаратов, лакокрасочных материалов и т.д. А также для получения перспективного катализатора перовскитного типа — станната кальция.

С целью получения высокодисперсных соединений с достаточно равномерным распределением частиц по размерам применяется ультразвуковая обработка. Мощность ультразвукового излучения влияет на стадию зародышеобразования, снижая энергию Гиббса, вследствие чего наблюдается высокий рост образования зародышей с последующей агрегацией и нуклеацией. Низкочастотное ультразвуковое излучение провоцирует процесс кавитации, а также механические эффекты, благодаря которым происходит интенсивное перемешивание [1].

В данной работе представлен синтез и исследование физико-химических свойств соединения $CaSn(OH)_6$, полученного методом соосаждения с применением ультразвуковой обработки в широком диапазоне мощности излучателя от 30% до 75% от максимальной мощности ультразвукового излучения. В ходе исследования был применен комплекс физико-химических методов для анализа свойств катализатора, включая рентгенофазовый анализ (РФА), сканирующую электронную микроскопию с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией (SEM-EDX), Мессбауэровскую спектроскопию и синхротронный метод.

В ходе исследования было определено нелинейное воздействие ультразвука на морфологию $CaSn(OH)_6$, где при 35%, 45%, 55% мы получали полидисперсные образцы с выделением SnO_2 и $Ca(OH)_2$ в отличие от других образцов, которые оказались хорошо закристаллизованы.

Список используемой литературы

1. Азаров К.В., Мащенко Н.В., Богдан Т.В., Богородский С.Е., Скиба М.А., Богдан Л.В., Лукьянов П.С., Богдан В.И. Синтез CaSn(OH)6 методом ультразвукового диспергирования // *Physics of Wave Phenomena.*, 2026, Том 34. С. 150-160

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК КОБАЛЬТА НА СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ГИДРОСИЛИКАТА НИКЕЛЯ ПРИ НАГРЕВАНИИ

***Быстревский И.Д.*[1], Храпова Е.К.[2], Уголков В.Л.[1], Альмяшева О.В.[1]**

[1]Филиал НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИХС, Санкт-Петербург, bis-ilja2009@yandex.ru

[2] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург.

Гидросиликатные нанотрубки содержат существенное количество структурно связанной воды, вследствие чего процессы дегидратации при нагреве могут существенно влиять на структуру материала. Изменения в химическом составе гидросиликатов, например, при введении d-элементов в структуру нанотрубок, может оказывать значительное влияние на температурные интервалы подобных процессов. Изучение термического поведения гидросиликатных нанотрубок смешанного состава может дать более полное представление о их термической стабильности, необходимое для оценки условий эксплуатации и управления термическими свойствами материалов на их основе.

В рамках исследования методами комплексного термического анализа был исследована цепочка структурно-химических превращений, гидросиликатов состава $(Ni_{1-x}Co_x)_3Si_2O_5(OH)_4$, где x = 0.05, 0.10, 0.25, 0.50 в температурном диапазоне 50-1300 °C. Ряд фазовых переходов, характерный для индивидуального нанотрубчатого гидросиликата никеля (синтетического пекораита), для исследованных образцов сохраняется, однако различная концентрация кобальта в структуре оказывает заметное влияние на температурные интервалы протекания данных процессов. С ростом содержания кобальта наблюдается снижение температуры дегидроксилирования структуры пекораита, связанное в значительной степени с влиянием кобальта на размер и морфологию частиц. Также показано, что температуры полной дегидратации сепиолитоподобной структуры и дальнейшей перекристаллизации смешанных оксидов никеля-кобальта с образованием структуры либенбергита демонстрируют зависимость, близкую к линейной, от увеличения мольной доли кобальта в исследуемых образцах. При этом тенденция сохраняется вне зависимости от исходного морфологического состава образцов.

Авторы благодарят инжиниринговый центр СПбГТУ(ТИ) и Даниловича Д.П. за предоставленную возможность использования приборной базы.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИХС (тема № 1024030700042-1-1.4.3).

ФИЗИКОХИМИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАННАТОВ КАДМИЯ СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ СООСАЖДЕНИЯ

***Лукьянов П.С.*[1], Богдан Т.В.[1,2], Мащенко Н.В.[1], Равчеев Ф.М.[1,3], Богдан В.И.[1,2]**

[1]Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, chemist2014@yandex.ru [2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва

[3]Высший химический колледж Российской академии наук, Москва

Станнаты кадмия ($CdSnO_3$, Cd_2SnO_4) обладают уникальным сочетанием электрических, оптических и фотокаталитических свойств, что делает их перспективными для прозрачной электроники, газовой сенсорики и оптоэлектроники. Для станната кадмия $CdSnO_3$ характерен ярко выраженный полиморфизм кристаллической структуры. $CdSnO_3$ характеризуется полиморфизмом: высокотемпературная α-модификация (1000–1100 °C или высокое давление) имеет орторомбическую структуру типа перовскита (Pnma/Pbnm), а при ≤800 °C стабилизируется ромбоэдрическая β-форма типа ильменита (R3) [1]. Ортостаннат Cd_2SnO_4 кристаллизуется в кубической шпинельной структуре (Fd-3m) и часто образуется как побочный продукт.

При этом морфология, фазовый состав и свойства получаемых станнатов сильно зависят от метода синтеза. Традиционные твердофазные методы требуют высоких температур (800–1050 °C) и многократных перетираний [2], в то время как химическое соосаждение позволяет получать гомогенные наночастицы при существенно более мягких условиях.

В данной работе был проведен синтез станната кадмия методом химического соосаждения из водных растворов $SnCl_4 \cdot 5H_2O$ и $Cd(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ с использованием NaOH в качестве осадителя при комнатной температуре (25 °C). Комплексная аттестация полученных образцов проводилась методами рентгенофазового анализа (РФА), ИК-спектроскопии, синхронного термического анализа (ТГ-ДСК) и тестирования каталитической активности.

Список используемой литературы

1. Durand B., Loiseleur H. Crystal Data for an Ilmenite Variety of Calcium Stannate CaSnO3 // Journal of Applied Crystallography. 1978. No. 11. pp. 289–290.
2. Dislich H., Hinz P. History and principles of the sol-gel process, and some new multicomponent oxide coatings // Journal of Non-Crystalline Solids. 1982. Vol. 48. No. 1. pp. 11–16.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОЧАСТИЦ YB,ER:$YSR_3(PO_4)_3$, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

***Щукина А.А.*[1,2], *Шитов В.А.*[1]**

[1] Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, fisher-alexa@mail.ru

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

Для испарения предварительно спеченной многокомпонентной мишени в потоке аргона использовался импульсный волоконный Yb-лазер со средней мощностью $P_{ср}$ = 300 Вт, длительностью импульса η = 600 мкс и частотой следования ν = 833 Гц. Полученный материал (см. рисунок 1) представляет собой слабоагломерированные сферические частицы размером 5–80 нм со средним диаметром 17,5 нм. Данные рентгенофазового анализа указывают на аморфное состояние нанопорошка с сохранением ближнего порядка, соответствующего кубической фазе $YSr_3(PO_4)_3$ со структурой эвлитина. Картина микродифракции электронов (см. рисунок 1в) также указывает на смешанный характер структуры наночастиц, сочетая в себе диффузное гало и дискретные рефлексы.

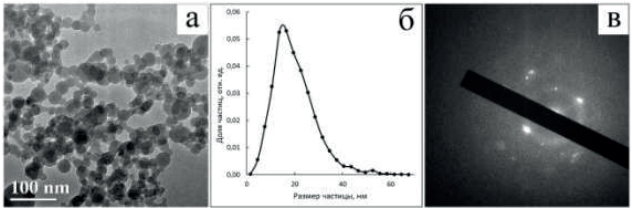


Рисунок 1. ПЭМ-характеризация наночастиц $Yb,Er:YSr_3(PO_4)_3$: (а, б) фотография и распределение частиц по размерам; (в) дифракционная картина (SAED).

ИК-спектроскопия (FTIR) нанопорошка выявила колебательные моды фосфатной матрицы: широкую огибающую антисимметричных валентных колебаний v_3 (1040, 1122, 1255 $см^{-1}$), указывающую на разупорядоченность окружения групп $[PO_4]^{3-}$, а также полосы симметричных валентных v_1 (915 $см^{-1}$) и деформационных v_4 (560 $см^{-1}$) колебаний. В то же время наличие четкого пика при 735 $см^{-1}$ (колебания P–O–P) подтвердило присутствие пирофосфатных групп $[P_2O_7]^{4-}$.

Выявленные структурно-морфологические особенности нанопорошка позволяют рассматривать его в качестве перспективного материала для создания оптической керамики, востребованной при конструировании активных элементов современных лазерных систем.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-01156, https://rscf.ru/project/25-23-01156/

ВЛИЯНИЕ СРЕДНЕГО РАЗМЕРА ЩЕЛОЧНОГО КАТИОНА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $K_{2-x}RB_xZN_3(P_2O_7)_2$

***Аксентьева Е.Г.*[1], *Цыганкова Д.И.*[1,2], *Синельщикова О.Ю.*[1], *Деркачева Е.С.*[1]**

[1]Филиал НИЦ — Курчатовский институт — ПИЯФ — ИХС, Санкт-Петербург, seniakategeo@gmail.com

[2] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет — ЛЭТИ им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург

В ряду щелочных металлов наименьшая разница в размерах наблюдается между калием и рубидием, поэтому твердые растворы их соединений являются классическим примером изоморфного замещения — во многих системах они непрерывны. Однако встречаются не изоструктурные однотипные соединения K и Rb. Например: $A_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (A=K, Rb) [1,2], изучение границ изоморфного замещения K↔Rb в которых интересно и с практической точки зрения, так как твердые растворы на их основе могут обладать нелинейно-оптическими характеристиками и прозрачностью в глубоком ультрафиолете [3].

В данной работе синтез образцов разреза $K_2Zn_3(P_2O_7)_2$ — $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ велся керамическим методом в результате были получены образцы $K_{2-x}Rb_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $0.0 \le x \le 0.6$ с шагом 0.1, а при $0.6 \le x \le 2.0$ с шагом 0.2. Рентгенофазовый анализ данных образцов показал, что ромбический твердый раствор, на основе $K_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (пр. гр. $P2_12_12_1$) ограничен диапазоном $0.0 \le x \le 0.2$, в то время как моноклинный, на основе $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (пр.гр. $P2_1$) реализуется при $0.4 \le x \le 2.0$. Параметры элементарной ячейки данных твердых растворов увеличиваются линейно с ростом среднего кристаллического радиуса щелочного металла, при этом наблюдается значительная анизотропия их деформации. При содержании рубидия x = 0.3 происходит разрыв смесимости. По данным спектроскопического анализа образцов с x = 0.0; 0,5; 1.0; 2.0 все они прозрачны в диапазоне длин волн 180 — 800 нм.

Исследования проведены в рамках темы государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИХС 1024030700042-1-1.4.3.

Список используемой литературы

1. Ji L. N., Cai G. M. et al. Crystal structure and thermal properties of compound $K_2Zn_3(P_2O_7)_2$
2. // Powder Diffraction. 2008. V. 23. № 4. P. 317-322.
3. Song Z., Yu H. et al. Syntheses, structures and characterization of non-centrosymmetric $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ and centrosymmetric $Cs_2M_3(P_2O_7)_2$ (M = Zn and Mg) // Inorganic Chemistry Frontiers. 2020. V. 7. № 18. P. 3482-3490.
4. Zhao H.-J., Zhang J.-X., Lin H. Deep-Ultraviolet Transparent Nonlinear Optical Phosphates: A New Alternative to Conventional Borates // Chemistry — A European Journal. 2025. V. 31. N 8, pp. 1–14.

ТИТАНСОДЕРЖАЩИЕ ГИДРОСИЛИКАТНЫЕ НАНОТРУБКИ: СИНТЕЗ, ЗАПОЛНЕНИЕ И ФОТОКАТАЛИЗ

Гатина Э.Н., [1] ***Осминина А.А.*** [1,2,3], ***Жидоморова К.А.*** [1,3]

[1] *Филиал НИЦ «Курчатовский институт»–ПИЯФ–ИХС, Санкт-Петербург, gatina.en@iscras.ru*

[2] *СПбГТУ(ТИ), Санкт-Петербург*

[3] *ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*

Проведено исследование влияния титанатов магния, TiO_2, TiF_4 и ксерогеля $SiO_2{\cdot}TiO_2{\cdot}nH_2O$ на процесс гидротермального роста гидросиликатных нанотрубок. Рассмотрены процессы встраивания Ti^{4+} [1] и заполнения каналов нанотрубок диоксидом титана [2], а также оценка их влияния на фотокаталитическое выделение H_2 (рис. 1).

Для нанотрубок системы $MgO–SiO_2–MgTi_2O_5$ отмечено 8-кратное повышение активности (с 0.024% до 0.198%). Эффективность фотокаталитической генерации H_2 у образцов, синтезированных с гелем была низкой без Pt-, а с Pt-сокатализатором увеличивалась: для $MgO\text{-}SiO_2{\cdot}TiO_2$ — с 0.021 до 1.204%, для $MgO\text{-}SiO_2$-0.1 г $SiO_2{\cdot}8\%TiO_2$ — с 0.029 до 0.356%. Атомное окружение титана планируется на синхротронном EXAFS.

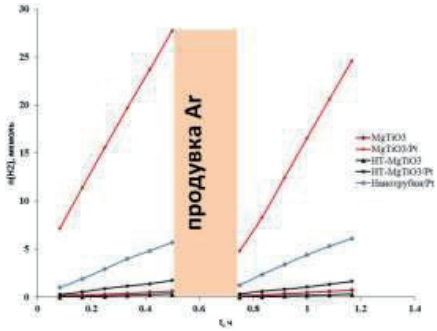


Рисунок 1. Кинетические кривые фотокаталитического выделения водорода из 10 моль.% водного раствора метанола в присутствии образцов

Работа выполнена в рамках государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИХС, тема 1023032900322-9-1.4.3.

Список используемой литературы

1. Gatina E.N., Ugolkov V.L., Osminina A.A**.** Hydrothermal synthesis of titanium fluoride–modified chrysotile nanoparticles // Glass Physics and Chemistr, 2026, 52. 1.
2. Gatina E.N., Maslennikova T.P. Formation of chrysotile nanotubes with titania in the internal channel // Nanosystems: Phys. Chem. Math., 2024, 15. 3.

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА

***Прокопович К.В.*[1], *Бурмистров И.Н.*[1,2]**

[1] *Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Prokopovich.KV@rea.ru*

[2] *Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва*

Альтернативой противогололедным реагентам могут служить электропроводящие полимерные материалы, обеспечивающие локальный нагрев за счет эффекта Джоуля. Принцип их работы заключается в том, что в объеме изоляционной полимерной матрицы создается непрерывная сеть из электропроводящих частиц наполнителя. В качестве полимерной матрицы целесообразно использовать термопластичные полимерные материалы, поскольку они технологичны, термически свариваемы и ремонтопригодны. Это позволяет формировать тонкие функциональные прослойки в дорожном покрытии, а локальные повреждения устранять нагревом. В качестве матрицы выбран полилактид (PLA), термопластичный полиэфир из возобновляемого сырья, а проводящего наполнителя — углеродная сажа PRINTEX XE-2B. Исследовали композиции с 10 мас.% сажи и 20 мас.% пластификаторов: пропиленкарбоната (PC) или сополимера этилена с винилацетатом (EVA). Удельное объемное сопротивление определяли четырехзондовым методом на Jandel RM3000; механические свойства — по ISO 527-1 и ISO 527-3 на GP UG 5 DLC-0,5 DVT.

Таблица 1. Электрофизические и механические свойства исследованных композитов

Состав	ρ, Ом·м	Модуль, МПа	Прочность, МПа	Удлинение, %
PLA	$5{,}20\times10^{13}$	2310,05	88,95	3,97
PLA–CB	0,049	2900,30	30,05	2,81
PLA–CB–PC	0,035	289,22	10,71	58,33
PLA–CB–EVA	17,880	2310,50	17,47	3,36

Введение 10 мас.% сажи снизило сопротивление PLA с $5{,}20\times10^{13}$ до 0,049 Ом·м. PC дополнительно уменьшил его до 0,035 Ом·м и повысил удлинение до 58,33 %, одновременно снизив жесткость композита. Введение EVA повысил сопротивление до 17,880 Ом·м. Таким образом, наиболее перспективна композиция PLA–CB–PC: сочетание высокой проводимости и деформируемости позволяет рассматривать ее как основу терморезистивного функционального слоя для локальной защиты дорожных покрытий от обледенения.

Список использованной литературы

1. Jailani N. et al. Chemical and physical properties of poly(lactic) acid modified bitumen // Ain Shams Engineering Journal. 2021. Vol. 12, No. 3. P. 2631–2642.
2. Wu X. et al. The Advances in Polymer-Based Electrothermal Composites: A Review // Polymers. 2025. Vol. 17, No. 15. Art. 2047.

СКОЛЬЗКИЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И ПОЛИМЕТИЛГИДРОСИЛОКСАНА С ЗАЩИТОЙ ОТ БИОПЛЕНОК ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

***Стамер К.С.*[1,2], Казарян П.С.[3], Зефиров В.В.[3] Галлямов М.О.[1,2]**

[1] Физический факультет, Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, stamer.ks18@physics.msu.ru

[2] Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, Москва

[3]Институт робототехнических систем, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва

Биопленки — это структурированные сообщества микроорганизмов на поверхностях, заключенные в матрикс и вызывающие инфекции, коррозию и биоповреждения. Перспективное решение — композитные скользкие покрытия с антимикробными агентами, сочетающие антиадгезионные и антимикробные свойства для защиты от биопленок в медицине, промышленности и других сферах. Такие композиты перспективны для создания скользких антимикробных покрытий для защиты от коррозии и биообрастания [1]. В данной работе представлен одностадийный метод получения на титане скользких композитных покрытий путем совместного электрофоретического осаждения хитозана и полиметилгидросилоксана (ПМГС) в среде H_2O/CO_2. Сочетание хитозана с полисилоксанами обеспечивает покрытию биосовместимость и бактерицидное действие за счет поликатионной природы биополимера, и снижение адгезии бактерий за счет присутствия полисилоксана. ИК-спектроскопия подтвердила наличие как хитозана, так и ПМГС в покрытиях, а с помощью РФЭС было показано, что взаимодействие полимеров приводит к образованию связи Si — N . Введение полиэтиленгликоля (ПЭГ) повысило твердость покрытий по карандашу с 2B до 2H, при этом гидрофобные и скользкие свойства сохранились неизменными. Покрытия обоих типов (без и с ПЭГ) характеризовались краевыми углами смачивания воды около 101–102° и низким гистерезисом краевых углов (около 5–6°), что обеспечивает легкое скатывание капель воды и крови. Покрытия проявили антимикробную активность и способность подавлять образование биопленок *P. aeruginosa, E. coli* и *S. aureus*. Предложенные покрытия могут стать эффективным решением для обработки медицинских изделий с целью предотвращения биообрастания и обладают высоким потенциалом для промышленного применения.

Работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (№ 24-2-10-19-1).

Список используемой литературы

1. H. Jang et al. Sustainable Biofilm Inhibition Using Chitosan-Mesoporous Nanoparticle-Based Hybrid Slippery Composites// ACS Appl. Mater. Interfaces, 2024, 16, 27728–27740.

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ $BaTiO_3$ ОТ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА

Цыганкова Д.И.[1, 2], Синельщикова О.Ю.[1, 2], Тумаркин А.В.[2], Тюрнина Н.Г.[1], Тюрнина З.Г.[1, 2]

[1]Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург, daracygankova3@gmail.com

[2]Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

Композитные $BaTiO_3$ (BT) представляют интерес для электрически управляемых приложений благодаря диэлектрической нелинейности и низким потерям [1], однако диэлектрические параметры титаната бария сильно зависят от микроструктурных параметров, регулируемых параметрами синтеза. В рамках работы рассматривали процесс спекания BT при синтезе традиционным керамическим методом (BT_{SSR}) из TiO_2 и $BaCO_3$, и в случае использования тартрата титана и $Ba(NO_3)_2$ (BT_{TA}). Предварительный обжиг проводили в порошке при 1000 °C, спекание формованных заготовок керамики, запрессованных при давлении 4 т/см^2, при: 1100 и 1250 °C. Длительность выдержки — 18-19 ч.

Рентгенофазовый анализ BT_{SSR} показывает начало образования $BaTiO_3$ при 1000 °C (≈14 масс.%), основная фаза — Ba_2TiO_4 ≈73 масс.%, $BaCO_3$ ≈13 масс.%. После прессования и термообработки при 1100 °C $BaTiO_3$ формируется полностью, а обжиг при 1250 °C улучшает спекание. При синтезе BT_{TA} после 1000 °C образуется 90 масс. % $BaTiO_3$, но сохраняется примесь Ba_2TiO_4 — 9,9 %, дальнейшая термообработка при 1100 °C уменьшала содержание Ba_2TiO_4 до 4,5 %, только обжиг при 1250 °C давал однофазный $BaTiO_3$. По данным сканирующей электронной микроскопии после 1250 °C BT_{SSR} имел зерна 2–3 мкм с четкими границами и минимальной пористостью (~2%). Керамика BT_{TA} после 1250 °C была более пористой (~6%) с зернами 0.5–4 мкм. Лучшие значения $\varepsilon = 1642{,}8$ демонстрируют образцы SSR после обжига 1250 °C, диэлектрические потери лежат в диапазоне $\tan\delta = 0{,}015–0{,}025$. Для конденсаторов из BT_{SSR} достигается примерно 34% настройка емкости при управляющем поле 11 кВ/см.

Таким образом, твердофазный синтез обеспечивает более однородную структуру, а диэлектрические параметры полученных образцов демонстрируют потенциал $BaTiO_3$ для формирования электрически управляемых структур с высокой настройкой и низкими потерями.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-79-00151 и проекта госзадания Минобрнауки № FSEE-2025-0010.

Список используемой литературы

1. Zhao Z., Wang X. et all. Ferroelectric Phase Shifters at 20 and 30 GHz // IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 2007, V. 55, P. 430–437.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 3-АЦИЛ-2-ТИЕНИЛХРОМОНОВ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ГРУППАМИ

Аглиулин К.В.*[1,2], Степанов А.В.[1], Заякин И.А.[1], Яровенко В.Н.[1], Краюшкин М.М.[1], Третьяков Е.В.[1], Насырова Д.И.[1], Айт А.О.[1,2]

[1]Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
[2]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Целью работы являлось создание гибридных хромонов с парамагнитной 2-имидазолин-3-оксид-1-оксильной группой, откликающихся как на УФ-облучение, так и на магнитное воздействие. Разработан синтез 3-ацил-2-тиофенилхромонов с радикальным фрагментом в ацильной (9) и гетарильной (13) частях молекул. Строение соединений исследовано методами УФ-спектроскопии, ЯМР, масс-спектрометрии, ЭПР и РСА; структуры 9 и 13 установлены методом РСА. Оба хромона люминесцируют, однако введение парамагнитного фрагмента снижает интенсивность флуоресценции. Замена фурильного фрагмента на тиенильный также снижает интенсивность флуоресценции продуктов УФ-облучения.

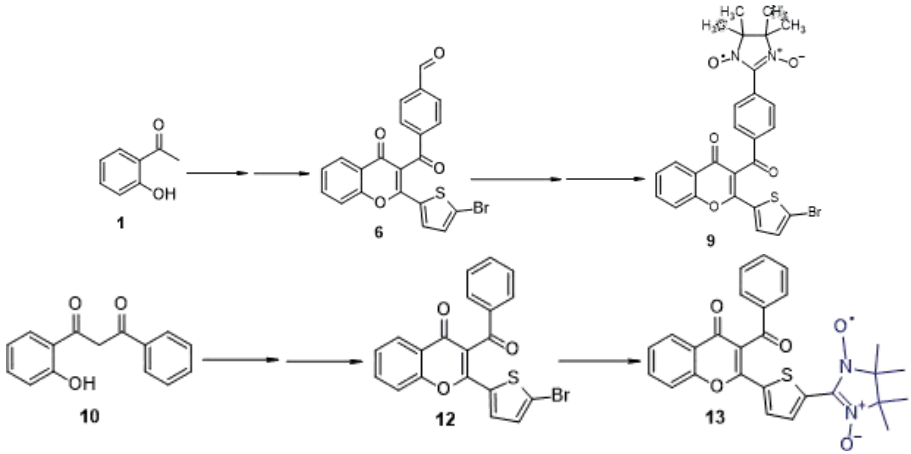


Рисунок 1. Схемы синтеза гибридных хромонов 9 (а) и 13 (б).

Список использованной литературы

1. Agliulin K.V., Stepanov A.V., Yarovenko V.N., Krayushkin M.M., Tretyakov E.V., Nasyrova D.I., Ilyushenkova V.V., Ait A.O., Valova T.M. Synthesis, structure and properties of spin-labeled photosensitive chromone derivative // Mend. Comm. 2024. V. 34. No. 6. P. 828–830.
2. Аглиулин К.В., Степанов А.В., Заякин И.А., Яровенко В.Н., Краюшкин М.М., Третьяков Е.В., Насырова Д.И., Айт А.О., Валова Т.М. Синтез, структура и исследование фототрансформации 3-ацил-2-гетарилхромонов с нитроксильными заместителями // Изв. РАН Сер. хим. 2024. Т. 73. № 11. С. 3342–3351.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ЕДИНИЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ ПРОПИТКИ И ЛЭД

***Игнатьева П.К.*[1], *Гатин А.К.*[1], *Гришин М.В.*[1]**

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

В объемной форме золото характеризуется высокой химической инертностью, однако при переходе к наноразмерному состоянию приобретает высокую каталитическую активность и уникальные оптические свойства, что обусловливает его применение в катализе, сенсорике и других областях [1,2].

Целью работы являлось исследование влияния структурной упорядоченности наночастиц золота на их локальные адсорбционные свойства. Кристаллические наночастицы синтезировали методом пропитки с последующим термическим разложением в вакууме, аморфные — методом лазерного электродиспергирования (ЛЭД). Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии исследовали их морфологию, локальную электронную структуру и взаимодействие с водородом.

Для кристаллических наночастиц адсорбция водорода начинается с периферийной области, прилегающей к границе раздела наночастица–подложка, где формируется непрерывная кольцеобразная область пониженной проводимости. При увеличении экспозиции водорода адсорбция распространяется на всю поверхность наночастиц, сопровождаясь формированием запрещенной зоны шириной около 2 эВ.

Для аморфных наночастиц адсорбция также начинается на периферийной области, однако проявляется в виде отдельных изолированных участков без формирования непрерывного кольца. Аморфные наночастицы размером менее 2 нм сохраняют металлическую электронную структуру даже при высоких экспозициях водорода и не проявляют признаков хемосорбции.

Таким образом, показано существенное влияние структурной упорядоченности на адсорбционные свойства наночастиц золота. Различный характер распределения адсорбата для кристаллических и аморфных наночастиц объясняется различным вкладом деформации атомной структуры в изменение локальной электронной структуры поверхности.

Список используемой литературы

1. Haruta M. When gold is not noble: catalysis by nanoparticles //The chemical record. — 2003. — Т. 3. — №. 2. — С. 75-87.
2. Fang C. et al. Gold nanoparticle-based optical sensors for selected anionic contaminants //TrAC Trends in Analytical Chemistry. — 2017. — Т. 86. — С. 143-154.

КИНЕТИКА РЕАКЦИИ АТОМАРНОГО ФТОРА С ЭТИЛБЕНЗОЛОМ

Болдакина И.А.[1,2], Хомякова П.С.[1], Неструева Т.И.[1,2], Васильев Е.С.[1], Бутковская Н.И.[1], Морозов И.И.[1]

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия
[2]Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия

Изучение газофазных реакций атомарного фтора с ароматическими углеводородами важно для понимания механизмов окисления в атмосферной химии и процессах горения [1]. Ароматические соединения, в частности алкилбензолы, являются значительными компонентами моторных топлив и образуются при неполном сгорании органического сырья.

В данной работе методом конкурирующих реакций с использованием проточного реактора, сопряженного с молекулярно-пучковым масс-спектрометром, исследовано взаимодействие атомов фтора с этилбензолом. Эксперименты проводятся при комнатной температуре и низких давлениях, что позволяет детектировать нейтральные радикальные продукты без их вторичных превращений и получать надежные данные для построения кинетических моделей окисления алкилароматических соединений.

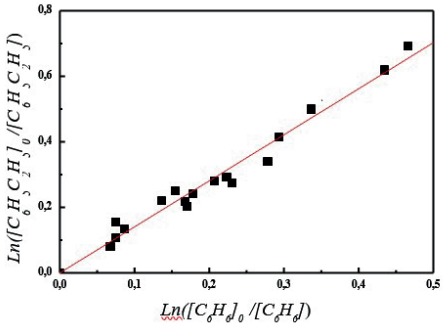


Рисунок 1. Глубина превращения этилбензола относительно циклогексана в реакциях с F. Результат эксперемента:
$k = (3.2 \pm 0.3) \times 10^{-10}$ см³·молекула⁻¹·с⁻¹ (T = 295 K)

Список используемой литературы

1. Васильев Е.С., Морозов И.И., Хомякова П.С. и др. Масс-спектрометрическое исследование реакций атомов фтора с бензолом, фторбензолом и хлорбензолом методом конкурирующих реакций // *Химическая физика*. 2024. Т. 10. С. 36–48.

N-АМИНО МОДИФИЦИРОВАННЫЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ПОЛИАМИНЫ: ПУТИ СИНТЕЗА И СВОЙСТВА

Хакимов Т.А. [1,2], ***Лесников В.К.*** [1]

[1]*Институт органической химии им Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47; timurkahak@mail.ru*

[2]*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Высший химический колледж Российской академии наук*

Фундаментальная задача современной координационной химии — создание лигандов нового типа, способных тонко настраивать свойства металлических центров в координационных соединениях под конкретные задачи. В то время как обычные азотсодержащие макроциклы (аза-крауны) хорошо изучены, их N-гетерозамещенные аналоги (в частности, N–NH_2) не описаны в литературе, несмотря на их значительный потенциал для стабилизации металлов в высоких степенях окисления и участия в редокс-катализе, например, окисления тиолов, важном процессе при сероочистке нефти (Merox).

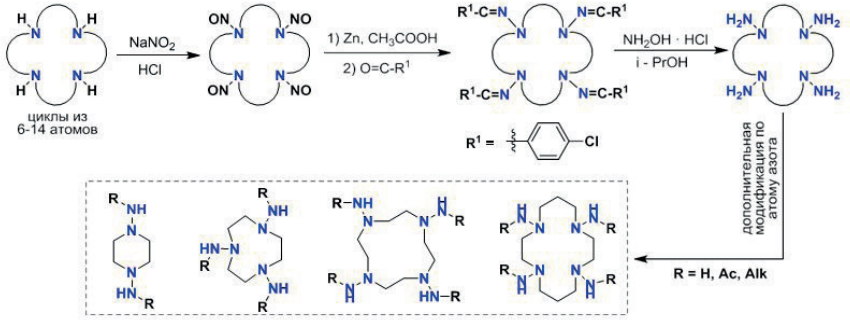


Рисунок 1. Схема синтеза N-амино-замещенных макроциклических полиаминов

Ранее было показано, что введение кислорода в макроциклические полиамины кардинально меняет свойства лигандов и их комплексов с 3d металлами[1]. Развитием этой темы стало изучение N-аминоаналогов. В результате исследований предложен многостадийный синтез ранее неизвестных N-амино-замещенных макроциклических полиаминов (рис. 1) — нового класса лигандов для ионов металлов, широко используемых в катализе. Оптимизированы условия получения и последующей модификации N-аминопроизводных с учетом размера макроцикла.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (25-73-00218).

Список используемой литературы

1. Лесников В.К., Голованов И.С и др. Crown-hydroxylamines are pH-dependent chelating N,O-ligands with a potential for aerobic oxidation catalysis // Nat. Commun, 2023, 14, 7673

КИНЕТИКА ИЗОМЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ БРОМЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ СПИРОПИРАНОВ: ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДОМ ЯМР

Белов К.В.[1], Мололина А.А.[1], Ожогин И.В.[2], Пугачев А.Д.[2], Кая С.[3], Ходов И.А.[1,4]

[1]Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново
[2]Институт физической и органической химии, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону
[3]Университет Сивас Джумхуриет, факультет естественных наук, кафедра химии, Сивас Турция
[4]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

Спиропираны являются перспективным классом обратимых фотохромных соединений благодаря простоте синтеза, возможности структурной модификации и тонкой настройки свойств. Обратимое превращение спироциклической (SP) и мероцианиновой (MC) форм под действием света, температуры, pH и полярности среды, определяет широкие возможности их применения, включая фотофармакологию. Метастабильные фотокислоты и их производные на основе спиропиранов позволяют светоуправляемо регулировать молекулярное переключение, что особенно перспективно для управления биоактивностью лекарственных соединений. Однако высокая скорость термической релаксации фотоиндуцированных состояний ограничивает их исследование методами ЯМР-спектроскопии высокого разрешения. В данной работе для решения этой проблемы привлечена молекулярная кинетическая инженерия: введение атома брома в спиропирановую фотокислоту — производное эстрадиола (EDPA-Br) позволяет замедлить изомеризацию до временного диапазона, доступного для стандартной ЯМР-спектроскопии, без потери фотохромных свойств. Результаты работы показали, что введение бромированного фрагмента позволило сохранить фотохромные свойства соединения и существенно увеличить время жизни фотоиндуцированного состояния. Анализ ^{1}H ЯМР спектров подтвердил структурную целостность EDPA-Br и одновременное присутствие форм, находящихся в динамическом равновесии. Согласно расчетам DFT, глобальному минимуму свободной энергии соответствует MC форма, тогда как SP форма представляет собой метастабильную. Для количественного мониторинга термической релаксации были выбраны резонансные сигналы, относящиеся к протонам эстрадиольного фрагмента, интенсивности которых изменялись комплементарно. За время, равное 113.6 ч, было получено 37 последовательных спектров ^{1}H ЯМР с интервалом 3.07 ч. Кинетический анализ показал соответствие модели первого порядка с кажущейся константой скорости $\mathbf{5.13 \times 10^{-2}}$. Дополнительным подтверждением структурной трансформации стало обратимое смещение сигнала гидроксильного протона эстрадиольного фрагмента с 3.60 до 4.81 ppm после облучения. Согласно данным DOSY-ЯМР, средний коэффициент диффузии EDPA-Br составил **(1.01 ± 0.18) × 10-11**, тогда как для ДМСО — $\mathbf{3.80 \times 10^{-10}}$; отсутствие медленно диффундирующих компонентов указывает на отсутствие крупных супрамолекулярных комплексов.

Таким образом, увеличение времени жизни фотоиндуцированного состояния обусловлено внутренними свойствами бромированной фотокислоты, а совокупность данных УФ спектроскопии, количественной ^{1}H ЯМР, DOSY-ЯМР и DFT расчетов подтверждает предложенный механизм релаксации и эффективность подхода для исследования ранее недоступной для ЯМР динамики метастабильных фотопереключателей.

Работа выполнена за счет средств гранта РНФ № 26-73-00005

ФОРМИРОВАНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ ИОНОВ ЛЕТУЧИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В МЕТОДЕ ИОНИЗАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМОЙ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

Тимакова С.И., Арабова З.М.

ФГБУН Институт геохимии и аналитической химии
имени В.И. Вернадского РАН, Москва
E–mail: timakova@geokhi.ru

Метод APLPI (Atmospheric Pressure Laser Plasma Ionization) основан на ионизации органических соединений в условиях воздействия лазерно-индуцированной плазмы при атмосферном давлении [1]. Режим генерации отрицательных ионов в методе APLPI малоизучен. Однако исследование формирования отрицательно заряженных ионов важно для понимания процессов, происходящих при воздействии лазерно-индуцированной плазмы на молекулы газовой среды, и определения аналитических возможностей метода.

Ионный источник APLPI использовали в сочетании с масс-анализатором высокого разрешения «Orbitrap». Генерацию плазмы осуществляли путем воздействия сфокусированным излучением импульсного Nd:YAG лазера (длина волны 1.06 мкм, длительность импульса 0.5 нс, энергия в импульсе 400 мкДж) на поверхность металлической мишени, находящейся перед заборником пробы масс-спектрометра.

В докладе представлены результаты исследования ионизации летучих органических соединений (ЛОС) в методе APLPI в лабораторном воздухе, азоте и аргоне. Исследовано более сотни модельных растворов органических соединений, относящихся к различным химическим классам (спирты, альдегиды, кетоны, карбоновые кислоты и т.д.). Получены масс-спектры и идентифицированы основные характеристические ионы.

Установлено, что оптимальной газовой средой для ионизации ЛОС в методе APLPI является воздух, из компонентов которого формируются первичные ионы-реагенты, инициирующих процессы химической ионизации аналитов. Выявлен критерий, определяющий возможность протекания ионизации с переносом протона в воздухе. Он определяется как изменение энергии Гиббса гипотетической реакции депротонирования, проходящей в газовой фазе в стандартных условиях и составляет $\Delta G_A \approx 1445$ кДж/моль.

Показана возможность детектирования ЛОС в образцах сложного состава на примере анализа продуктов переработки икорно-ястычных комплексов толстолобика и сазана.

Список используемой литературы

1. Пенто А. В., Никифоров С. М., Симановский Я. О., Гречников А. А. и Алимпиев С. С. Лазерная абляция и ионизация излучением лазерной плазмы при атмосферном давлении в масс-спектрометрии органических соединений // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. №. 1. С. 55-59.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТОМЕХАНИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ НА РАЗРУШЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ В КОМПЛЕКСЕ БИОТИН-СТРЕПТАВИДИН

Андрюшков С.А.[1]***, Никитин А.А.***[1]

[1] *Университет МИСИС, г.Москва,*
SergeyAndrushcov@yandex.ru

Магнитные наночастицы (НЧ) феррита кобальта (ФК) представляют особый интерес для биомедицинских применений благодаря выраженным магнитным характеристикам, биосовместимости и химической стабильности. В магнитомеханическом подходе НЧ преобразуют энергию низкочастотного магнитного поля в механический момент, воздействующий на связанные молекулы и способный изменять их конформацию и активность. Данный принцип применяется в частности для дистанционного управления механочувствительными рецепторами, ферментами и ионными каналами [1].

Для связывания НЧ с молекулярными мишенями широко применяется высокоаффинная пара биотин-стрептавидин, однако механическая стабильность комплекса сильно зависит от скорости и режима приложения нагрузки к нему. При этом устойчивость комплекса биотин-стрептавидин непосредственно при воздействии функционализированных НЧ изучена недостаточно. В данной работе для исследования влияния магнитомеханического воздействия НЧ на разрушение комплекса биотин-стрептавидин были получены следующие наноструктуры: ядра ФК в немагнитной оболочке SiO_2 с флуоресцентно-меченым (Cy3) биотином, которые после фиксировали на эпокси-активированной стеклянной подложке с иммобилизованным Cy5-меченным стрептавидином на ней. Полученные системы подвергали воздействию вращающегося магнитного поля. Изменение интенсивности флуоресценции после воздействия поля свидетельствовало об отрыве биотинилированных НЧ от поверхности вследствие разрушения межмолекулярных связей. При интерпретации результатов также учитывались возможные вклады морфологии и магнитных свойств НЧ, тепловых флуктуаций и фотостабильности меток.

В результате установлено, что оптимальными являются параметры образца с толщиной оболочки SiO_2 12 нм: относительно образца с меньшей толщиной оболочки, который не может обеспечить достаточное растяжение связи биотин-стрептавидин для ее разрыва, и более большого образца, большая площадь поверхности которого превращает его в «тепловой парус», за счет чего вклад его магнитного момента в достижение разрыва связи становится пренебрежимо малым на фоне стохастических броуновских флуктуаций.

Список используемой литературы

1. Aleksey Nikitin, et.al.: Unveiling the Role of the Properties of Magnetic Nanoparticles for Highly Efficient Low-Frequency Magneto-Mechanical Actuation of Biomolecules, 2023

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ АНСАМБЛИ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАПИРРОЛА И В-ЦИКЛОДЕКСТРИНА

***Нерсесян Э.С.*[1], *Клименко И.В.*[1], *Лобанов А.В.*[1,2]**

[1] *ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Edgar.S.Nersesyan@gmail.com*

[2] *ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет», Москва*

Тетрапирролы представляют значительный интерес для создания фотосенсибилизаторов, однако их практическое применение в водных средах ограничивается низкой растворимостью и склонностью к агрегации с образованием фотохимически неактивных форм. Одним из подходов к решению данной проблемы является формирование супрамолекулярных комплексов включения с циклическими олигосахаридами. Включение гидрофобной молекулы в полость циклодекстрина позволяет изменять ее микроокружение и стабилизировать мономерное состояние фотосенсибилизатора [1–3].

Целью настоящей работы являлось исследование особенностей взаимодействия хлорида фталоцианина алюминия (AlClPc) с β-циклодекстрином (β-CD) и определение основных физико-химических характеристик образующихся супрамолекулярных комплексов. Комплексообразование исследовали в диапазоне концентраций β-CD от 10^{-7} до 10^{-3} М с использованием методов электронной абсорбционной, флуоресцентной и ИК-спектроскопии. Наблюдаемые в ходе эксперимента данные спектрофлуоресцентного анализа согласуются с данными ИК- и абсорбционной спектроскопии и подтверждают стабилизацию мономерной формы AlClPc при взаимодействии с β-CD.

Полученные результаты демонстрируют перспективность супрамолекулярных систем, потенциально применимых в биофотонике и фотодинамической терапии.

Исследование проведено в рамках государственного задания ИБХФ РАН № 125020401357-4.

Список используемой литературы

1. Nersesyan E. S., Klimenko I. V., Lobanov A. V. и др. Supramolecular Complexes Based on a Dimeric β-Cyclodextrin Derivative and 5,10,15,20-Tetraphenylporphyrin: Synthesis and Photophysical Properties // *Macroheterocycles*, 2026. 19(1). 86–91.
2. Taniguchi M., Lindsey J. S. и др. Comprehensive review of photophysical parameters (ε, ϕf, s) of tetraphenylporphyrin (H2TPP) and zinc tetraphenylporphyrin (ZnTPP)-Critical benchmark molecules in photochemistry and photosynthesis // *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev*, 2021, 46. 100401 (1–61).
3. Molupe N., Babu B. и др. Photodynamic activity of Sn (IV) meso-tetraacenaphthylporphyrin and its methyl-β-cyclodextrin inclusion complexes on MCF-7 breast cancer cells // *J. Porphyr. Phthalocyanines*, 2019, 23(11n12). 1486

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНИЦИИРОВАНИЯ ПЛАЗМОН-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛАМИДА НА ЗОЛОТЫХ ПЕРФОРИРОВАННЫХ НАНОПЛЕНКАХ.

***Волосников М.И.*, Сопова Н.С., Боченков В.Е.**

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Гибридные метал-полимерные наноструктуры представляют значительный интерес для создания высокочувствительных оптических сенсорных платформ и функциональных поверхностей. Перспективный подход для создания таких наноструктур представляет собой плазмон-индуцированная полимеризация (ПИП), при которой энергия локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР) используется для инициации полимеризации [1]. В настоящее время предполагается существование трех основных механизмов инициирования ПИП: фотохимический, за счет локальных усилений электромагнитного поля при возбуждении ЛППР, фотоэлектронная инжекция, за счет высокоэнергетических носителей заряда, которые могут возникать при релаксации ЛППР, и термоплазмонный, за счет локализованного нагрева вблизи поверхности плазмонной наноструктуры. Знание конкретного механизма важно для прецизионного контроля над процессом, однако задача по установлению механизма ПИП является достаточно сложной и нерешенной. В данной работе предложен подход, позволяющий определить механизм ПИП на основе сопоставления изменения оптических спектров поглощения с данными численного моделирования при помощи метода конечных разностей во временной области (FDTD). Была впервые продемонстрирована ПИП акриламида на золотых перфорированных нанопленках, полученных методом коллоидной литографии. На основе анализа величин красного сдвига полос ЛППР, подтвержденного численно, был установлен механизм инициирования ПИП за счет фотоэлектронной инжекции. Результаты исследования открывают новые возможности для контролируемого синтеза гибридных метал-полимерных наноструктур.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова (тема № АААА-А21-121011590090-7).

Авторы выражают искреннюю благодарность И.А. Бахратову за выполнение электронно-микроскопических исследований.

Список используемой литературы

1. Kherbouche, Y. Luo, N. Félidj, C. Mangeney, Chem. Mater. 32 (2020) 5442.

ЙОД-ЗАМЕЩЕННЫЕ ВАНАДИЛПОРФИРИНЫ КАК ОСНОВА НОВЫХ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ

***Лисюкова А.А.*[1,2], *Зимина А.М.*[2], *Третьяков Е.В.*[2]**

[1] *Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва*

[2] *Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского, Москва, lisyukovaa@ioc.ac.ru*

Молекулярные многоспиновые системы представляют интерес для изучения спин-спиновых взаимодействий и разработки функциональных материалов для молекулярной спинтроники, квантовой сенсорики и прочих направлений квантовых технологий. Особый интерес представляют комплексы порфирина, в которых парамагнитный центр металлопорфирина может сочетаться с устойчивыми радикальными центрами.

В настоящей работе исследованы йод-замещенные ванадилпорфирины, замещенные в пара-положениях. Установлено, что исследуемые соединения содержат центральный ванадильный парамагнитный центр и один или два стабильных триазинильных радикала. Наличие двух устойчивых радикалов позволяет рассматривать данный комплекс как многоспиновую систему, в которой возможны взаимодействия как между ванадилом и радикалом, так и между самими радикалами.

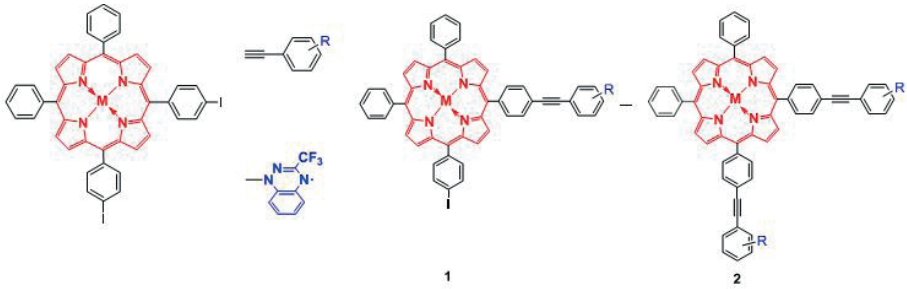


Схема 1. Синтез многоспиновых систем на основе йод-замещенного ванадилпорфирина.

Представленное соединение **2** является первыми представителями трехспиновых систем на основе ванадилпорфиринов. Соединения выделены в индивидуальном состоянии и охарактеризованы современными физико-химическими методами анализа.

Список используемой литературы

1. Зимина А. М., Шмаков А.С., Степанов А.В., Лисюкова А.А., Заякин И.А., Сосунов Е.А., Грицан Н.П., Дмитриев А.А., Акимов А.В., Третьяков. Комплекс ванадилпорфирина, функционализированный нитронилнитроксидом//Inorg. Chem. — 2026, представлен.

МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО МАГНИТА В ОКРУЖЕНИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Куницына Е.И.[1], Моргунов Р.Б.[1]

[1] ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
kunya_kat@mail.ru

Мономолекулярные магниты (SMM) представляют интерес для создания элементов молекулярной электроники, спиновых устройств и квантовых систем благодаря возможности управления их магнитными состояниями на молекулярном уровне. Одной из ключевых задач является управление скоростью магнитной релаксации и устойчивостью спинового состояния. Помимо температуры и внешнего магнитного поля, существенное влияние на магнитную динамику SMM может оказывать их локальное окружение и контакт с поверхностью другого материала при интеграции в устройство.

В работе исследовано влияние углеродных нанотрубок (УНТ), содержащих ферромагнитные наночастицы железа, на магнитные свойства мономолекулярного магнита на основе диспрозия $[\mathbf{Dy}(LCH_3)(Cy_3PO)_2]ClO_4 \cdot CH_3CN$ при их прессовании в композит.

При низких температурах обнаружено неаддитивное изменение магнитных свойств композита. Обнаружено изменение динамической магнитной восприимчивости: для чистого SMM наблюдались два релаксационных максимума, соответствующие квантовому туннелированию намагниченности и прямому механизму релаксации. В композите оба максимума смещались к более высоким частотам; высокочастотный максимум выходил за пределы доступного диапазона SQUID-магнитометра (1400 Гц). Для низкочастотного максимума это направление сдвига противоположно эффекту увеличения внешнего магнитного поля, при котором его частота уменьшается.

Полученные результаты показывают, что изменение магнитной релаксации нельзя объяснить только дополнительным магнитным полем ферромагнитных наночастиц, находящихся в УНТ. Наиболее вероятным объяснением является непосредственное взаимодействие SMM с поверхностью нанотрубок, в том числе электронный обмен, изменяющий величину лигандного поля.

Работа выполнена при поддержке государственного задания ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН 124013100858-3.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ НАНОЗИМ С ПЕРОКСИДАЗОПОДОБНОЙ И ФОТОТЕРМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ НА ОСНОВЕ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА И ГИДРОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА

***Шевердина К.М.*[1,2], Головешкин А.С.[1], Голубь А.С.[1]**

[1] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, sheverdinak@list.ru*

[2] *Московский физико-технический институт, Долгопрудный*

В настоящее время одной из актуальных задач материаловедения является разработка нанозимов, функциональных наноматериалов, способных имитировать каталитическую активность ферментов. Такие материалы позволяют не только воспроизводить ферментативную активность, но и лучше сохраняют свои свойства в условиях, при которых работа с природными ферментами заметно ограничена. При этом особое внимание уделяется нанозимам, проявляющим пероксидазоподобную активность, которая выражается в их способности генерировать активных форм кислорода (АФК) из H_2O_2, что представляет интерес как для биомедицины, так и для очистки сточных вод от органических загрязнителей.

В ходе работы был получен гетеослоистый наноматериал с чередованием железосодержащих гидроксидных монослоев и монослоев дисульфида молибдена, проявляющий высокую пероксидазоподобную активность. Каталитические свойства материала были исследованы на примере реакции окисления хромогенного субстрата, 3,3′,5,5′-тетраметилбензидина (ТМБ) в рамках формализма Михаэлиса-Ментен, что позволило определить ряд кинетических параметров: максимальную скорость реакции, константы Михаэлиса и каталитическую эффективность.

Было установлено, что полученный нанозим также обладает высокой фототермической (ФТ) активностью в ближнем инфракрасном диапазоне, позволяя конвертировать в тепло 49,6% лазерного излучения с длиной волны 808 нм, что сопоставимо с эффективностью фотоконверсии наиболее активных ФТ материалов на основе MoS_2.

Таким образом, пероксидазоподобные свойства полученного материала делают его перспективным для воздействия на патогены и органические загрязнители с использованием АФК, а фототермические свойства позволяют расчитывать на усиление полезного эффекта за счет комбинированного (АФК+ФТ) воздействия.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-03-2026-024 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЛАЗЕРНО-СИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ ВИСМУТА

Фомин К.О.[1,2], Тупицын И.М. [1], Маврешко Е.И. [1,2], Фроня А.А. [1,2], Завестовская И.Н. [1,2,3]

[1] ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, k.fomin@lebedev.ru

[2] ФГАОУ ВО Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва

[3] ФГБУ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Висмут относится к тяжелым металлам, но при этом обладает биосовместимостью и используется для лечения болезней внутренних органов и инфекционных заболеваний [1]. В настоящее время активно исследуются наноматериалы на основе висмута, синтезированные методом лазерной абляции в жидкости. Этот метод представляется оптимальным для синтеза биомедицинских наноматериалов, поскольку содержание итогового продукта определяется составом мишени абляции и жидкой среды. Однако в процессе лазерной абляции и постабляционный период могут происходить химические превращения в синтезируемых наноматериалах. Такое превращение наблюдается в при лазерной абляции металлического висмута фемтосекундным излучением в воде, в результате чего происходит образование преимущественно наночастиц оксида и карбоната висмута [2].

Представленная работа была нацелена на исследование синтеза коллоидных растворов наночастиц висмута методом наносекундной лазерной абляции в дистиллированной воде. При этом длительность импульса составляла 120 нс с рабочей длиной волны излучения 1064 нм. Обнаружено, что при таких условиях образованный коллоид содержал наночастицы именно металлического висмута. Но раствор являлся нестабильным и со временем (через 1,5-2 часа) наноструктуры висмута преобразовывались в оксиды/карбонаты. Размеры частиц в ходе этого процесса увеличивались, достигая микронных размеров. Установлено, что процесс преобразования напрямую связан с доступом раствора к окружающему воздуху. При изоляции раствора от воздушной среды и добавлении ПАВ (полоксамера 184) наблюдалось замедление происходящих преобразований. Исследование динамики превращения наноразмерного висмута в водных растворах крайне важно с точки зрения практического использования в виде медицинских препаратов и их применения в тераностике.

Список используемой литературы

1. Slikkerveer A., de Wolff F.A. Pharmacokinetics and toxicity of bismuth compounds. Med Toxicol Adverse Drug Exp, 1989, 303-23.
2. Bulmahn J. C., Tikhonowski G.V. et al. Laser-Ablative Synthesis of Stable Aqueous Solutions of Elemental Bismuth Nanoparticles for Multimodal Theranostic Applications // Nanomaterials, 2020, 10(8), 1463.

УСТАНОВЛЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПЛАЗМОН-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛАМИДА НА ЗОЛОТЫХ НАНОСТЕРЖНЯХ

***Сопова Н.С.*, Боченков В.Е.**

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, ninasopova@mail.ru

В настоящее время актуальной областью исследований является плазмонный катализ — явление, при котором энергия плазмонного резонанса (ЛППР) используется для инициирования химических реакций. Особый интерес представляет собой плазмон-индуцированная полимеризация (ПИП), позволяющая селективно функционализировать металлические наноструктуры с прецизионным контролем локализации и состава полимера[1]. Выделяют несколько основных путей инициирования ПИП: за счет локального усиления электромагнитного поля (фотохимический механизм), при помощи высокоэнергетических носителей заряда (фотоэлектронная инжекция), а также за счет термоплазмонных эффектов. Недавно было продемонстрировано протекание фотополимеризации акриламида в присутствии растущих наночастиц золота без использования фотоинициаторов [2], при этом вопрос о доминирующем механизме процесса является открытым. В данной работе, в качестве плазмонного субстрата используются золотые наностержни. Подобные анизотропные наноструктуры демонстрируют две плазмонные моды. При возбуждении продольной моды высоковероятно образование высокоэнергетических носителей заряда, что не характерно для поперечной моды. Таким образом, селективное возбуждение различных плазмонных мод позволило селективно переключаться между фотоэлектронным и термоплазмонным механизмами ПИП, обеспечивая контролируемое пространственное распределение полимера на наноуровне.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова (тема № АААА-А21-121011590090-7).

Авторы выражают искреннюю благодарность С.В. Максимову за выполнение электронно-микроскопических исследований. Исследование проводилось при поддержке ЦКП МГУ «Нанохимия и наноматериалы»

Список используемой литературы

1. I. Kherbouche, et al. Plasmon-Mediated Surface Functionalization: New Horizons for the Control of Surface Chemistry on the Nanoscale // Chem. Mater. V.32 (2020) P.5442–5454.
2. N.M. Aguilar, et al. Polyacrylamide-based nanocomposite hydrogel prepared by synergistic solar light-induced polymerization // Macromol. Res. V.33 (2025) P.399–405.

МАГНИТНАЯ НАНОЖИДКОСТЬ FE_3O_4 В ПАССИВНОЙ СИСТЕМЕ ОХЛАЖДЕНИЯ, ОСНОВАННОЙ НА ТЕРМООСМОТИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ

Судаков В.С.[1]

[1]Федеральное Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва,
sudakov6@mail.ru

Важным преимуществом феррожидкостей, как и многих других наножидкостей, является повышенная теплопроводность благодаря наличию наночастиц в жидкости. Благодаря уникальным свойствам наножидкостей они используются для интенсификации теплообмена в различных системах охлаждения. Однако у феррожидкостей есть один существенный недостаток, связанный с деградацией их магнитных свойств с повышением температуры. Поэтому системы охлаждения на основе феррожидкости не могут работать при температурах выше точки Кюри. Кроме того, эффективность функционирования маг-нитокалорического охлаждающего устройства существенно зависит от значения пиромагнитного коэффициента. В связи с этим представляет интерес создание такой пассивной системы охлаждения на основе феррожидкости, где влияние пиромагнитного эффекта было бы минимальным. Для достижения этой цели была предложена схема пассивной системы, где магнитная наножидкость движется под действием термоосмоса и магнитной силы (рис. 1).

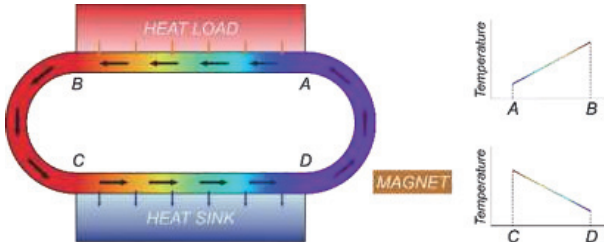


Рисунок 1. Схематическое представление пассивной системы охлаждения на основе термоосмоса и феррожидкости.

В экспериментальном исследовании анализируется движение феррожидкости в микроканале при изменении температуры, температурного градиента, толщины канала и концентрации наночастиц [1].

Список используемой литературы

1. B. Kichatov, A. Korshunov, V. Sudakov, A. Golubkov, A. Kolobov, L. Chikishev. Magnetic nanofluid Fe3O4 in passive cooling system based on thermo-osmotic effect // International Journal of Thermal Sciences — 2024. — V. 199. — P. 108931.

МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИ-β-ПИНЕНА МЕТОДОМ ФОТОИНИЦИИРУЕМОГО ГИДРОТИОЛИРОВАНИЯ

Клачек М.А., Хорецкий М.С., Мартьянов Н.А., Никишев П.А.

Учреждение БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», Минск, che.klachekMA@bsu.by

Растительная биомасса является источником широкого спектра соединений, которые могут выступать в качестве возобновляемого сырья для получения полимерных материалов. Среди таковых особый интерес представляет β-пинен, полимеры на основе которого обладают сравнительно высокой температурой стеклования (до 90 °C). Поли-β-пинен также содержит ненасыщенные связи, одним из популярных способов модификации которых является радикальное гидротиолирование. Несмотря на универсальность реакции, сведения о ее применении по отношению к материалам на основе терпенов остаются немногочисленными. Работа посвящена исследованию функционализации поли-β-пинена меркаптоэтанолом методом радикального фотоиндуцируемого гидротиолирования.

Катионную полимеризацию β-пинена (1,0 М, CH_2Cl_2, 78 °C, Ar) осуществляли с использованием инициирующей системы кумилхлорид:$TiCl_4$ (1:1, $14{,}8 \cdot 10^{-3}$ М). В результате был получен полимер массой MW 3200 г·моль$^{-1}$ и Đ 1,5. Модификацию полученного поли-β-пинена осуществляли в тетрагидрофуране при облучении светом с λ = 365 нм и концентрации мономерных звеньев 1,1 М. Концентрации меркаптоэтанола и фотоинициатора фенилбис(2,4,6-триметилбензоил)-фосфиноксида составляли 2,1 М и $3{,}6 \cdot 10^{-2}$ М. Масса MW модифицированного полимера составила 4300 г·моль$^{-1}$ и Đ 1,8.

Результаты ^{1}H ЯМР-спектроскопии полученного образца подтвердили протекание реакции гидротиолирования. Так уменьшилась суммарная интегральная интенсивность сигналов олефиновых протонов циклогексенильных звеньев. При этом относительное содержание «1,3-» мономерных звеньев снизилось на 15% и появился сигнал гидроксиэтильного фрагмента меркаптоэтанола. Для образца модифицированного полимера методом дифференциальной сканирующей калориметрии было установлено увеличение температуры стеклования с 73 до 92 °C, что свидетельствует об усилении межмолекулярных взаимодействий и о снижении термодинамической гибкости цепей полимера.

Модифицированный таким образом поли-β-пинен представляет собой полиол, потенциально пригодный для использования в синтезе полиуретанов, а также перспективную основу для получения покрытий и мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проект № Х26М-054, № гос. регистрации 20261548.

КИНЕТИКА ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ 3,4-ДИАМИНОФУРАЗАНА ПО ДАННЫМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ

***Котов Н.О.*, Мельников И.Н., Пивкина А.Н.**

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва,
nikita.kotov@chph.ras.ru

Исследование термического разложения энергоемких веществ является важным этапом для обеспечения безопасности при хранении и эксплуатации данных соединений. В работе изучена кинетика разложения и термическое поведение ДАФ, который является прекурсором для синтеза широкого ряда энергоемких соединений. Получение ДАФ впервые было описано еще в 1968 г. [1], но в литературе все еще сохраняется неполнота данных о термолизе 3,4-диаминофуразана.

Закономерности термического разложения ДАФ исследованы с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) при скорости нагрева 0,5-10 К/мин. Проведены эксперименты с использованием адиабатического реакционного калориметра (АРК). Анализ экспериментальных данных выполнен с помощью изоконверсионного подхода и формального кинетического моделирования.

При анализе кривыз ДСК с помощью изоконверсионного метода показано, что дифференциальный метод Фридмана и интегральный метод Вязовкина дают одинаковую зависимость энергии активации от степени превращения. Определенно, что термолиз начинается с энергией активации около 150-160 кДж/моль, которая возрастает во время процесса разложения до 180 кДж/моль. В ходе формального кинетического моделирования предложена кинетическая модель, описывающая термическое разложения ДАФ одной стадией в форме расширенного уравнения Праута-Томпкинса с фиксированным значением n=1 и дробным значением m. Рассчитанные кинетические параметры имеют вид: E_a=159,7±0,3 кДж/моль, log(A, 1/с)=13,94±0,03.

По полученной кинетической модели произведено моделирование термического поведения ДАФ при повышенных температурах в условиях адиабатического реактора. Произведено сравнение расчетных данных с кривыми температуры, полученных с помощью адиабатического реакционного калориметра.

Список используемой литературы

1. Coburn M.D., J. *Heterocyclic Chem*., 1968, 5. 83.

СИНТЕЗ ЦВИТТЕР-ИОННЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ С СУЛЬФОБЕТАИНОВЫМИ ГРУППАМИ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ, ГЕКСАМЕТИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И ГЕКСАМЕТИЛЕНДИАМИНА

***Тит Е.С.*[1], Василенко И.В.[1], Гапоник Л.В.[1], Костюк С.В.[2], Никишев П.А.[1]**

[1] Учреждение Белорусского государственного университета «Научно-исследовательский институт физико-химическим проблем», ул. Ленинградская, 14, 220006, Минск, Беларусь, e-mail: ekterinatit@mail.ru;

[2] Sorbonne Universite, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moleculaire, Equipe Chimie des Polymeres, Paris, France

Полиуретаны (ПУ) являются наиболее востребованными полимерами лагодаря разнообразию химического строения и широкому диапазону свойств, что делает их незаменимыми в различных областях. В медицине ПУ применяются для создания искусственных клапанов сердца, сосудистых протезов, катетеров и кардиостимуляторов. Особое внимание уделяется разработке новых типов ПУ с повышенной био- и гемосовместиимостью, а также устойчивостью к тромбообразованию. Для придания ПУ вышеуказанных свойств в их структуру вводят сульфобетаиновые, карбоксибетаиновые и фосфорилхолиновые группы [1]. В результате образуются цвиттер-ионные полиуретаны (ЦПУ), содержащие в мономерном звене как анионные, так и катионные группы. Наличие ионных групп в структуре ПУ способствует образованию устойчивого гидратационного слоя, эффективно снижающего адсорбцию белков и риск тромбоза. ЦПУ перспективны для устройств, длительно контактирующих с кровью, включая малые сосудистые протезы, искусственные легкие и микрофлюидные системы.

В рамках работы синтезирован ряд цвиттер-ионных полиуретанов на основе полиэтиленгликоля, гексаметилендиизоцианата и гексаметилендиамина с варьируемым содержанием сульфобетаиновых диольных фрагментов. Структура полученных полимеров подтверждена методами ИК- и 1Н ЯМР-спектроскопии. Термические характеристики материалов оценены с использованием термогравиметрического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии.

Работа выполнена в рамках государственной программы научных исследований «Химические процессы и технологии», 2026-2030 гг. (задание 2.1.01.01, № гос. регистрации 20261334).

Список используемой литературы

1. Adipurnama I., Yang M., Ciach T., Butruk-Raszejab B. Surface modification and endothelialization of polyurethane for vascular tissue engineering applications: a review // Biomaterials Science, 2017, 5. С. 22-37.

ИНКАПСУЛЯЦИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА МЕТОДОМ ДИСПЕРСИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

***Есаев М.А.*[1,2], Киселева А.А[2,3], Шиман Д.И.[1,2], Костюк С.В.[4]**

[1] Институт регенеративной медицины, Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова (Сеченовский университет), Москва, 119991, Россия

[2] Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, ул. Ленинградская, 14, 220006, Минск, Беларусь

[3] Белорусский государственный университет, ул. Ленинградская, 14, 220006, Минск, Беларусь

[4] Sorbonne Universite, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moleculaire, Equipe Chimie des Polymeres, 4 place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

Гидрофобные полимерные сферы с инкапсулированными магнитными наночастицами представляют большой интерес в различных областях, таких как разделение клеток, очистка белков/ДНК/РНК, промышленная очистка воды и др.[1] В настоящее время такие материалы получают методом миниэмульсионной полимеризации, что ограничивает диаметр получаемых частиц сотнями нанометров. Для решения данной проблемы было предложено использование метода дисперсионной полимеризации. Из исходных частиц магнетита, покрытых олеиновой кислотой (8,7±1 нм), были получены кластеры, стабилизированные поливинилпирролидоном (63±15 нм), обеспечивающие совместимость наночастиц с фазой полимера. В ходе дисперсионной полимеризации стирола в присутствии гидрофильных магнитных кластеров наночастиц привело к формированию магнитных полимерных микросфер с содержанием магнитных частиц 6.5%, что соответствует эффективности инкапсуляции 68%. Для повышения эффективности включения частиц использовали комбинацию стирола и дивинилбензола, чтобы обеспечить полную интеграцию частиц в полимерную матрицу. В результате наблюдалась количественная инкапсуляция магнитных наночастиц в полимерную матрицу. Таким образом, был разработан эффективный метод инкапсуляции неорганических нанокристаллов на основе Fe_3O_4, позволяющий получать магнитные полимерные микросферы (D_n=595±82 нм) с высокой эффективностью инкапсуляции магнитных наночастиц.

Список используемой литературы

1. Sharifianjazi, F.; Irani, M.; Esmaeilkhanian, A.; Bazli, L.; Asl, M. S.; Jang, H. W.; Kim, S. Y.; Ramakrishna, S.; Shokouhimehr, M.; Varma, R. S. Polymer Incorporated Magnetic Nanoparticles: Applications for Magnetoresponsive Targeted Drug Delivery // Materials Science and Engineering: B 2021, 272, 115358.

ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ГРАФТ-СОПОЛИМЕРЫ ПОЛУЧЕННЫЕ ИЗ МАКРОМОНОМЕРОВ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

***Ланкина Ю.И.*[1,2], *Ксендзов Е.А.*[2], *Никишев П.А.*[1], *Костюк С.В.*[3], *Кирилэ Т.Ю.*[4], *Филиппов А.П.*[4,5]**

[1]Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск,
[2]Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
[3]Университет Сорбонна, Парижский институт молекулярной химии, Париж, Франция, [4]Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург,
[5]Санкт-Петербургский Политехнический университет им. Петра Великого, г. Санкт-Петербург, julialnk6789@mail.ru

Графт-сополимеры полиэтиленгликоля и поликапролактона могут проявлять термочувствительные свойства в водных растворах. Интерес к ним вызван возможным биомедицинским применением, в частности для доставки лекарств и генов, клеточной инженерии и многого другого [1]. Для установления значений нижней критической температуры (НКТР) таких графт-сополимеров был получен ряд макромономеров из ε-капролактона, содержащих концевую малеимидную группу, с Mn в диапазоне 250–950 г/моль. Также были получены макромономеры из полиэтиленгликоля с Mn в диапазоне 500–5000 г/моль с концевой стирольной группой. В результате RAFT-сополимеризации 2-гидроксиэтилмалеимида со стирольным макромономером с Mn = 500 г/моль был получен графт-сополимер со значением НКТР 41,4°С. Аналогично, методом RAFT-сополимеризации капролактоновых макромономеров с Mn = 480 и 250 г/моль со стирольным макромономером с молярной массой 500 г/моль были синтезированы сополимеры со значениями НКТР 11,4°С и 44,0°С соответственно. Установлено, что сополимеры, содержащие полиэтиленгликоль с молярными массами в диапазоне 2000–5000 г/моль, характеризуются выраженной склонностью к кристаллизации. Показано, что НКТР полученных графт-сополимеров зависит от молярных масс используемых макромономеров.

Работа выполнена в рамках государственной программы научных исследований «Химические процессы и технологии», 2026-2030 гг. (задание 2.1.01.01, № г.р. 20261334).

Список используемой литературы

1. Singh A., Dowdall N., Hoare T. Poly (Oligo (Ethylene Glycol) Methacrylate)-Based Polymers in Biomedical Applications: Preparation and Applications //Biomacromolecules. — 2025

ЗЕЛЕНЫЙ СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ФУРАНОВЫХ ПОЛИМЕРОВ И ИХ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Дараган И.В.*[1], *Голышева А.Н.*[2], *Колыхалов Д.А.

[1] *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тульский государственный университет», Тула, iriska11_00@mail.ru*

Разработаны два подхода к получению новых биооснованных полимерных материалов на основе 2,5-диформилфурана (ДФФ) и 2,2-оксибис(метилена)фурана (ОБМФ) с использованием медь-катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения (CuAAC). Первый подход (А) предусматривает предварительный синтез алкинового фуранового мономера с последующей поликонденсацией с бис-азидными линкерами (C_4–C_{10}). Второй подход (Б) реализует одностадийный синтез без выделения алкинового прекурсора, что упрощает процедуру и соответствует принципам «зеленой химии».

Полимеры серии Д (на основе ДФФ) образуют растворимые линейные структуры, тогда как серия О (на основе ОБМФ) склонна к неконтролируемому гелеобразованию из-за «угловой» конфигурации мономера, способствующей внутримолекулярной циклизации и сшивке. Материалы демонстрируют высокую термостабильность: лучшие образцы (О-10) имеют Td_5 = 460 °C и Td_{10} = 490 °C по данным ТГА, при этом все полимеры стабильны до 200 °C. ИК-спектроскопия подтверждает наличие фурановых колец, триазольных линкеров и иминовых групп в структуре полимеров. СЭМ-анализ выявил различия в морфологии: полимеры серии Д имеют более рыхлую структуру по сравнению с серией О. Метод BET показал, что материал обладает квазимонодисперсной мезопористой структурой с модальным диаметром пор ~10 нм и удельным объемом пор 0,28 $см^3$/г, что оптимально для каталитических применений.

Полимерные подложки серии Д (особенно D-4) использованы для нанесения наночастиц никеля (загрузка ~19%). Катализатор Ni@D-4 проявил наивысшую активность в реакции восстановления нитробензола до анилина: TON = 5,00, TOF = 2,50 $ч^{-1}$ при 50 °C и 7 экв. $NaBH_4$ с выходом 100% и селективностью 100%. ГХ-МС анализ подтвердил реализацию гибридного механизма восстановления: параллельно протекают прямой путь (через нитрозобензол и фенилгидроксиламин) и конденсационный путь (через азокси-, азо- и гидразобензол). Оба маршрута приводят к анилину со 100% селективностью, причем прямой путь доминирует на поверхности наночастиц Ni, а конденсационный путь реализуется с образованием микроколичеств промежуточных азо-соединений, которые быстро восстанавливаются в условиях избытка $NaBH_4$.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант №25-13-20010) и поддержана правительсвом Тульской области.

МОДИФИКАЦИЯ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ МИКРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА) КАТЕХОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ МЕТОДОМ КАРБОДИИМИДНОЙ РЕАКЦИИ

Киселева А.А.[1,2], Есаев М.А.[1,3], Шиман Д.И.[1,3], Костюк С.В.[4]

[1]Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, ул. Ленинградская, 14, 220006, Минск, Беларусь; [2]Белорусский государственный университет, ул. Ленинградская, 14, 220006, Минск, Беларусь e-mail: che.kiselevaAA3@bsu.by;

[3]Институт регенеративной медицины, Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова (Сеченовский университет), Москва, 119991, Россия; [4]Sorbonne Universite, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moleculaire, Equipe Chimie des Polymeres, 4 place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

Микрогели на основе поли(N-изопропилакриламида) и наночастиц Fe_3O_4 являются перспективными материалами для создания магнитоуправляемых систем адресной доставки лекарственных веществ. Одной из основных проблем таких гелей остается отсутствие эффективного взаимодействия между поверхностью наночастиц оксида железа и полимерной матрицей. Для решения этой задачи в качестве линкеров широко используют катехолсодержащие молекулы, способные прочно координироваться с поверхностью Fe_3O_4. Введение катехольных групп в структуру полимеров может осуществляться различными способами, включая сополимеризацию с функциональными мономерами, использование RAFT-агентов с катехольным фрагментом или постмодификацию готовых полимеров. В настоящей работе введение катехольного фрагмента проводилось путем карбодиимидной реакции с использованием 1-этил-3-(3-диметиламинопропил)карбодиимида (EDC) и N-гидроксисукцинимида (NHS). В качестве полимерной матрицы использовали микрогели поли(N-изопропилакриламида-со-акриловой кислоты), содержащие 10 мол.% акриловой кислоты. Затем модифицированный микрогель использовался в качетсве лиганда для наночастиц магнетита, успещность связывания подтверждалась методом ик спектроскопии. Связывание полимерного микрогеля с поверхностью наночастиц было подтверждено методам инфракрасной спектроскопии. Исследование методом динамического светорассеяния показало, что выделенная магнитная фракция сохраняет термочувствительное поведение. В результате были получены магнитные и термочувствительные микрогели поли(N-изопропилакриламида).

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проект № Х26МП-051, № гос. регистрации 20261611.

СИНТЕЗ И ПОСТПОЛИМЕРИЗАЦИОННАЯ МОДИФИКАЦИЯ ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ СОПОЛИМЕРОВ D,L-ЛАКТИДА

Матвиенко В.Д., Никифоров А.А., Коржикова-Влах Е.Г.

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург, e-mail: vdmatvienko@gmail.com

Полилактид (ПЛА) — биосовместимый и биодеградируемый алифатический сложный полиэфир, находящий широкое применение в различных биомедицинских изделиях. В частности, перспективны композиты ПЛА с кальций-фосфатными наполнителями. Внесение таких наполнителей стимулирует формирование костной ткани и улучшает отдельные свойства ПЛА, но одновременно повышает жесткость и хрупкость материала. Кроме того, частицы склонны к агломерации, а слабая межфазная адгезия к полимерной матрице вызывает отслаивание и снижение общей прочности композита. Перспективным решением является химическая модификация цепи ПЛА: например, фосфорсодержащие фрагменты, которые могут придать материалу остеокондуктивность, важную для регенерации. Однако прямая модификация полимера затруднена из-за отсутствия реакционноспособных групп и низкой химической стойкости сложноэфирных связей.

Указанные ограничения преодолеваются введением функциональных групп на стадии синтеза мономера. Применение стандартных заместителей (гидроксильных, карбоксильных, аминогрупп) требует использования защитных групп, в условиях удаления которых возможно протекание деструкции основной цепи макромолекулы. В связи с этим галогенсодержащие заместители представляют собой более предпочтительную альтернативу: они не мешают полимеризации с раскрытием цикла и легко конвертируются в широкий спектр функциональных групп через реакции нуклеофильного замещения. В настоящей работе синтезирован циклический мономер 3,6-бис(хлорметил)-1,4-диоксан-2,5-дион (Cl_2LA). Методом полимеризации с раскрытием цикла были получены сополимеры D,L-лактида с Cl_2LA (Cl-ПЛА) с содержанием галогенсодержащих звеньев 2.5, 5 и 10 мол%. Введение фосфонатных групп осуществлялось по реакции Михаэлиса-Арбузова с трибензилфосфитом. Для улучшения протекания фосфонилирования, по реакции Финкельштейна из Cl-ПЛА были получены соответствующие йодсодержащие сополимеры (I-ПЛА). По данным ^{1}H, ^{31}P ЯМР-спектроскопии и эксклюзионной жидкостной хроматографии в условиях реакции не происходила деструкция полимерной цепи, а степень замещения галогенсодержащих звеньев составила 50 %, что, может объясняться стерическими факторами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00196).

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОДЕСТРУКЦИИ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И НАТУРАЛЬНОГО КАУЧУКА

***Смыковская Р.С.*[1], Юрков В. Г.[2], Кузнецова О.П.[1], Роговина С.З.[1]**

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, Москва, regina.smykovskaya@chph.ras.ru

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

В отличие от синтетических полимеров, получаемых из нефтяного сырья и не подверженных разложению в природных условиях, биоразлагаемые полимеры, синтезируемые из возобновляемых природных источников, не накапливаются в природе, а разлагаются под действием микроорганизмов и представляют собой экологически чистые материалы, которые могут перерабатываться на традиционном для полимеров оборудовании. В этой связи разработка композитов на основе алифатического полиэфира полилактида (ПЛА), синтезируемого из продуктов брожения сельскохозяйственных отходов, и натурального каучука (НК) представляет собой перспективное направление для производства медицинских изделий различного назначения, биоразлагаемой упаковки и т.д.

Смеси ПЛА–НК были получены в смесителе — Brabender (Германия) при температуре 170°С и скорости вращения шнеков 100 об/мин. Содержание НК варьировалось от 10 до 60 мас.%. При изучении процессов старения композиций была рассчитана скорость деструкции, определенная по потере массы образцов после их экспонирования в почве. Установлено, что для композиций ПЛА–НК, содержащих 10 и 20 мас.% НК, не происходит значительной потери массы после 4 месяцев нахождения в почве. Однако при увеличении содержания НК до 30 мас.% наблюдалось существенное снижение массы образцов, а также частичное изменение окраски и структуры материала. В то же время в композициях, содержащих 40 и 50 мас.% НК, похожие изменения отмечались уже после первого месяца экспонирования в почве. Грибостойкость материалов оценивали по интенсивности развития тест — культур грибов по 6-и балльной шкале ГОСТ 9.048-89 как визуально, так и с помощью бинокулярного микроскопа Leica M80 с фотонасадкой Leica IC 80 HD (увеличение — более 50х). Установлено, что при содержании НК до 30 мас.% на поверхности образцов наблюдается незначительное развитие грибов, в то время как увеличение содержания НК до 60 мас.% способствует более интенсивному росту плесневых грибов. Необходимо отметить, что наиболее активно происходит рост грибов вида *Aspergillus niger*, *Chaetomium globosum,* и рода *Penicillium.* Таким образом, на основе проведенных исследований можно сделать вывод, что как скорость биодеструкции композиций ПЛА–НК в почве, так и механизм развития плесневых грибов на поверхности материалов зависят от содержания НК.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25–23–01175).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТЕПЕНИ РАЗВЕТВЛЕНИЯ ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА, ПОЛУЧЕННОГО АНИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ

Ершов А.А., Тарасов А.Е., Грищук А.А., Подвальная Ю.В., Вечкутова А.В., Бадамшина Э.Р.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, г. Черноголовка, ershov.aa@icp.ac.ru

Полиакрилонитрил (ПАН) представляет собой один из наиболее ценных полимеров в современной индустрии, поскольку он выступает основным прекурсором для производства углеродного волокна. Одним из способов синтеза столь важного полимера является метод анионной полимеризации акрилонитрила (АН). При этом, важным параметром, который необходимо контролировать на этапе синтеза полимера, является степень разветвления полимерной цепи, поскольку от этого зависит способность ПАН к волокнообразованию. Применительно для ПАН, полученного радикальной полимеризацией, описан метод определения степени разветвления по ^{1}H ЯМР-спектроскопии. В основе метода лежит интегрирование пика при 3,26-3,02 м.д., характерного для α-протона в CH_2-CH-CN группе линейного звена, относительно сигнала 2,77-2,62 м.д., принятого за 2, соответствующего концевой группе CH_2-CH_2-CN образующейся при передаче цепи на полимер. В результате, параметр DB (degree of branching), характеризующий степень разветвления, рассчитывается по формуле: $DB = 2 / (2 + S_{CH})$, где S_{CH} — площадь пика протона CH_2-CH-CN группы. Однако, в случае анионной полимеризации АН, в реакционной системе могут протекать побочные процессы, в результате которых изменяется структура получаемого полимера, но не происходит образование узла разветвления. В связи с этим, в настоящей работе была исследована применимость известного метода для определения степени разветвления ПАН, полученного методом анионной полимеризации.

При помощи анализа ^{13}C-ig ЯМР-спектров образцов ПАН, полученных под действием различных безметальных инициаторов анионной полимеризации АН (1,4-диаза-бицикло[2.2.2]октан (ДАБКО), диазабицикло[5.4.0]ундец-7-ен (ДБУ), системы ДАБКО/окись этилена (ОЭ), гидроксид тетраэтиламмония (ТЭАГ)), было установлено, что применение вышеописанного метода является некорректным. Это связано с образованием концевых CH_2-CH_2-CN-групп в результате побочных реакций, не ведущих к образованию узла разветвления, что будет существенно искажать значение параметра DB, расчитанного по приведенному методу. Вместе с тем остается возможность качественной оценки наличия разветвлений в ПАН, полученном методом анионной полимеризации, с помощью ЯМР-спектра ^{13}C-ig.

Работа выполнена при поддержке госзадания № 124013000722-8 (тема FFSG-2024-0007).

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИ (N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА) И ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Лунева О.В. [1], ***Сивцов Е.В.*** [2], ***Ибрагимова В.О.*** [1], ***Багрий И.В.*** [1], ***Нащекина Ю.А.*** [3], ***Осетров К.О.*** [4] , ***Коржикова-Влах Е.Г.*** [1]

[1]*Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследо-вательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург*
olya.lun.1995@gmail.com
[2]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург*
[3]*Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург*
[4]*ЗАО «НП ЦМИД», Санкт-Петербург*

Инъекционные гидрогели являются перспективными системами для доставки лекарственных препаратов благодаря возможности малоинвазивного введения и равномерного заполнения полостей сложной геометрии. Особый интерес представляют термочувствительные системы с обратимым золь-гель переходом. В качестве ключевого компонента в таких системах используют поли(*N*-изопропилакриламид) (PNIPAm). В данной работе получены термочувствительные гидрогели, в которых PNIPAm привит к ядру на основе сорбитола, модифицированного звеньями акриловой кислоты. Синтез PNIPAm проводили методом фотополимеризации в водной среде с использованием фотоинициатора. В ряд образцов вводили гиалуроновую кислоту в концентрациях 8, 15 и 20 % от массы мономеров, чтобы оценить влияние ее содержания на свойства материала. В ходе синтеза варьировали соотношение компонентов и продолжительность УФ-облучения. Полученные гидрогели были охарактеризованы методом ИК-спектроскопии. Реологические свойства гидрогелей были изучены в диапазоне 20–40 °C, чтобы оценить поведение материала ниже и выше точки фазового перехода PNIPAm. Экспериментально подтвержден термочувствительный отклик полученных гидрогелей. По данным ДСК рассчитано процентное содержание связанной воды. Данный параметр определяет кинетику сорбции, а также высвобождения лекарственного препарата. В результате изучения сорбционных свойств были определены равновесные степень сорбции и параметры полимерной сетки (размер ячеек, плотность сшивки, молекулярная масса между узлами). Профиль высвобождения лекарственного препарата (моксифлоксацин) исследовали в модельных физиологических условиях (pH, температура) с помощью диализной системы и периодического отбора проб. Полученные данные о скорости высвобождения выбранного антибиотика позволили проследить влияние концентрации гиалуроновой кислоты в гидрогеле на скорость и полноту высвобождения. Предварительные тесты на биосовместимость показали отсутствие выраженной цитотоксичности в широком диапазоне концентраций, что подтверждает биосовместимость полученных систем и их потенциал для локальной и пролонгированной доставки лекарств.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 25-73-00379).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВУЛКАНИЗАЦИИ ЭЛАСТОМЕРНОЙ ФАЗЫ НА МОРФОЛОГИЮ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИЛАКТИДА С НАТУРАЛЬНЫМ КАУЧУКОМ

***Гасымов М.М.*, Ерина Н.А., Роговина С.З., Кузнецова О.П.**

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва, mrzlomiraga@mail.ru

Алифатический биоразлагаемый полиэфир полилактид (ПЛА), получаемый из сельскохозяйственных отходов, широко используется в различных отраслях, однако низкая ударопрочность и хрупкость ограничивают области его применения. Преодоление этих недостатков может быть достигнуто, в частности, смешением ПЛА и натурального каучука (НК) с получением термопластичных эластомеров (ТПЭ). В то же время вулканизация НК серосодержащей ускорительной системой, с образованием термопластичных вулканизатов (ТПВ) приводит к возрастанию стабильности, а также изменению морфологии и свойств разрабатываемых материалов. Композиции ТПЭ и ТПВ получали в смесителе Brabender смешением реагентов при 170 °С в течение 10 мин и скорости вращения ротора 100 об/мин. Содержание не вулканизованного и вулканизованного НК варьировалось от 40 до 70 мас.%. Методами атомно-силовой (АСМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), а также рентгеновской компьютерной томографии было изучено влияние вулканизации НК на структуру получаемых композиций. Методом АСМ было установлено, что исходный ПЛА обладает частично-кристаллической структурой со звездообразными ламелями, тогда как в НК присутствуют аморфные мелкозернистые частицы. Анализ СЭМ-изображений ТПЭ показал, что в композициях при содержании НК до 50 мас. % ПЛА является матрицей, в которой распределены каверны неправильной формы, оставшиеся после отмывки несшитого НК, размеры которых увеличиваются от 10–50 мкм в композициях с соотношением ПЛА-НК равном 60:40 мас.% до 50–120 мкм в композициях с соотношением компонентов 50:50 мас.%. Установлено, что морфология композиций, содержащих 70 мас.% НК, представляет собой взаимопроникающие сетки обеих фаз. В то же время методом рентгеновской компьютерной томографии показано, что по сравнению с композициями ТПЭ домены вулканизованного НК в композициях ТПВ являются значительно более мелкими (5–20 мкм). Таким образом, наблюдаемое различие исследуемых композиций обусловлено тем, что в ТПЭ после прессования происходит агломерация каучуковых частиц с образованием более крупных доменов, свидетельствующих о нестабильности его структуры. В то же время наличие трехмерного каркаса сшитого каучука в ТПВ способствует увеличению стабильности структуры за счет возрастания его вязкости и упругости.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-23-01175).

ПОЛУЧЕНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ И СШИТЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСИЭТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Паршина А.Э., Коржикова-Влах Е.Г.

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург

Фосфорилированные полисахариды обладают большим потенциалом практического использования в качестве компонента остеоиндуктивных материалов для регенеративной медицины благодаря их эффективному удерживанию ионов кальция — ключевого строительного блока костной ткани. Целлюлоза является широко распространенным природным биосовместимым, нетоксичным полимером, часто используемым в биомедицине. Среди большого разнообразия форм, растворимая гидроксиэтилцеллюлоза (ГЭЦ) остается одним из наименее изученных и практически используемых производных. В настоящее время в литературе практически отсутствуют результаты по получению ее фосфорсодержащих эфиров и их дальнейшего применения для создания остеорегенеративных материалов.

В настоящей работе проведено фосфорилирование водорастворимой гидроксиэтилцеллюлозы гидрофосфатом аммония (ГФА) в присутствии мочевины по технологии «pad-dry-cure». Варьированием соотношения трех компонентов, температуры (130, 150°C) и продолжительности процесса (0.5, 1 и 2 ч) получен ряд образцов с различной структурой. Обработка смеси ГЭЦ:ГФА 1:1 в течение 0.5 ч при 130 °C позволяет получить водорастворимый полимер с содержанием кислотных групп 2.46 ммоль/г и 4.5 масс% фосфора. При соотношении ГЭЦ:ГФА 1:2 и при длительности процесса ≥1 ч наблюдается образование нерастворимого образца с содержанием фосфора в диапазоне 7.9-8.4 масс%. Путем изменения условий обработки можно получать материалы с различной степенью сшивки, характеризующиеся показателем моментального влагоудерживания от 525 до 1659%, что составляет 88-96% равновесного влагоудерживания образца, оцениваемого через 24 ч, что говорит о быстрой кинетике набухания полученных материалов и их высокой гидрофильности. Таким образом, ГЭЦ обеспечивает возможность создания как водорастворимых фосфорилированных производных, которые могут вводиться в композиции для улучшения их эластичности и прочности; а также сшитых матриц, самостоятельно формирующих гидрогели с потенциальным остеоиндуктивным действием.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 26-13-00196).

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ НА ИОННУЮ ПРОВОДИМОСТЬ СШИТЫХ ТВЕРДЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИУРЕТАНОВОЙ СИСТЕМЫ

***Горина У.И.*[1], Захарова Д.В.[1], Морозова С.М.[1]**

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Ulgori@yandex.ru*

Сшитые полиуретановые твердые полимерные электролиты (ТПЭ) обладают регулируемой структурой и механической стабильностью, однако их применение ограничено невысокой (10^{-8}-10^{-3} См/см) ионной проводимостью (ζ) при 25°C, введение ионной жидкости (ИЖ) в полимерную структуру способствует ее повышению [1]. Целью работы является установить влияние концентрации 1-этил-3-метилимидазолий бис(трифторметансульфонил)имида (EMIMTFSI) на ионную проводимость сшитых полиуретановых ТПЭ.

Впервые синтезирован ионный тетраол (1) и получены сшитые полиуретановые мембраны на его основе с использованием гексаметилендиизоцианата (2), полиэтиленгликоля (3) и LiTFSI (4) (см. рисунок 1а, б). Наибольшая ζ была достигнута при соотношении мономер:ПЭГ 1:4, а именно: 2.48×10^{-6} См/см при 50 мол.% LiTFSI и 1.09×10^{-6} См/см при 70 мол.% LiTFSI. Данные составы были выбраны для изучения влиянии концентрации EMIMTFSI (5) в количестве от 0-50 мол.% на ионную проводимость сшитых полиуретановых систем. Установлено, что влияние концентрации ИЖ от 5 до 50 мол.% имеет немонотонный характер: при 5 мол. % EMIMTFSI и 70 мол. % LiTFSI достигается максимальное значение ζ (4.99×10^{-6} См/см) (см. рисунок 1в).

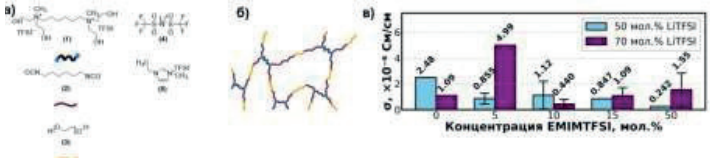


Рисунок 1. Исходные компоненты (а), схема сшитой полиуретановой сетки (б) и зависимость ионной проводимости от концентрации EMIMTFSI (в).

Таким образом, увеличение концентрации ИЖ от 0 до 5 мол. % для серии мембран с 70 мол.% LiTFSI приводит к повышению ζ с 1.09×10^{-6} до 4.99×10^{-6} См/см.

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ (госзадание), проект № FSMG- 2025-0068.

Список используемой литературы

1. Liu X., et al. A Novel Polymer Electrolyte Matrix Incorporating Ionic Liquid into Waterborne Polyurethane for Lithium-Ion Battery // Polymers, 2020, V. 12, № 7, P. 1513.

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА СУШКИ НА МОРФОЛОГИЮ И СВОЙСТВА ГЕЛЕЙ ИЗ АЛЬГИНАТА

Иванов П.Л. [1,2]***, Попырина Т.Н.*** [1,3]***, Демина Т.С.*** [1,3]

[1]Московский авиационный институт (научный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия. ivanovpl@inbox.ru
[2]ООО «МедикалСайнс» Варшавское шоссе, д.46, стр.6, п.2, Москва,115230, Россия
[3]Институт фотонных технологий ККК и Ф НИЦ «Курчатовский институт», Ленинский проспект, д. 59, Москва, 119333, Россия

Создание биодеградируемых лекарственных форм с контролируемым высвобождением — ключевая задача фармацевтической промышленности: это уменьшает кратность приема и поддерживает концентрацию лекарственного вещества в терапевтическом окне. Гели на основе полисахаридов, обеспечивающие диффузионный контроль и биорезорбцию, имеют высокую перспективу применения в отрасли, но для гидрогелей свойственно ускоренное начальное высвобождение низкомолекулярных соединений. Гели из солей альгиновой кислоты (альгинатов) являются одними из наиболее удобных и распространенных видов гелей на основе природных полисахаридов.

Цель работы — исследовать влияние метода сушки гидрогелей из альгината на морфологию и свойства гелей, в том числе на скорость высвобождения красителя кармина. Сферические гидрогели получали капельным добавлением 1% водного раствора альгината натрия в 2 мас.% раствор хлорида кальция. Затем гели промывали и сушили получая из них: ксерогели (сушка в комнатных условиях) и криоструктурированные гели (лиофильная сушка после заморозки в различных условиях). Наибольшая усадка характерна для ксерогелей, а лиофильная сушка после заморозки в жидком азоте лучше сохраняет исходный размер гидрогелей, чем после заморозки при -5°С. Оптическая и электронная микроскопия также показали, что заморозка в жидком азоте позволяет сохранить сферическую форму гелей. Для таких типов криоструктуированных гелей характерна наибольшая пористость, что также обеспечивает наибольшее влагопроглощение и набухание. Фотометрически установлено пролонгированное высвобождение красителя из всех высушенных образцов по сравнению с исходными гидрогелями. Скорость высвобождения красителя уменьшается в ряду: гидрогель>криоструктурированные гели после заморозки в жидком азоте>ксерогели>криоструктурированные образцы после заморозки при -5°С.

СИНТЕЗ АМФИФИЛЬНОГО БЛОК-СОПОЛИМЕРА P(IB-B-NIPAM) МЕТОДОМ RAFT-ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

***Юдина Л.Д.*[1], Богдан Н.С. [1], Бабанова Т.А.[1]**

[1] Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет), Москва, lida.judina0345@gmail.com

Сополимеры на основе полиизобутилена (PIB) перспективны в качестве материала для изготовления медицинских изделий широкого спектра: от медицинских трубок до систем таргетной доставки лекарств [1]. Это обусловлено низкой газопроницаемостью, термической и химической стабильностью PIB. Другим широко применяемым в медицине полимером является термочувствительный поли(N-изопропилакриламид) (PNIPAM) [2]. Сочетание свойств гидрофильного PNIPAM и гидрофобного PIB позволяет получить амфифильный блок-сополимер, чувствительный к изменениям температуры окружающей среды [3]. Самоорганизация P(IB-b-NIPAM) в мицеллы в водном растворе, где высоко гидрофобный PIB образует стабильное ядро, а PNIPAM гидрофильную корону, делает данный сополимер перспективным материалом для формирования систем таргетной доставки гидрофобных лекарственных средств, в частности, противоопухолевых.

В данной работе методом RAFT-полимеризации в присутствии макро RAFT агента на основе PIB, позволяющего провести сополимеризацию за одну стадию, была синтезирована серия сополимеров P(IB-b-NIPAM) с M_n в диапазоне 7000-19000 г/моль и Đ<1.6. Мицеллярные структуры были получены методом пленочной гидратации. Методом динамического рассеяния света было установлено, что средний гидродинамический диаметр образующихся мицелл находится в диапазоне 90–110 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках гранта соглашение № 075-15-2025-015 (Сеченовский университет).

Список используемой литературы

1. Puskas J.E., Chen Y., Dahman Y., Padavan D. Polyisobutylene-based biomaterials // J. Polym. Sci. A Polym. Chem. 2004. Vol. 42. P. 3091–3109. DOI: 10.1002/pola.20114.
2. Talelli M., Hennink W.E. Thermosensitive polymeric micelles for targeted drug delivery // Nanomedicine. 2011. Vol. 6, No. 7. P. 1245–1255. DOI: 10.2217/nnm.11.91.
3. Wei H., Cheng S.X., Zhang X.Z., Zhuo R.X. Thermo-sensitive polymeric micelles based on poly(N-isopropylacrylamide) as drug carriers // Progress in Polymer Science. 2009. Vol. 34, No. 9. P. 893–910. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2009.05.002.

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОЛОГИИ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ПРОТОНИРОВАННЫХ ДИАЛЛИЛАММОНИЕВЫХ МОНОМЕРОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ С НЕБОЛЬШОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССОЙ

Тышкевич А.А.*, *Чернышева Ю.А.*, *Тимофеева Л.М.

Институт нефтехимического синтеза имени А.В.Топчиева Российской академии наук, г. Москва, tyshkevich@ips.ac.ru.

Протонированные вторичные/третичные диаллиламмониевые полимеры (ПДАА) на основе протонированных солей — трифторацетатов диаллиламмония (ДААТФА), проявляют высокую неспецифическую антимикробную активность по отношению ко многим больничным патогенам, включая редкую активность относительно *M. Tuberculosis* [1]. Для расширения ряда полимеров и получения полимеров ПДАА с небольшой степенью полимеризации и различными концевыми группами была оптимизирована методика классической полимеризации в избытке инициатора с учетом влияния на ММ не только инициатора, но и температуры, определяющей вероятность передачи цепи на мономер, характеризующей полимеризацию ДААТФА [2]. Был предложен подход и разработана методика получения полимеров с низкой молекулярной массой и различными концевыми группами в рамках радикальной полимеризации [3]. Радикальная полимеризация ДААТФА проведена в избытке инициаторов ПСА и АЦПК при T (40 и 50°C). Путем варьирования концентрации инициатора и температуры получена серия образцов полимера ПДААТФА в диапазоне ММ $(18–43)\times10^3$ г·моль$^{-1}$. Результаты свидетельствуют о существенном влиянии роста температуры на увеличение вероятности передачи цепи на мономер. Согласно данным ЯМР и ИК исследований с увеличением концентрации инициатора, но при относительно небольших T (40°C), относительное количество характерных концевых винильных групп уменьшается, а преобладающими становятся концевые группы, образующиеся при взаимодействии макрорадикалов с первичными радикалами инициатора [3]. Разработанный подход использован для варьирования свойств антимикробной активности и токсичности полимеров ПДАА [1].

Список используемой литературы

1. Simonova Y.A., Eremenko I.V., Topchiy M.A., Kozobkova N.V., Shleeva M.O., Eropkin M.Y., Timofeeva L.M., // Mendeleev Commun. — 2025. — V. 35. — N. — 4. — P. 450-453.
2. Y.A. Simonova, M.P. Filatova, L.M. Timofeeva, *Polym. Sci., Ser. B.*, 2018, 60, 445-454.
3. Eremenko I.V., Simonova Y.A., Filatova M.P., Yevlampieva N.P., Bondarenko G.N., Kleshcheva N.A., Timofeeva L.M., // Russ. J. Appl. Chem. — 2024. — V. 97. — N. 6. — P. 550–560.

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕЗИРОВАННОЙ СОЛИ NATOP ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

***Огай В.А.*[1], *Репина А.А.*[1,2], *Сиротин М.А.*[2,3] *Иноземцева А.И.*[1,2]**

[1] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, ogai.va@phystech.edu*

[2] *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва*

[3] *Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва*

Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) — ресурсно более доступная альтернатива литий-ионным системам. Это обусловлено значительно большей распространенностью натрия в земной коре, а также возможностью использовать алюминий, как материал токосъемника и для катода, и для анода[1,2]. Их циклический ресурс и формирование твердоэлектролитной интерфазы (SEI) во многом определяются химией электролита[3]. Исследуемая в этой работе соль — трисоксалатофосфат натрия (NaTOP, $Na[P(C_2O_4)_3]$) — содержит три оксалатных лиганда, которые способствуют образованию SEI. Помимо этого размер аниона и делокализация заряда позволяют ожидать высокой растворимости, однако данные о свойствах этой соли[4], в отличие от литиевого аналога, отсуствуют. Их изучению и посвящена эта работа.

По данным ДСК установлена термическая стабильность соли до 236°C, зарегестрированы два пика при 236 и 342°C, отвечающие ступенчатому разложению аниона. В КР-спектре порошка присутствуют полосы C=O, C-O и октаэдрического каркаса PO_6.

Ионная проводимость 0.5 M NaTOP в 1G (10.43 мСм/см), 2G (4.66 мСм/см), 4G (1.66 мСм/см), измеренная кондуктометром, максимальна в моноглиме и превышает проводимость аналогичного электролита с 0.5 M $NaPF_6$ более чем в полтора раза (6.50 мСм/см для $NaPF_6$), в диглиме и тетраглиме значения проводимости близки (4.21 и 1.67 мСм/см соответственно). Окно электрохимической стабильности (ЦВА, 5 мВ/с) — 1.5-4.5 В. КР-спектры электролитов указывают на большую ассоциацию Na^+ и $[P(C_2O_4)_3]^-$ в моноглиме, чем в диглиме.

Полуячейки Na/NVP с 0.5M NaTOP в 2G циклируются обратимо с высокой кулоновской эффективностью 98% и удельной емкостью порядка 92 мАч/г.

Список используемой литературы

1. Hwang J.Y. et al. // Chem. Soc. Rev. 2017. V. 46 P. 3529. DOI: 10.1039/C6CS00776G
2. Vaalma C. et al. // Nat Rev Mater 3, 18013. 2018. DOI: 10.1038/natrevmats.2018.13
3. Eshetu G.G. et al. // Nano energy. 2019. V. 55 P. 327. DOI: 10.1016/j.nanoen.2018.10.040
4. Wietelmann U. et al. // ChemEurJ. V. 10 P. 2451. DOI: 10.1002/chem.200305208

ФОРМИРОВАНИЕ, МОРФОЛОГИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР CUO, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИОННОГО НАСЛАИВАНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ НИКЕЛЕВОЙ ПЕНЫ

***Лобинский А.А.*[1], Кодинцев И.А.[1], Канева М.В.[1], Левшакова А.С.[1], Хайруллина Е.М.[2]**

[1] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, lobinski.a@mail.ru*

[2] *Институт автоматики и процессов управления (ИАПУ) ДВО РАН, Владивосток*

Наноструктурированные электроды на основе CuO были получены непосредственно на подложках никелевой пены методом ионного наслаивания (ИН). Процесс синтеза включал адсорбцию катионов меди на поверхности подложки из водных растворов ацетатно-аммиачных комплексов меди (II) и последующий контролируемый гидролиз в водном растворе с заданной последовательностью обработки. Многократное повторение циклов «адсорбция — гидролиз» приводило к образованию равномерной пористой структуры оксида меди, которая была окончательно сформирована путем термической обработки при температуре 180 °C в течение 30 минут.

На основании данных СЭМ установлено, что морфология синтезированных покрытий является наноструктурированной и представляет собой сетку взаимосвязанных одномерных наностержней (Рис. 1). Методом РФА было подтверждено образование моноклинной фазы тенорита.

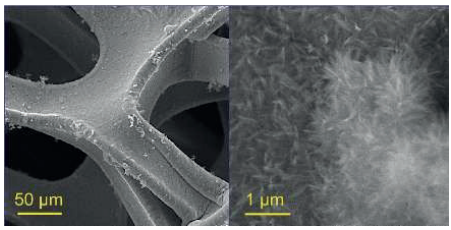


Рисунок 1. СЭМ изображение наноструктур CuO, синтезированых методом ионного наслаивания на поверхности никелевой пены.

Электрохимическое тестирование выявило выраженное псевдоемкостное поведение электродов в щелочных водных электролитах, обусловленное протеканием обратимых фарадеевских окислительно-восстановительных реакций. Исследование влияния числа циклов ИН (в диапазоне от 15 до 90) показало зависимость удельной емкости от толщины сформированного слоя. Максимальное значение удельной емкости, составившее 1089 Ф $г^{-1}$ (при плотности тока 1 А $г^{-1}$), зафиксировано для образца, полученного в ходе 30 циклов ИН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-19-20060)

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОМАТЕРИАЛАМИ

***Шиянова К.А.,* Торкунов М.К., Рывкина Н.Г., Гулин А.А., Мельников В.П.**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва, shiyanovakseniya@mail.ru

Электропроводящие полимерные композиты (ЭПК) с углеродными наноматериалами сочетают уникальные свойства полимеров (гибкость, малый вес) с высокой электропроводностью. Благодаря этому они перспективны для создания селективных мембран, нагревательных элементов, гибкой электроники и СВЧ-экранов. Указанные характеристики делают ЭПК востребованными в электротехнике, сенсорике и устройствах генерации энергии.

В работе получены ЭПК с сегрегированной структурой двумя методами: нанесением из раствора и полимеризацией в присутствии наполнителя. Композиты охарактеризованы методами оптической и сканирующей электронной микроскопии, диэлектрической спектроскопии и гель-проникающей хроматографии. Для ряда образцов изучено экранирование электромагнитного излучения в СВЧ-диапазоне.

На фторопласт методом нанесения из раствора осажден 1 мас.% аминированного графена (АмГ), что обеспечило электропроводность ~1.3–1.4×10^{-4} См/см при 1000 Гц. Радикальной полимеризацией in situ синтезированы композиты полибутилметакрилат (ПБМА)/АмГ. Показано, что эмульсионная полимеризация Пикеринга позволяет достигать высоких молекулярных масс и управляемой электропроводности при низком содержании наполнителя (1 мас.%).

Изучен синергетический эффект совместного введения восстановленного оксида графена (ВОГ) и одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) в ПБМА. Выявлена зависимость структуры и электропроводности от соотношения наполнителей; максимальная проводимость (1.4×10^{-3} См/см) достигнута для композита с ОУНТ. Полученные материалы переработаны в филамент для 3D-печати — электропроводность сохраняется после печати и горячего прессования, что подтверждает их пригодность для аддитивных технологий.

Работа выполнена за счет субсидии Министерства науки и высшего образования России, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания № 125012200595-8 и 125012200641-2.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО НАПЛАВЛЕНИЯ

Назарова А.А., Моногаров К.А., Пивкина А.Н.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва,
nazarovaamina03@gmail.com

Одним из перспективных направлений в области формования энергоемких материалов являются аддитивные технологии (АТ) [1]. В отличие от традиционных методов, применение АТ позволяет упростить процесс формования геометрически сложных изделий из энергетических композитов (ЭК) с развитой поверхностью горения.

В работе предложен процесс 3D-печати составов на основе термопластичной полимерной матрицы (полилилактида) и энергетического наполнителя — окислителя (перхлората аммония).

Проведена оценка и оптимизация реологических свойств полученного композита до приемлемых для 3D-печати значений. Для оптимизированного состава и его компонентов проведен синхронный термический анализ (ДСК/ТГ). При нагревании до 220°С в аргоне не обнаружено термического разложения отдельных компонентов и ЭК в целом. Следовательно, композит стабилен при кратковременном нагреве до 220°С и подходит для печати методом послойного наплавления.

Для определения зависимости нормальной скорости горения ЭК от давления изготовлены две группы образцов — методом 3D-печати и методом горячего глухого прессования, причем скорости горения образцов обеих групп совпали. Кроме того, метод печати позволяет изготовить образцы с заранее заданной пористостью, что дает возможность повысить скорость горения одного и того же композита в 3–4 раза. Замена ПХА средней фракции на мелкую приводит к увеличению скорости горения в два раза в диапазоне давлений 5-10 МПа.

Таким образом, предложен способ печати методом послойного наплавления сложнопрофильных сгораемых элементов из энергетических композитов на основе полилактида и перхлората аммония, а также проведена оценка их баллистических характеристик.

Список используемой литературы

1. Muravyev N.V., Monogarov K.A., Schaller U., Fomenkov I.V., Pivkina A.N., 2019, Explos., Pyrotech. 44. 941–969.

СИНТЕЗ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКОГО ИЗОПРОПОКСИДА ТИТАНА-НЕОДИМА

***Лясников К.О.*[1] , Чернышова О.В.[1]**

[1] *ФБГОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, lists77746@gmail.com*

Материалы со струкутрой пирохлора $A_2B_2O_7$ находят широкое применение в различных областях электронной техники благодаря своим уникальным свойствам. Примром служит титанат неодима $Nd_2Ti_2O_7$, который проявляет сегнетоэлектрическое ($T_{Кюри}$=1773 К). Это делает титанат неодима интересным для высокотемпературной электроники и функциональных диэлектриков. Твердофазный синтез его требует высоких температур (~1400-1500°С) и термообработки >10 ч, что актуализирует работу над более энергоэффективными подходами к синтезу титаната неодима. [1]

Однин из таких подходов к синтезу функциональных оксидных материалов — золь-гель синтез, обеспечивающий работу при температурах более низких. Важным является вопрос синтеза предшественников золь-гель синтеза, в качестве которых используют алкоксиды металлов, в том числе гетерометаллические.[2]

Работа посвящена синтезу гетерометаллических алкоксидов титана-неодима в качестве предшественников золь-гель синтеза $Nd_2Ti_2O_7$. Синтез проводили последовательным анодным растворением титана и неодима в электролите на основе абсолютизированного изопроаилового спирта, качестве токопроводящей добавки использовали тетраэтиламмонийбромид, растворение проводили в гольваностатическом режиме (i=0,02 А/см^2).

Полученный гетерометаллический алкокосид выделяли отгонкой растворителя, охарактеризовали методами ИК спектроскопии (400-4000 см$^{-1}$), электронной спектроскопии, совокупностью методов химического анализа.

Гетерометаллический алкооксид титанат-неодим подвергали гидролизу на воздухе. Полученнный гель сушили при 70°С и давлении 0,10133 кПа до постоянной массы. Высушенный ксерогель термообработке при температуре 900 в течении 2 часов. Охарактеризовали методами РФА, СЭМ, изучили гранулометрический состав порошков.

Список используемой литературы

1. Щербакова Л.Г., Мамсурова Л.Г., Сиханова Г.Е. Титанаты редкоземельных элементов // Успехи химии. 1979 Т. 58 № 3 С. 423-447
2. Лясников К.О., Чернышова О.В., Колобанов А.И., Логинов К.О. Получение сложного оксида NiTa2O6 гидролизом гетерометаллического алкоксопроизводного никеля-тантала. Перспективные материалы, 2026, № 7, с.80 — 88. DOI: 10.30791/1028-978X-2026-7-80-88

СВОБОДНЫЕ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-ХЛОР-ПАРА-КСИЛИЛЕНА КАК ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ СВЧ-ПОЛЕЙ

Глущенков А.В.[1], Киселев А.В.[1], Гусев А.В.[1], Маилян К.А.[1], Косицын С.А.[1], Суров Д.И. [1,2]

[1] Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, gr.mr.71@mail.ru

[2] Национальный исследовательский технологический университет МИСиС, Москва

Традиционный подход к детектированию СВЧ-излучения в свободном пространстве основан на использовании приемных измерительных антенн. Альтернативным физическим принципом может стать прямое калориметрическое детектирование с помощью свободных (вывешенных) ультратонких металлополимерных пленок. Такой детектор позволит преобразовывать часть энергии проходящей волны в тепловой сигнал и будет обладать высокой чувствительностью и быстрым откликом, благодаря низкой теплоемкости и отсутствию паразитного теплоотвода в подложку.

Методом газофазной полимеризации в вакууме (CVD) изготовлены свободные пленки поли-хлор-пара-ксилилена (Parylene C) толщиной 300 нм. Для эффективного поглощения электромагнитных волн на поверхность пленки методом магнетронного распыления (PVD) напылялся чувствительный слой, представляющий собой островковую металлическую пленку с высоким поверхностным сопротивлением. Толщина и сопротивление слоя контролировались таким образом, чтобы обеспечить эффективное поглощение энергии электромагнитной волны.

Проведены исследования электромагнитных характеристик полученного функционального материала в X-диапазоне частот. Установлено, что при воздействии СВЧ-волны частотой 10 ГГц от излучателя мощностью от 10 до 1000 мВт материал частично поглощает энергию излучения, что сопровождается мгновенным локальным нагревом, регистрируемым тепловизором. Такой отклик обусловлен сверхмалой теплоемкостью на единицу площади пленки поли-хлор-пара-ксилилена — около $3{,}87 \cdot 10^{-5}$ Дж/(К·см^2).

Полученные результаты демонстрируют выраженный термический отклик материала на воздействие СВЧ-излучения. Минимальная инерционность материала обеспечивает возможность создания на его основе быстродействующих сенсоров и систем визуализации пространственного распределения электромагнитных полей.

БАЗОВОЕ МАСЛО НА ОСНОВЕ ГИДРИРОВАННЫХ ОЛИГОМЕРОВ 5-*Н*-АЛКИЛ-2-НОРБОРНЕНОВ

Наземутдинова В.Р.[1], Моронцев А.А.[1], Ильин С.О.[1], Ильина С.О. [1], Возняк А.И.[1,2], Бермешев М.В.[1,2]

[1] Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН), Москва, nazemutdinova@ips.ac.ru

[2] Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук (ИСПМ РАН), Москва

Благодаря схожему строению с олигомерами α-олефинов олигомеры *н*-алкилзамещенных норборненов потенциально могут применяться в качестве основы смазочных материалов [1, 2]. В то время как исследования высокомолекулярных производных норборнена широко описаны в литературе, олигомеры данных мономеров остаются малоизученными. Поэтому целью работы является разработка методов получения олигомеров 5-алкил-2-норборненов путем метатезисной полимеризации с раскрытием цикла под действием катализатора Граббса второго поколения и последующего *one-pot* гидрирования.

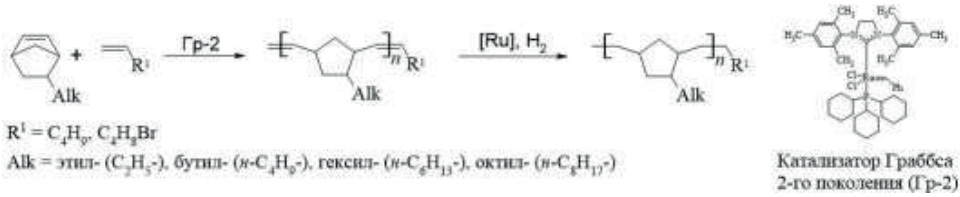


Рисунок 1. One-pot синтез метатезисная полимеризация — гидрирование.

В результате впервые получены олигомеры 5-*н*-алкил-2-норборненов, а также подобраны условия гидрирования двойных связей их основной цепи. Структура всех продуктов подтверждена ^{1}H, ^{13}C, ЯМР спектроскопией. Показано влияние молекулярной массы, природы основной цепи и строения бокового заместителя на термические, реологические и трибологические свойства полученных олигомеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-00126).

Список используемой литературы

1. Nazemutdinova V.R. *et al.* Metathesis of alkylnorbornenes as a new route to synthetic oils: the synthesis and rheo-tribological behavior of 5-*n*-butylnorbornene oligomers // *ACS Journals — Energy&Fuels*, 2025, 39(29). 14042-14054.
2. Nazemutdinova V.R. *et al.* Low-Temperature Performance and Tribological Properties of Poly(5-n-butyl-2-norbornene) Lubricating Oils: Effect of Molecular Weight and Hydrogenation on the Viscosity and Anti-Wear Activity // *Polymers*, 2025, 17(24). 3333.

МОДИФИЦИРОВАНИЕ ХИТОЗАНА ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТОЙ МЕТОДОМ БЕЗРАСТВОРНОЙ РЕАКЦИОННОЙ ЭКСТРУЗИИ

***Гончарова К.Е.*[1,2], Кузнецов В.В.[2], Хавпачев М.А.[2], Акопова Т.А.[2]**

[1] Российский государственный университет имени А. Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство), г. Москва, ksenia_gon@mail.ru

[2] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, г. Москва

В настоящей работе метод экструзии использовали для модифицирования хитозана олеиновой кислотой. Полимераналогичную реакцию ацилирования полисахарида проводили в безрастворных условиях при температуре 60 °С в двухшнековом экструдере под действием давления и сдвиговых напряжений. Методом ИК-спектроскопии установлено, что твердофазная реакция протекает по смешанному механизму, включающему образование ионных пар и ковалентных амидных связей.

Показано, что после ультразвукового диспергирования продукты механообработки образуют устойчивые эмульсии в 2%-ном растворе уксусной кислоты (образцы ХТЗ-ОК). В аналогичных условиях физическая смесь хитозана и олеиновой кислоты также образует эмульсию, однако она быстро теряет устойчивость и расслаивается уже в течение первых суток. Средний размер капель дисперсной фазы эмульсии ХТЗ-ОК составляет около 5 мкм и не изменяется в течение двух месяцев хранения, что свидетельствует о высокой агрегативной устойчивости системы.

Установлено, что эмульсии обладают высоким положительным δ-потенциалом (+36 мВ при pH 4,5), что указывает на электростатический механизм их стабилизации. Добавление ацетата натрия приводит к снижению δ-потенциала, нарушению коллоидной устойчивости, фазовому разделению системы и выпадению полимерного осадка вследствие экранирования зарядов макромолекул.

Таким образом, в работе показано, что продукты реакционной экструзии хитозана с олеиновой кислотой способны формировать высокостабильные эмульсии, устойчивость которых обеспечивается электростатической стабилизацией капель олеиновой кислоты адсорбированными макромолекулами хитозана. Полученные результаты открывают перспективы использования разработанных амфифильных производных хитозана в качестве полимерных эмульгаторов и носителей гидрофобных биологически активных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (бюджетная тема FFSM-2025-0001).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЛУЖЕНИЯ ВТСП-ЛЕНТ ЭВТЕКТИЧЕСКИМ СПЛАВОМ PB-SN С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАЛОАКТИВНЫХ ФЛЮСОВ

***Преображенский И.И.*[1], Золотцев А.В.[1], Овчаров А.В.[1], Лукьянов П.А.[1], Шавкин С.В.[1]**

[1] *НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия, preobrazhenskiy_II@nrcki.ru*

Высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) на основе $ReBa_2Cu_3O_x$ (REBCO) являются необходимым компонентом для реализации термоядерного синтеза [1-3]. Для изготовления устройств на их основе необходимо решить задачу надежного электрического и механического соединения отдельных ВТСП лент, которая традиционно реализуется методом пайки. Целью настоящего исследования являлось нанесение припоя состава $Sn_{61}Pb_{39}$ на поверхность коммерческих ВТСП-лент с использованием различных малоактивных флюсов в интервале температур 200-400 °C, а также оценка влияния температуры и состава флюса на морфологию и изменение критического тока образцов.

Объектами исследования являлись коммерческие ВТСП-ленты шириной 4 мм и длиной около 5 см, произведенные компанией «С-Инновации» по технологии IBAD/PLD. Для удаления поверхностных загрязнений применяли малоактивные флюсы с температурой плавления до 350 °C. Лужение выполнялось погружением ВТСП-лент в паяльную ванну с расплавленным припоем $Sn_{61}Pb_{39}$.

Во всех исследованных режимах, включая нанесение припоя с флюсом ЛТИ-120 при температуре до 350 °C и выдержке 10 с, не зафиксировано снижения критического тока и критической температуры относительно исходных значений. Полученные результаты могут служить основой для разработки технологических рекомендаций по лужению ВТСП-лент.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

Список используемой литературы

1. Фетисов С., Зубко В., Занегин С., Каверин Д.С., Медников А.А. Расчет запаса по току прототипов проводов на основе ВТСП-2 лент для электромагнитных систем нового поколения // *Кабели и провода*, 2025, (8).
2. Преображенский И.И., Лукьянов П.А., Крылов В.Е., Шавкин С.В. Получение многослойных ВТСП-лент на основе $YBa_2Cu_3O_x$ и $(Sm/Dy)Ba_2Cu_3O_x$ методом импульсного лазерного напыления // *Неорганические материалы*, 2025, 61(11-12), 756-765.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ НАНОРАЗМЕРНОГО СЕЛЕНА, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ЦИТРУСОВЫМ ПЕКТИНОМ, ПРИ РАЗНЫХ ПОКАЗАТЕЛЯХ ИОННОЙ СИЛЫ СРЕДЫ

Русев Н.А., Голик А.Б., Татов А.В., Серов А.М., Андиралов А.Ю.

Северо-Кавказский Федеральный Университет, г. Ставрополь, rusevscience@gmail.com

Наноразмерный селен является перспективным материалом в области пищевой промышленности. Его использование в качестве пищевой добавки может в значительной мере восполнить запасы эссенциального селена в организме. Еще на этапе планирования обогащения того или иного продукта необходимо учитывать их разнообразный химический состав. Особенности химической среды могут стать ключевым фактором стабильности используемой добавки. Из этого вытекает необходимость изучения стабильности получаемых материалов в самых разнообразных условиях. В данной работе была изучена стабильность наночастиц селена, стабилизированного цитрусовым пектином, при различных показателях ионной силы среды. Наночастицы селена синтезировали путем химического восстановления в водной среде, после чего смешивали с растворами солей различных концентраций, измеряли размер методом динамического рассеяния света. Результаты измерений представлены в таблице 1.

Таблица 1. Средний гидродинамический диаметр наночастиц селена в средах различных солей

Соль	Концентрация соли, М	Диаметр, нм	Соль	Концентрация соли, М	Диаметр, нм
$CaCl_2$	0,1	185,53	NaCl	0,1	202,04
	0,25	228,38		0,25	180,15
	0,5	206,84		0,5	191,46
	0,75	200,71		0,75	178,03
	1	226,73		1	195,63
$FeCl_3$	0,1	184,05	K_3PO_4	0,1	132,88
	0,25	185.35		0,25	148,78
	0,5	199,63		0,5	222,82
	0,75	172,44		0,75	224,82
	1	212,04		1	446,05
Na_2SO_4	0,1	162,12	Контроль		162,42
	0,25	177,03			
	0,5	196,73			
	0,75	206,87			
	1	193,77			

В большинстве образцов было установлено незначительное влияние ионной силы среды на размеры наноразмерного селена, стабилизированного цитрусовым пектином.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-26-00466, https://rscf.ru/en/project/25-26-00466/

ДЕПРЕССОРНАЯ ПРИСАДКА ДЛЯ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА НА ОСНОВЕ ГИДРИРОВАННЫХ СОПОЛИМЕРОВ ЦИКЛООКТЕНА И АЦЕТОКСИЦИКЛООКТЕНА

***Степанянц В.Р.*[1,*], Моронцев А.А.[1], Бермешев М.В.[1]**

[1] *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, svr@ips.ac.ru*

Известно, что сополимеры этилена и винилацетата (СЭВА) широко используются в качестве депрессорной присадки для дизельных топлив [1]. Метатезисная сополимеризация циклооктена с ацетоксициклооктеном и последуюшее one-pot гидрирование двойных связей основной цепи является альтернативным способом синтеза линейных аналогов СЭВА (Схема 1). Целью данной работы является исследование возможности использования гидрированных сополимеров циклооктена и ацетоксициклооктена в качестве деперссорной присадки для дизельного топлива.

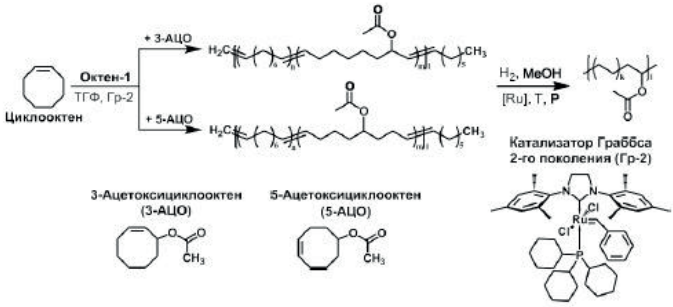


Схема 1. Схема тандем-синтеза метатезисной сополимеризации циклооктена с ацетоксициклооктенами с последующим one-pot гидрированием.

В рамках работы получен ряд низкомолекулярных метатезисных и гидрированных сополимеров циклооктена и ацетоксициклооктена, состав и строение которых подтверждены данными ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектроскопий. Продукты были дополнительно охарактеризованы методами ГПХ, ДСК, и РФА. Установлено, что гидрированные сополимеры циклооктена и ацетоксициклооктена снижают предельную температуру фильтруемости и температуру потери текучести растворов дизельных топлив при сохранении значения температуры помутнения.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИНХС РАН

Список используемой литературы

1. Cold Flow Improvers // Fuel Additives. / под ред. R. D. Tack. : Wiley, 2022. — С. 129–208.

СИНТЕЗ СЛОЖНЫХ ОКСИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СО СТРУКТУРОЙ ЭВКСЕНИТА РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

***Малинина И.А.*[1], *Кургузкина М.Е.*[2], *Беспрозванных Н.В.*[2], *Деркачева Е.С.*[2]**

[1]Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, irinamalinina2709@gmail.com
[2]Филиал НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИХС, Санкт-Петербург

Минералы группы эвксенита относятся к метамиктным оксидам с общей формулой AB_2O_6 (где A = РЗЭ (редкоземельные элементы), Fe^{2+}, Mn, Ca, Th, U, Pb; B = Nb, Ta, Ti, Fe^{3+}) [1]. Природный эвксенит и синтетические материалы на его основе рассматриваются как перспективные матрицы для иммобилизации высокоактивных отходов [2].

В лабораторных условиях получение материалов со структурой эвксенита (химическая формула $Y(NbTi)_2O_6$) возможно несколькими методами: твердофазным, гидротермальным методом с последующим обжигом и золь-гель методом.

Для твердофазного метода использовали оксиды иттрия (Y_2O_3), ниобия (Nb_2O_5) и титана (TiO_2), которые измельчали с помощью планетарной мельницы. Полученную смесь подвергали термической обработке при 1260 °C продолжительностью 4 ч. Далее образцы спрессовывали в таблетки и спекали при 1300 °C в течение 5 ч. Для гидротермального синтеза использовали растворы $NbCl_5$ в пропаноле, $TiOCl_2$, YCl_3, $NaOH/NH_3{\cdot}H_2O$. Суспензии заливали в тигель, который помещали в стальной автоклав и выдерживали 5 ч при 240 °C. Полученные осадки промывали водой до pH = 7, высушивали при 60 °C, спрессовывали в таблетки и обжигали при 1200 °C. В золь-гель методе смесь растворов $NbCl_5$ в пропаноле, изопропоксида титана ($Ti(OCH(CH_3)_2)_4$), $Y(NO_3)_3$, мочевины, лимонной кислоты, HNO_3 и $NH_3.H_2O$ сжигали при 150 °C в течение 5 ч. Полученный продукт измельчали, спекали при 600 °C в течение 1 ч, спрессовывали в таблетки и обжигали при 1200 °C в течение 1 ч. Образцы исследовали с помощью физико-химических методов.

Работа выполнена в рамках государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИХС, тема 1023032900322-9-1.4.3.

Список используемой литературы

1. Ewing R. C. A numerical approach toward the classification of complex, orthorhombic, rare-earth, AB_2O_6-type Nb-Ta-Ti oxides // The Canadian Mineralogist, 1976, V. 14, Part 2. P. 111–119.
2. Khanmiri. M. H., Bogdanov. R. V., Titov. A. V., Fomin. E. V., Samadfam. M., Outokesh. M. The Tendency Towards Equalization of the 234U/238U Isotopic Activity Ratios in Fractions of U (IV) and U (VI) During Thermal Annealing of Metamict Polycrase //Applied Geochemistry,2024, V. 161. P. 105881.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ИСХОДНОЙ БИОМАССЫ НА ТЕРМИЧЕСКОЕ РАСТВОРЕНИЕ ПРОДУКТОВ ГИДРОТЕРМАЛЬНОЙ КАРБОНИЗАЦИИ И ТОРРЕФИКАЦИИ

Манжиков М.А. [1], ***Новиков К.С.*** [1,2]

[1] *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, e-mail: m.manzhikov.work@gmail.com*

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

Лигноцеллюлозная биомасса — многокомпонентное сырье на основе природных высокомолекулярных соединений, склонное к влагопоглощению и микробиологическому воздействию при хранении. Сушка стабилизирует материал, практически не изменяя его исходных свойств, тогда как гидротермальная карбонизация (ГТК) и торрефикация химически модифицируют биомассу, способствуя деоксигенации и гидрофобизации [1]. Это расширяет возможности интеграции продуктов в последующие процессы, включая термическое растворение с получением жидких полупродуктов. Реакционная способность полученных материалов может зависеть не только от химической природы сырья, но и от его физико-химического состояния, сформированного при получении и предварительной обработке. В данной работе исследовали термическое растворение продуктов ГТК (190 °C, 4 ч, сырье:вода 1:5) и торрефикации (300 °C, 1 ч, N_2) коммерческой хлопковой ваты и хвойных древесных опилок в тетралине при 400 °C, начальном давлении H_2 5 МПа и выдержке 60 мин.

Таблица 1. Состав продуктов предобработки и результаты термического растворения

Материал	Предобработка	C, wt.% daf	O, wt.% daf	Жидкие продукты, мас.% daf
Хлопок	ГТК	47,6	46,3	55
	Торрефакция	47,9	46,1	60
Опилки	ГТК	56,9	37,0	53
	Торрефакция	58,3	35,6	47

Продукты ГТК и торрефикации одного сырья имели близкий валовый состав, однако различались по результатам растворения. Для хлопковой ваты различия по C и O составляли лишь 0,3 и 0,2 мас.%, тогда как торрефикация повышала выход жидких продуктов с 55 до 60 мас.%. Для древесных опилок при различиях по C и O по 1,4 мас.% выход жидкости, напротив, снижался с 53 до 47 мас.%. Таким образом, близость валового состава продуктов ГТК и торрефикации не означает сходства их реакционной способности. При выборе способа предобработки необходимо учитывать химическую природу и физико-химическое состояние исходного сырья.

Список использованной литературы

1. Kuptz D., Lesche S., Mendel T. et al. // Biomass and Bioenergy. 2020. Vol. 142. 105745.

СИНТЕЗ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕМ МЕХАНИЗМА С КАТИОННОЙ НА РАДИКАЛЬНУЮ RAFT ПОЛИМЕРИЗАЦИЮ

***Боровой Г.С*[1,2], Левшуков А.А.[2], Костюк С.В.[2]**

[1]*Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск*

[2] *Sorbonne Universite, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moleculaire, Equipe Chimie des Polymeres, 4 place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France*

Блок-сополимеры, полученные методами контролируемой полимеризации, находят широкое применение в различных областях биомедицины, науки и техники. В частности, меняя природу, порядок и размеры блоков можно задавать необходимые свойства получаемого материала. В настоящее время при помощи живой анионной, контролируемой радикальной и катионной полимеризации были получены различные блок-сополимеры [1]. Такие подходы несмотря на свое широкое использование значительно ограничены малым разнообразием получаемых материалов, так как многие мономеры способны вступать в реакции (со)полимеризации только по одному из механизмов. При этом возможность переключения механизмов полимеризации с катионного на радикальный или с радикального на катионный значительно расширяет синтетические возможности получения уникальных полимерных материалов. Так, ранее была показана возможность синтеза блок-сополимеров виниловых эфиров и метилакрилата при помощи чередования электрических и фотохимических стимулов в присутствии агента обратимой передачи цепи [2]. Тем не менее, синтез блок-сополимеров на основе менее активных в катионной полимеризации мономеров остается сложной задачей.

В ходе работы были предложены и синтезированы дитиобензоатные агенты обратимой передачи цепи. Полученные дитиобензоаты показали как возможность протекания процесса контролируемой катионной полимеризации, так и радикальной. Были получены гомополимеры изобутилвинилового эфира и метоксистирола с молекулярными массами близкими к заданным и низкой полидисперсностью (1,17-1,34). Также при помощи переключения механизмов полимеризации были получены диблок-сополимеры изобутилвинилового эфира и метоксистирола с мономерами акрилатного типа.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Х26М-062)

Список используемой литературы

1. Eva Harth et al, Chem. Rev. 2022, 122, 18, 14471–14553
2. Read de alaniz et al, J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 31, 12278–12285

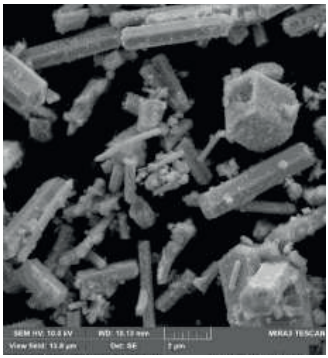
ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА ВИСМУТА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ АЛЬГИНАТОМ НАТРИЯ

Бочаров Н.М., Блинов А.В., Попова А.Ю., Тюппеева С.А.

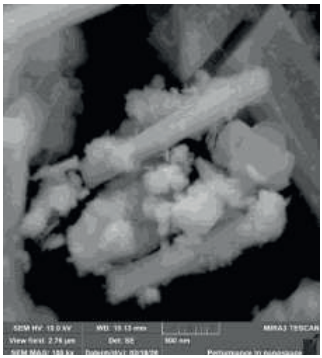
Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, bochamocha26@yandex.ru

Наночастицы оксида висмута представляют значительный интерес благодаря своим антибактериальным, фотокаталитическим и биосовместимым свойствам. Существенное влияние на свойства наноразмерного оксида висмута оказывают условия получения и природа используемого стабилизатора. Альгинат натрия является биосовместимым полисахаридом, способным взаимодействовать с поверхностью формирующихся частиц, влияя на их рост и морфологию. Использование альгината натрия позволяет регулировать процесс кристаллизации оксида висмута и получать материалы с заданными структурными характеристиками. В связи с этим исследование морфологии наночастиц оксида висмута, синтезированных в присутствии альгината натрия, представляет интерес для разработки новых функциональных материалов.

Наночастицы оксида висмута получали химическим осаждением и исследовали их морфологию на сканирующем электронном микроскопе *MIRA-LMH*. Полученные микрофотографии представлены на рисунке 1.



а)



б)

Рисунок 1. СЭМ-микрофотографии наночастиц оксида висмута: а) приближение в 20000 раз; б) приближение в 100000 раз

Анализ рисунков показал, что образец состоит из сформированных кристаллов стержневидной формы, на поверхности которых наблюдаются наночастицы. Это указывает на формирование иерархической структуры материала с сочетанием крупных кристаллов и мелкодисперсной фазы.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ФЕРРОМАГНИТНОЙ Т-ФАЗЫ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА MNAL ПУТЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ МЕДЬЮ

***Терехина У.А.*[1], *Горшенков М.В.*[2], *Нечаев К.С.*[2]**

[1] *Университет науки и технологий МИСИС, Москва, yanatereh11@gmail.com*
[2] *Университет науки и технологий МИСИС, Москва*

Компромисс между низкой эффективностью магнитотвердых ферритов и дороговизной редкоземельных магнитов может воплотиться в сплавах системы Mn-Al — согласно теоретическим расчетам, отношение эксплуатационных характеристик к стоимости готового магнита для них является максимальным среди всех магнитотвердых материалов [1], Однако их ферромагнитная η-фаза метастабильна. Вероятно, решить эту проблему без повышения себестоимости сплава можно, легировав эквиатомный MnAl медью: подобно Ga, с помощью Cu после отжига можно получить стабильную η-фазу из γ_2, ранее считавшейся паразитной [2].

В ходе выполнения данной работы были получены и исследованы образцы состава $Mn_{48+x}Al_{49,5-x}Cu_{2,5}$ (x = 0 — 4 %). Фазовый состав оценивался средствами дифрактометрии и СЭМ. Показано, что снижение содержания Mn приводит к уменьшению доли паразитных фаз вплоть до отсутствия β-Mn уже в литом образце состава $Mn_{48}Al_{49,5}Cu_{2,5}$. После проведения ДСК-исследований была выбрана температура отжига 600 °C, позволяющая осуществить переход $\gamma_2 \rightarrow \eta$, и два режима термической обработки — «классическое» сочетание закалки из однофазного ε-состояния с последующим отжигом и длительный отжиг, направленный на протекание превращения $\gamma_2 \rightarrow \eta$. По итогам фазового анализа наилучшие результаты показал образец с составом $Mn_{49,3}Al_{48,3}Cu_{2,4}$ после длительного отжига в течение 23 часов — удалось добиться доли магнитных η-фаз более 90 %. Для дальнейшего анализа магнитных свойств был выбран именно этот образец как представляющий наибольший интерес и перспективность.

Магнитометрия показала наличие двух температур Кюри — 531 К для фазы η(γ_2) и 590 К для фазы η(ε). Остаточная намагниченность составила $M_r = 83 \pm 4$ кА/м, коэрцитивная сила — $H_c = 63 \pm 3$ кА/м, намагниченность насыщения образца — $I_s = 566 \pm 28$ кА/м. В связи с пониженным уровнем полученных магнитных свойств актуальными для дальнейшего изучения являются направления, связанные с поиском путей достижения высоких значений энергетического произведения.

Список используемой литературы

1. Jia Y. et al. Roadmap towards optimal magnetic properties in L10-MnAl permanent magnets // *Acta Materialia.* 2023. V. 245. Art. 118654.
2. Baldino, Henri. Towards Efficient and Sustainable Magnets: Controlling L10 Ordering in the MnAl System Through Elemental

ПОЛУЧЕНИЕ МАГНИТНОГО НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ВЫСОКОДИСПЕРСНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ — ЭКОЛОГИЧНОГО СОРБЕНТА КОБАЛЬТА ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД

***Романов Н.К*[1], Дроздов А.С.[1]**

[1] *АНОО ВО «Научно-технологический университет «Сириус», Краснодарский край, федеральная территория Сириус, niknikromanoff@yandex.ru*

Разработка доступных и экологически безопасных сорбентов для удаления ионов тяжелых металлов является актуальной задачей современной экохимии. Особый интерес представляет создание материалов на основе возобновляемого целлюлозосодержащего сырья, сочетающих эффективность, низкую стоимость и возможность повторного использования.

В работе описан доступный и потенциально более экологичный метод получения высокодисперсной целлюлозы (ВДЦ) посредством растворения целлюлозосодержащего сырья в медно-аммиачном растворе с последующим осаждением частиц диаметром от 815 нм (рис. 1) [1-2]. На основе ВДЦ синтезирован магнитный композит, продемонстрировавший при концентрации Co^{2+} 10 мМ сорбционную емкость до 42,85 мг/г при емкости ВДЦ до 64,85 мг/г, сохраняя емкость при многократной циклической сорбции.

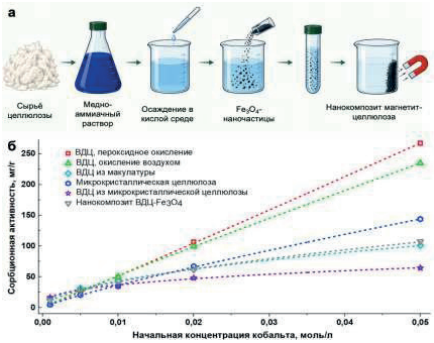


Рисунок 1. а) Схема получения нанокомпозита высокодисперсная целлюлоза — магнетит; б) Сорбционная емкость ВДЦ и композита в отношении Co^{2+} по модели Фрейндлиха

Список используемой литературы

1. Лукутцова Н. П., Карпиков Е. Г., Романов Н. К. Получение высокодисперсной микро- и наноцеллюлозы методом осаждения из медно-аммиачного раствора // *Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г. И. Носова*, 2025, 4. 119-128.
2. Volov A. et al. Bio-inspired surface modification of magnetite nanoparticles with dopamine conjugates // *Nanomaterials*, 2022, 12. 2230.

НАНЕСЕННЫЕ НА СИЛИКАГЕЛЬ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ В КАЧЕСТВЕ РЕГЕНЕРИРУЕМЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ СИНТЕЗА РЕАКЦИОННОСПОСОБНОГО ПОЛИИЗОБУТИЛЕНА

***Жудрик А.Д.*[1], *Березянко И.А.*[1,2], *Василенко И.В.*[1], *Костюк С.В.*[3]**

[1] *НИИ ФХП БГУ, г. Минск, Беларусь, zhudrykanastasiya@gmail.com*
[2] *ФГАОУ ВО Первый МГМУ имени И.М. Сеченова Минздрава РФ, г. Москва, РФ*
[3] *Сорбонский университет, Научный отдел химии полимеров, Париж, Франция*

Низкомолекулярный полиизобутилен (M_n ≤ 2500 г/моль) с содержанием *экзо*-олефиновых концевых групп > 80 мольн.% (реакционноспособный полиизобутилен, РПИБ) служит ключевым интермедиатом при получении беззольных присадок к моторным маслам и топливам [1]. На сегодняшний день РПИБ в промышленности получают катионной полимеризацией изобутилена (ИБ) с использованием комплексов BF_3 со спиртами или простыми эфирами в углеводородах при температурах ниже 0 °C. Главным недостатком такого подхода является токсичность и коррозионная активность BF_3. Поэтому в синтетической полимерной химии последние десятилетия активно разрабатываются инициирующие системы для получения РПИБ.

В настоящей работе синтез РПИБ в *н*-гексане был проведен с использованием в качестве катализатора кислотной ионной жидкости 3-метил-1-этилимидазолий хлорид–1,5$FeCl_3$, нанесенной на силикагель. В результате при массовой доле ИЖ в составе нанесенного катализатора 30% и в присутствии 0,5 экв. диизопропилового был синтезирован РПИБ с M_n < 1500 г/моль, низкой дисперсностью (Đ < 2) и высоким содержанием *экзо*-олефиновых концевых групп (80-90 мольн.%). Процесс катионной полимеризации ИБ на нанесенном катализаторе характеризуется количественным отделением твердой фазы катализатора от реакционной массы. Это позволяет проводить как минимум 6 циклов полимеризации без существенной потери каталитической активности. При этом после каждого цикла образуется РПИБ с высокой функциональностью и требуемыми молекулярно-массовыми характеристиками.

Работа выполнена в рамках государственной программы научных исследований «Химические процессы и технологии», 2026-2030 гг. (задание 2.1.01.01, № гос. регистрации 20261334).

Список используемой литературы

1. Rajasekhar T., Singh G., Kapur G.S., Ramakumara S.S.V. Recent advances in catalytic chain transfer polymerization of isobutylene: a review // *RSC Adv*., 2020, Т. 10. С. 18180–18191.

ПОЛИИМИДНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ, АРМИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦАМИ TiO_2, ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ

Букичев Ю.С., Джардималиева Г.И.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, uresbuki4eff@yandex.ru

Электрореологические жидкости представляют собой суспензии дисперсных частиц в диэлектрической среде, вязкость которых обратимо изменяется под действием электрического поля, а перспективным способом повышения стабильности и величины отклика таких систем является использование в качестве дисперсной фазы полимерных нанокомпозитов, армированных неорганическими наночастицами. В настоящей работе исследованы полиимидные нанокомпозиты на основе 4,4'-оксидианилина и пиромеллитового диангидрида, армированные наночастицами TiO_2, полученные по ранее разработанной одностадийной технологии синтеза [2].

Показано, что введение наночастиц приводит к формированию характерных структур в объеме полимерной матрицы и закономерному изменению морфологии материала, сопровождается повышением термической стабильности и снижением диэлектрических потерь. При использовании полученных нанокомпозитов в качестве дисперсной фазы суспензий в силиконовом масле установлено псевдопластичное реологическое поведение с необратимым разрушением структуры при сдвиговых нагрузках и отсутствием тиксотропии. Показано, что такие суспензии обладают выраженным и воспроизводимым положительным электрореологическим откликом при приложении электрического напряжения, причем механизм отклика изменяется с поляризационного на поляризационный с вкладом проводимости при введении наночастиц.

Полученные результаты открывают перспективы использования армированных TiO_2 полиимидных нанокомпозитов в качестве «умных материалов» с управляемыми реологическими характеристиками.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 124013000757-0 с использованием оборудования аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Список используемой литературы

1. Букичев Ю.С., Голубева Н.Д., Келбышева Е.С., Джардималиева Г.И. Дисперсный полиимидный композиционный материал на основе полиимидной матрицы и способ его получения (RU2855285), 2024.

ВЛИЯНИЕ ЧИСТОТЫ МОНОМЕРА И КОНЦЕНТРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА ПЕРЕЭТЕРИФИКАЦИИ НА СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ ВИТРИМЕРНОГО ТИПА

Шершнева И.Н., Букичев Ю.С., Джардималиева Г.И.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, uresbuki4eff@yandex.ru

Витримеры представляют собой новый класс полимеров, сочетающих прочность термореактивных смол со способностью к переработке и восстановлению, характерной для термопластов. Это достигается за счет динамических ковалентных связей, способных к ассоциативному обмену при нагревании. Диглицидиловый эфир бисфенола А (ДГЭБА) и ангидридные отвердители являются одними из наиболее перспективных компонентов для создания материалов, способных к востановлению, однако механизм влияния чистоты мономера и концентрации катализатора переэтерификации на свойства витримеров остается недостаточно изученным. В данной работе ДГЭБА выделен из смолы ЭД-20 методом кристаллизации из смеси ацетон–метанол. Катализатор переэтерификации ацетилацетонат Zn(II) ($Zn(acac)_2$) синтезирован из ацетата цинка осаждением аммиаком через стадию образования растворимого аммиачного комплекса $[Zn(NH_3)_4]^{2+}$ с выходом около 85 %. Составы витримеров готовили смешением ДГЭБА с метилтетрагидрофталевым ангидридом (МТГФА) в стехиометрическом соотношении и $Zn(acac)_2$ в количестве 1-5 мол.%.

Показано, что чистота исходного ДГЭБА оказывает определяющее влияние на свойства витримеров: образец с олигомерными примесями характеризуется низкой температурой стеклования (T_g=50 °C) и способен к залечиванию трещин при нагреве до 100

°C, тогда как при использовании чистого ДГЭБА образец с 1 мол.% $Zn(acac)_2$ имеет T_g=150

°C и размягчается лишь при 160-180 °C. Методом ТГА установлено, что термическая деструкция протекает в две стадии: потеря массы на первой стадии, вероятно, связана с разложением низкомолекулярных фракций и остаточного растворителя, а наличие олигомерных примесей снижает термостабильность материала в целом. Установлено, что чистота мономера и концентрация катализатора являются ключевыми факторами, определяющими T_g, термостабильность и способность к восстановлению, что создает основу для направленного конструирования витримерных материалов с заданными эксплуатационными свойствами.

Работа выполнена в рамках государственного задания, № гос. регистрации 124013000757-0 с использованием оборудования аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

ГОМО- И ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ CU/NI МОКП С 2-АМИНОБЕНЗОЛ-1,4-ДИКАРБОКСИЛАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ: ВЛИЯНИЕ НИКЕЛЯ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА

***Орел Е.А.*[1,2], Дзеранов А.А.[1], Букичев Ю.С.[1], Джардималиева Г.И.[1]**

[1] Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка

[2] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, ekanorel@edu.hse.ru

Разработка высокочувствительных сенсорных платформ для неэнзимного определения глюкозы является актуальной задачей современной химии высокомолекулярных систем. Металл-органические координационные полимеры (МОКП) привлекают внимание в качестве активных материалов сенсоров благодаря возможности направленного дизайна структуры и высокой удельной поверхности. Перспективными объектами для электрокаталитического детектирования глюкозы выступают медь- и никельсодержащие МОКП, где совместное введение редокс-активных пар Cu(II)/Cu(III) и Ni(II)/Ni(III) в гетерометаллический каркас обеспечивает синергетический эффект за счет переноса заряда и повышения электрокаталитической активности к окислению глюкозы [1]. В данной работе методом сольвотермического синтеза в среде диметилформамида при температуре 140 °C в течение 12 ч были синтезированы гомометаллический Cu-MOF и гетерометаллический Cu/Ni-MOF. Полученные осадки отделяли центрифугированием (7000 об/мин, 7 мин, три раза), промывали этанолом, после чего сушили в вакууме без нагрева.

ИК-спектроскопия подтвердила формирование координационного каркаса: в спектрах образцов присутствуют характерные полосы валентных колебаний аминогрупп, а также симметричных и асимметричных колебаний депротонированных карбоксилатных групп. По данным РФлА, эквимолярная загрузка солей-прекурсоров сохраняется в продукте: мольное соотношение Cu:Ni в гетерометаллическом образце составляет 1:1. Анализ дифрактограмм (РФА) подтвердил сохранение кристаллической структуры при введении никеля.

Таким образом, получены гомо- и гетерометаллические МОКП на основе Cu и Ni с сохраненной кристаллической структурой каркаса, перспективные в качестве электрокаталитически активных материалов для создания неэнзимных сенсоров глюкозы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-13-00404, https://rscf.ru/project/26-13-00404/

Список используемой литературы:

1. Zhe Xue, Lei Jia et al. High-performance non-enzymatic glucose electrochemical sensor constructed by transition nickel modified Ni@Cu-MOF // *Journal of Electroanalytical Chemistry,* 2020, Vol. 858. № 113783.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И СОРБЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ АЭРОГЕЛЕЙ НКЦ, ИМПРЕГНИРОВАННЫХ ФАМАТАМИ, МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

***Соборнова В.В.*[1], Белов К.В.[1], Дышин А.А.[1], Толстой П.М.[2], Муллоярова В.В.[2], Киселев М.Г.[1], Ходов И.А.[1,3]**

[1]Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново, 153045, Россия
[2]Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, 199034, Россия
[3]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва, 119991, Россия

Микропористые аэрогели, получаемые с использованием сверхкритических флюидных технологий (СКФ), рассматриваются как перспективные носители для плохо растворимых активных фармацевтических ингредиентов (АФИ). Иммобилизация лекарственных веществ в порах аэрогеля позволяет стабилизировать их аморфное состояние, однако особенности взаимодействия АФИ с пористой матрицей изучены недостаточно. В работе проведена характеристика свойств композитных материалов на основе аэрогеля нанокристаллической целлюлозы (НКЦ), импрегнированного мефенамовой (МК) и флуфенамовой (ФК) кислотами, с применением методов спектроскопии ЯМР в среде сверхкритического диоксида углерода (скCO_2).

По данным ^{13}C ЯМР, «введение» ФК в структуру аэрогеля приводит к смещению сигнала CO_2 на 0.44 м.д., что указывает на изменение его локального окружения при сорбции. При этом время корреляции увеличивается с 0.15 ч для исходного аэрогеля до 0.38 ч для НКЦ_МК и 0.25 ч для НКЦ_ФК, что свидетельствует об изменении сорбционных свойств матрицы. Результаты ^{13}C MAS ЯМР показали сохранение структуры НКЦ после импрегнирования. На основе анализа ^{19}F MAS ЯМР обнаружено два состояния ФК в композите: аморфное в объеме пор (– 62.15 м.д.) и «жидкоподобное» на поверхности пор (– 65.09 м.д.) в соотношении 2:1. Это подтверждает неоднородность локального окружения АФИ в матрице аэрогеля. Результаты подробнее описаны в работе [1].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-13-00257-П.

Список используемой литературы

1. Sobornova V.V., Mulloyarova V.V., Belov K.V., Dyshin A.A., Tolstoy P.M., Kiselev M.G., Khodov I.A. Structural and Sorption Characteristics of Nanocellulose Aerogel-Based Composite Materials Doped with Mefenamic and Flufenamic Acids: Insights from Magic Angle Spinning and High-Pressure NMR Spectroscopy // Journal of Physical Chemistry Letters. 2025. Vol. 16 (26). p. 6817 — 6824.

НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ ФТАЛОЦИАНИНА МАРГАНЦА НА ОСНОВЕ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ (СО)ПОЛИМЕРОВ N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ

***Ульянов И.В.*, Рыбкин А.Ю., Козлов А.В., Курмаз С.В.**

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, г. Черноголовка, ulianoviv@icp.ac.ru

Цель работы – разработка полимерных композиций (ПК) гидрофобного фталоцианина марганца (PcMn) — перспективного агента для фототермальной терапии онкологических заболеваний на основе водорастворимых термочувствительных (со)полимеров N-изопропилакриламида (НИПА) различного строения, полученных радикальной сополимеризацией в этаноле [1].

Сопоставлены спектры поглощения нативного PcMn в органических растворителях и в составе ПК в водных растворах. Исследовано влияние строения полимерной матрицы и —загрузки PcMn (0.5-1.5 мас.%) на параметры Q-полосы красителя в спектрах поглощения водных растворов ПК. Обнаружено, что в водных растворах ПК на основе сополимера поглощение Q-полосы значительно более выражено по сравнению с ПК на основе линейного пНИПА; оптимальная —загрузка составила 1 мас.%. Методом динамического рассеяния света показано наличие рассеивающих центров с гидродинамическими радиусами ~ 30 и 80 нм для ПК на основе сополимера и пНИПА соответственно в нейтральном фосфатно-солевом буферном растворе (pH 7.3): их значение возрастало с температурой. ПК демонстрируют термочувствительность аналогичную исходным (со)полимерам в водных средах. В экспериментах на модельных биологических структурах (липосомы, гомогенат головного мозга мышей) обнаружено, что ПК остаются стабильными и высвобождения PcMn из полимерных частиц не происходит. Однако, как показали предварительные опыты, ПК проявляют фототоксическое действие на клетки HeLa (оценивалось методом МТТ) при облучении красным светом (660 нм) в результате накопления PcMn в клетках при инкубации

24 часа. Разработанные ПК на основе термочувствительных (со)полимеров могут быть полезными при создании стимул-чувствительных материалов для фототермальной терапии онкологических заболеваний.

Работа выполнена в рамках государственного задания (государственная регистрация 124013000722-8, № 124020500019-2).

Список используемой литературы

1. Ulyanov I.V., Vasil'ev S.G. et all. Synthesis and Properties of Amphiphilic Copolymers of N-Isopropylacrylamide with Triethylene Glycol Dimethacrylate Containing Amino and Carboxyl Groups // *Pol. Sci., Ser. B.*, 2024, 66. 739-748.

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ МАГНИТНОГО МАТЕРИАЛА НА ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛИ-ХЛОР-ПАРА-КСИЛИЛЕНОВОГО ПОКРЫТИЯ ПРИ CVD-ИНКАПСУЛИРОВАНИИ

Киселев А.В.[1], Глущенков А.В.[1], Гусев А.В.[1], Косицын С.А.[1], Суров Д.И. [1,2], Набоко А.С.[1]

[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

[2] Национальный исследовательский технологический университет МИСиС, Москва, Россия e-mail: kav1996@yandex.ru

Электроизоляционные покрытия магнитных материалов применяют для снижения межчастичной проводимости и вихретоковых потерь. При CVD-осаждении дихлор-дипараксилена (Parylene C dimer) результат зависит не только от режима процесса, но и от геометрии покрываемого объекта. Цель работы — сопоставить особенности инкапсулирования порошка магнитомягкого сплава БДСР и ферритовых сердечников. Дихлор-дипараксилен наносили по схеме Горкхэма с пиролизом димера при 650 °С. Порошок 5БДСР и сердечники обрабатывали во вращающемся барабане. Количество нанесенного полимера определяли гравиметрически, поверхность исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ).

Для порошка 5БДСР при содержании парилена 0,6 мас. % расчетная толщина покрытия составляла около 2 мкм. Для ферритовых сердечников содержание 0,5 и 1,0 мас. % соответствовало толщине около 10 и 22 мкм. Полученные различия связаны прежде всего с отношением площади поверхности к массе объекта и доступностью поверхности для газофазного мономера.

Таким образом, массовая доля парилена не может непосредственно использоваться для сопоставления толщины покрытия объектов различной геометрии. При переносе режимов CVD-инкапсулирования между порошками и компактными магнитными элементами необходимо учитывать их удельную поверхность.

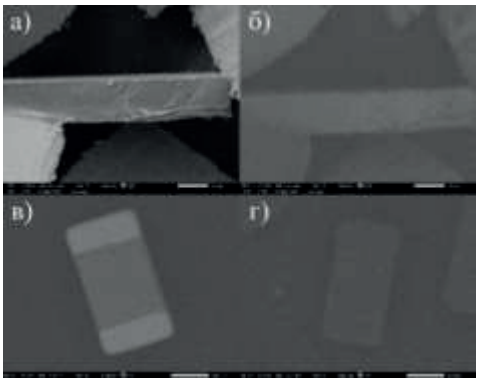


Рисунок 1. РЭМ-изображения магнитных материалов: а, б — порошок ПМ-5БДСР с поли-хлор-пара-ксилиленовым покрытием; в — исходный ферритовый сердечник; г — ферритовый сердечник с поли-хлор-пара-ксилиленовым покрытием.

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ОКСИДА МАРГАНЦА, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ГЕМИЦЕЛЛЮЛОЗОЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПОКАЗАТЕЛЯХ *PH* СРЕДЫ

Блинов А.В., Попова А.Ю., Бочаров Н.М., Горчаков Э.В.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, anasstassiapopova@mail.ru

Наночастицы оксида марганца перспективны для создания функциональных материалов, включая термочувствительные компоненты, сенсоры и электроды для систем хранения энергии. Это связано с их способностью участвовать в обратимых окислительно-восстановительных реакциях и проявлять полупроводниковые свойства. Для предотвращения их склонности в агрегации, в особенности при изменении условий в растворе, используют полисахариды (производные целлюлозы). Это природные полисахариды, которые обволакивают частицы и защищают их от слипания, благодаря стерической стабилизации. Устойчивость такой дисперсной системы напрямую зависит от кислотности среды (*pH*), именно поэтому изучение таких частиц актуально. Наночастицы оксида марганца синтезировали золь-гель методом. У полученных образцов исследовали размер и ξ-потенциал при различных значениях *pH* на анализаторе наночастиц *BeNano 180 Zeta Pro*.

Таблица 1. Зависимость размера частиц и ξ-потенциала от pH

pH	Диаметр, нм	ξ-потенциал, мВ
2,21	360,87	-103,76
3,29	269,17	-167,54
4,56	237,34	-168,86
5,72	882,48	-193,95
6,86	335,92	-191,41
7,96	397,74	-204,47

Наименьший размер частиц (237,34 нм) наблюдается при pH 4,56. При *pH* 5,72 происходит резкое увеличение диаметра до 882,48 нм, что указывает на интенсивную агрегацию. При дальнейшем повышении *pH* размер частиц уменьшается, но остается повышенным. Значения ξ-потенциала во всем диапазоне *pH* отрицательны и находятся в пределах от -103,76 до -204,47 мВ, свидетельствуя о высокой степени заряженности поверхности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-44-20032, https://rscf.ru/project/25-44-20032/.

МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ $KNbO_3$

***Калугина Д.С.**, Матвеев А.Т., Штанский Д.В.*

[1] Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, m2208408@edu.misis.ru

$KNbO_3$ является перспективным фотокатализатором за счёт положения энергетических зон, обеспечивающего генерацию широкого спектра активных частиц. Однако $KNbO_3$, получаемый твёрдофазным методом, обладает ограниченной активностью вследствие агломерации частиц и поверхностного карбонатного загрязнения. В данной работе исследовано влияние шарового размола на удельную поверхность, микродеформации решётки и фотокаталитическую активность $KNbO_3$ под УФ-излучением.

$KNbO_3$ получали отжигом смеси K_2CO_3 и Nb_2O_5 при 800 °C и подвергали шаровому размолу в течение 40, 60 и 80 мин. Кристаллическую структуру $KNbO_3$ исследовали методом РФА, удельную поверхность - методом БЭТ, электронную структуру - методами РФЭС и спектроскопии диффузного отражения, рекомбинацию носителей заряда - методом фотолюминесценции. Фотокаталитическую активность оценивали по скорости индуцированной деградации родамина B.

Установлено, что шаровой размол приводит к росту удельной поверхности и микродеформаций решётки $KNbO_3$. За 60 мин размола удельная поверхность увеличивается с 0,82 до 3,93 $м^2 \cdot г^{-1}$, микродеформации - с 0,13 до 0,38 %, а фотокаталитическая активность - с 11,99 до 15,61 $мг \cdot г^{-1} \cdot ч^{-1}$. Выявлено, что ширина запрещённой зоны уменьшается с 3,47 до 3,26 эВ вследствие искажения NbO_6-октаэдров. Размол в течение 80 мин приводит к дальнейшему росту удельной поверхности и микродеформаций до 6,35 $м^2 \cdot г^{-1}$ и 0,44 % соответственно. Однако фотокаталитическая активность снижается до 13,56 $мг \cdot г^{-1} \cdot ч^{-1}$ из-за усиления рекомбинации носителей заряда, что подтверждается ростом интенсивности фотолюминесценции

Таким образом, фотокаталитическая активность $KNbO_3$ определяется оптимальным соотношением развитости поверхности и микродеформаций кристаллической решётки. Механическая обработка способствует разделению фотогенерированных носителей заряда, тогда как избыточное накопление дефектов усиливает их рекомбинацию [1]..

Исследование финансировалось Российским научным фондом (25-19-00458).

Список используемой литературы

1. Калугина Д.С., Матвеев А.Т. и др. Effect of ball-milling on microstrain, specific surface area, and photocatalytic activity of $KNbO_3$ // Materials Science and Engineering: B, 2026, т. 332. 119636.

ВЛИЯНИЕ ДОБАВЛЕНИЯ ЭФИРА 15-КРАУН-5 НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ БИС(ОКСАЛАТО)БОРАТА НАТРИЯ ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ.

***Проценко Е.Л.*[1], *Репина А.А.*[1,2], *Иноземцева А.И.*[1,2]**

[1]Московский физико–технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, ek.protsenkko@gmail.com

[2]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова

Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) — перспективная альтернатива литий–ионным системам. Натрий — один из самых распространенных элементов на Земле, его запасы более чем в 1000 раз превышают запасы лития, а стоимость соединений в 20-30 раз ниже. Это обеспечивает НИА более низкую себестоимость конечных устройств и устраняет ограничения по сырью, характерные для ЛИА. Но несмотря на все преимущества НИА, основной проблемой остается выбор подходящего электролита. Бис(оксалато)борат натрия (NaBOB) является перспективной бесфторной солью, способной обогащать SEI борсодержащими соединениями, повышая стабильность межфазного слоя и его ионную проводимость, однако ее широкое применение ограничено низкой растворимостью в большинстве органических растворителей [1,2]. Добавка эфира 15-краун-5 в состав электролита позволяет повысить растворимость NaBOB за счет комплексообразования с Na^+ и способствует формированию анион-обогащенных межфазных слоев [3]. В данной работе исследуются электрохимические характеристики 0.3 М электролитов на основе NaBOB в эфирных (триглим (3G), тетраглим (4G)) и карбонатных (EC:EMC 1:3) растворителях с добавлением эфира 15-краун-5. С помощью метода циклической вольтамперометрии было показано, что все электролиты, содержащие 15-краун-5, электрохимически стабильны в диапазоне потенциалов 0 — 4.5 В отн. Na/Na^+. При гальваностатическом циклировании полуячеек Na/NVP при токе C/10 с электролитами 0.3 M NaBOB/EC:EMC + 0.3 M 15-Crown-5 и 0.3 M NaBOB/4G + 0.3 M 15-Crown-5 удельные емкости составили 80 мАч/г$^{-1}$ и 85 мАч/г$^{-1}$, соответственно. Полученные характеристики близки к литературным для NVP в стандартных электролитах на основе 1 M $NaPF_6$ (90 — 110 мАч/г$^{-1}$ [4,5]), что подтверждает работоспособность NaBOB-содержащих электролитов и целесообразность их дальнейшей оптимизации.

Список использованной литературы

1. Mogensen R. et al. // ACS Appl. Energy Mater. 2020. Vol. 3. P. 4974–4982.
2. Mogensen R. et al. // Chem. Mater. 2021. Vol. 33. P. 1130–1139.
3. Zhao H. et al. // J. Alloys Compd. 2023. Vol. 947. 169823.
4. Stüble P. et al. // Batteries & Supercaps. 2024. DOI: 10.1002/batt.202300375.
5. Lu Q., Omar A., Ding L. et al. // J. Mater. Chem. A. 2021. Vol. 9. P. 9038–9047. DOI: 10.1039/D1TA00066G.

СИНТЕЗ И ТЕРМИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ БОРГИДРИДА ЛИТИЯ С МОЧЕВИНОЙ

Загороднова А.С.[1], Соловьев М.В.[1], Васильев В.П.[1], Кравченко О.В. [1], Шиховцев А.В.[1], Добровольский Ю.А.

[1] ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, zagorodnova01@mail.ru

Водород является экологичным энергоносителем с нулевыми выбросами в точке использования вносящим значительный вклад в достижение целей углеродной нейтральности к 2050 году. Широкому распространению водорода мешает проблемы транспортировки и хранения, поэтому крайне важно разработать компактные, легкие, безопасные и экономически эффективные решения, сочетающие высокую массовую емкость по водороду и приемлемую температуру его выделения. В качестве твердофазных материалов значительный интерес представляют комплексные гидриды, в частности борогидрид лития ($LiBH_4$) из-за высокой массовой и объемной плотности водорода. Однако, его использование затруднено из-за высокой термической стабильности. Одним из подходов к снижению температуры дегидрирования $LiBH_4$ является его химическая модификация соединениями, содержащими NH-группы. Среди таких соединений можно выделить мочевину, образующую с боргидридом лития стабильный комплекс, разложение которого проходит при невысокой температуре с образованием чистого водорода [1].

Механохимически были синтезированы новые координационные соединения $CO(NH_2)_2$:$LiBH_4$ = 3:1, 2:1, 1:2 и 1:3. Методом РФА было установлено образование новых фаз, а также исчезновение фаз исходных соединений. Методом ИК-спектроскопии было показано изменение частот валентных N-H колебаний для координационных соединений относительно чистой мочевины, а также возникновения нового пика, вероятнее всего, соответствующего координации Li-O. При 120°C результаты ДСК-ТГА демонстрируют начало потери массы, при том, что исходные соединения разлагаются при значительно более высоких температурах. Наиболее термически неустойчивым комплексом является комплекс при соотношении компонентов $LiBH_4$:$CO(NH_2)_2$ = 1:3.

Исследование выполнено в рамках госзадания (темкарта № 124013000692-4).

Список используемой литературы

1. Liu L., Wu G., Chen W., Xiong Z., Chen P. Synthesis and hydrogen storage properties of lithium borohydride–urea complex// Int. J. of Hydro. Energy, 2015, 40, 429-434.

МЕМБРАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ШИРИНОЙ НАНОЩЕЛИ

***Грибалева Е.Д.*[1,2], Гурьянов К.Е.[2], Лесных А.А.[2], Елисеев А.А.[2]**

[1] МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, e.gribaleva21@mail.ru

[2] МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва

В работе представлены результаты практического исследования процессов массопереноса через ассиметричные мембраны на основе нанолистов оксида графена, нанесенных на анодный оксид алюминия или пористую полимерную подложку. Изучены механизмы массопереноса различных молекул в таких системах и показана возможность эффективного разделения компонентов газовой смеси по механизму капиллярной конденсации. Продемонстрирована возможность направленного изменения транспортных характеристик таких мембран в зависимости от внешних условий разделения (парциальное давление компонентов, ионная сила и pH раствора).

Водные суспензии оксида графена были получены с использованием модифицированного метода Хаммерса (C/O ~1,9, размер нанолистов ~ 7 μм). С использованием методов нанесения на вращающуюся подложку и фильтрации под давлением были сформированы композиционные мембраны. Показано, что размер нанощели в сформированных мембранах увеличивается как с ростом активности паров воды, так с ростом pH обрабатывающей смеси, что хорошо согласуется с увеличением величины δ-потенциала поверхности нанолистов. Методами РФЭС и ИК-спектроскопии был исследован химический состав нанолистов оксида графена в зависимости от pH. Показано, что в кислой и щелочной средах наблюдается восстановление нанолистов, связанное с восстановлением углеродного скелета и элиминированием функциональных групп с поверхности. С использованием метода ИК-спектроскопии и прямого взвешивания были исследованы сорбционные свойства полученных мембран. Показано, что механизм транспорта меняется по мере адсорбции пенетранта и увеличения межплоскостного расстояния. Показано, что в режиме капиллярной конденсации идеальная селективность разделения в паре H_2O/N_2 составила > 10^5. Показано, что производительность процесса первапорационного концентрирования может изменяться в пределах ±20% в кислой или щелочной средах. Полученные результаты свидетельствуют о возможности направленной модификации химического состава и транспортных характеристик мембран на основе оксида графена в зависимости от pH разделяемой среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №23-13-00195-П

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ МЕМБРАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ ТИТАНА

Теплова А.А., Беломестных И.А., Лесных А.А., Елисеев А.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия, teplovaaa@my.msu.ru

Технологии мембранного разделения находят широкое применение при решении задач в науке и технике. В настоящее время особое внимание уделяется мембранам на основе 2D-материалов, образующих упорядоченные межслоевые наноканалы и, как следствие, демонстрирующих высокую селективность. В то время как мембраны на основе MXene активно исследуются, свойства двумерных нанолистов TiO_2 в области мембранных технологий практически не изучены. В связи с этим, целью работы стало исследование транспортных характеристик композиционных мембран на основе нанолистов слоистых соединений титана.

В работе использованы суспензии нанолистов TiO_2 и MXene. Исследованы транспортные свойства полученных мембран. Эксперименты проводились для неконденсируемых газов и для паров воды. Получены газоплотные мембраны и выявлена реализация кнудсеновского механизма диффузии для неконденсируемых газов (рисунок 1а) и механизма капиллярной конденсации при транспорте паров воды.

Методом малоугловой рентгеновской дифракции in situ в условиях контролируемой влажности было выявлено изменение межплоскостного расстояния для слоев TiO_2 за счет интеркаляции воды в структуру мембраны от 9,5 до 11,8 Å при росте влажности (рисунок 1б). Проведены полуэмпирические квантово-химические расчеты в программном пакете MOPAC2016 в системе TiO_2-H_2O. Расчеты показали, что сорбция молекул воды приводит к увеличению межплоскостного расстояния (рисунок 1в).

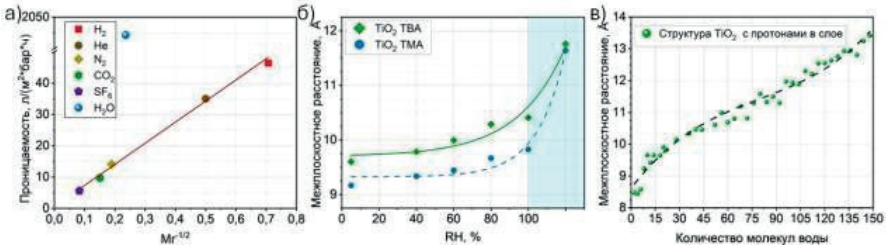


Рисунок 1. Зависимость проницаемости композиционных мембран на основе TiO_2 от обратного корня из молекулярной массы (а), зависимости межслоевого расстояния от относительной влажности пермеата (б), зависимость межплоскостного расстояния от количества введенных молекул воды (в)

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №23-13-00195-П

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ 1-(КАРБОКСИМЕТИЛ)-1′-(1-ГИДРОКСИЭТИЛ) ФЕРРОЦЕНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Логинов Е.Д., [1, 2] ***Муратов Д.Г.,*** [1, 3] ***Телегина Л.Н.,*** [2] ***Сименел А.А.*** [1, 2]

[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва [2]ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва [3]ФГБУН Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

E-mail: loginov.ed@misis.ru

Производные ферроцена представляют значительный интерес благодаря сочетанию электрохимических, каталитических и биологических свойств [1-2]. Введение в молекулу ферроцена различных функциональных групп открывает возможности для направленного синтеза новых производных, обладающими заданными свойствами.

В настоящей работе был произведен синтез 1-(карбоксиметил)-1′-(1-гидроксиэтил) ферроцена (**1**) и установлена его молекулярная структура методом РСА. Соединение было получено селективным восстановлением 1-карбоксиметил-1′-ацетил-ферроцена алюмогидридом лития, и было охарактеризовано методами H^1 и C^{13} ЯМР-спектроскопии, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии и данными элементного анализа.

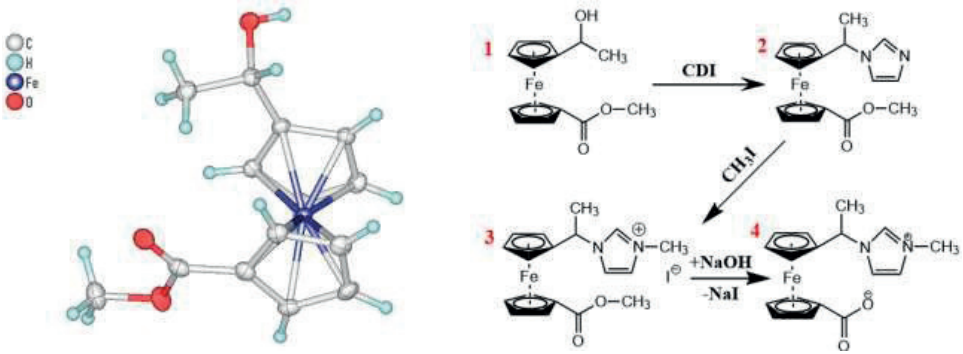


*Рисунок 1. Строение 1-(карбоксиметил)-1′-(1-гидроксиэтил) ферроцена (**1**) и синтезы на его основе*

На основе соединения (**1**) были получены производные (**2-4**) с высокими выходами. Электрохимическими, спектральными и *in silico* методами исследовано взаимодействие полученных соединений (**1-4**) с олигонуклеотидами.

Список используемой литературы

1. Rauf U., Shabir G., Molecules, 2023, 28(15), 5765, https://doi.org/10.3390/molecules28155765
2. Park S. E., Park S., Synthesis 2025; 57(16): 2411, https://doi.org/10.1055/s-0043-1775484

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИЦИОННЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОЛЫХ ПОЛИПРОПИЛЕНОВЫХ ВОЛОКОН

Соловьева Н.А., Беломестных И.А., Елисеев А.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, solovevana_01@my.msu.ru

В последние годы технологии мембранного разделения получили широкое распространение в различных областях науки и техники. Отдельного внимания заслуживают мембраны на основе слоистых селективных слоев. Преимуществом таких мембран является возможность формировать малодефектные слои на различных подложках, включая полые волокна. Волоконные мембраны представляют интерес за счет высокой удельной площади поверхности (~10000 $м^2\м^3$) в сравнении с плоскими мембранами (~100 $м^2\м^3$). Селективный слой на таких модулях позволяет повысить степень отсечения загрязнителей с сохранением высокой проницаемости по воде. Таким образом, целью данной работы стала разработка способов формирования мембранных элементов на основе полых волокон с селективным слоем оксида графена и исследование их транспортных свойств.

Суспензии ОГ получены модифицированным методом Хаммерса. Морфология нанолистов исследована с помощью РЭМ (Рисунок 1а). После формирования селективного слоя на поверхности полых волокон проведено исследование газопроницаемости по неконденсируемым газам, на рисунке 1б показано изменение проницаемости от 130 до 3 $м^3 \cdot м^{-2} \cdot бар^{-1} \cdot ч^{-1}$ по азоту после формирования селективного слоя. С целью определения эффективности переноса воды было проведено исследование первапорационного транспорта (Рисунок 1в). Для оценки эффективности превапорационного разделения проведен эксперимент по концентрированию модельного белка (БСА). Значение проницаемости осталось практически без изменений.

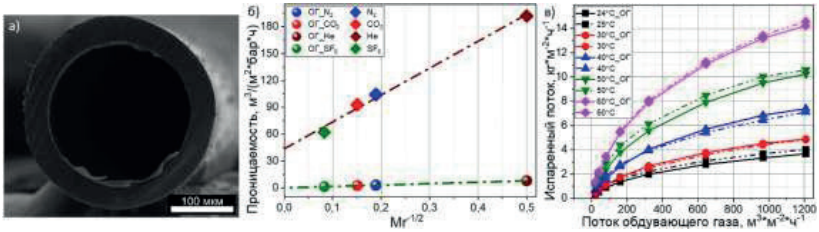


Рисунок 1. РЭМ изображение среза мембранного волокна с селективным слоем ОГ (а), зависимость проницаемости по неконденсируемым газам от обратного корня из молекулярной массы газа (б), интенсивность первапорационного транспорта при заданных температурах и обдувающих потоках (в).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-13-00195-П

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ СОКРИСТАЛЛОВ ЭНЕРГОЕМКИХ И ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ СУБЛИМАЦИИ

***Дмитриев М.В.*[1,2], *Зубачева Е.К.*[2]**

[1]Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия, DmitrievMV11@mail.ru
[2]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, лаборатория энергетических материалов, Москва, Россия

Современные работы в области энергетических и фармацевтических материалов направлены на модификацию существующих веществ с целью улучшения их характеристик. Одним из подходов, позволяющим создавать материалы с контролируемыми функциональными свойствами, является сокристаллизация. Среди способов синтеза сокристаллов можно выделить сублимационные методы, позволяющие получать кристаллы достаточного размера и чистоты для лабораторных исследований без использования растворителей и механического воздействия. Таким образом, наша задача — получение сокристаллов на основе энергоемких и фармацевтических органических соединений при помощи сублимации.

Мы исследовали продукты ресублимации расплава смесей тринитротолуола (TNT) и парааминобензойной кислоты (PABA). Исследования полученных продуктов методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и рентгенофазового анализа (РФА) подтвердили образование сокристалла TNT и PABA с мольным соотношением 1:1. Также был выявлен второй продукт ресублимации (**1**), обладающий температурой плавления ~ 100°C. Анализ результатов РФА показал, что элементарная ячейка кристаллического соединения **1** может быть описана двумя наборами параметров, ни один из которых не совпадает с известными сокристаллами TNT/PABA. Для установления природы **1** начата работа по построению фазовой диаграммы. Кроме того, были получены и исследованы продукты ресублимации смеси TNT и антраниловой кислоты (AA) — сокристаллы с соотношением исходных веществ 1:1 и 2:1 (подтверждено с помощью ДСК). В ходе оптимизации метода в экспериментальную установку была добавлена вторая зона нагрева, что позволило добиться более качественного разделения продуктов сублимации, значительного увеличения размера частиц и повышения выхода сокристаллов с 34 до 56%.

В продолжение работы планируется использование второй зоны нагрева для уравнивания скоростей сублимации веществ с различной летучестью, а также получение сокристаллов на основе перспективных энергетических и фармацевтических материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-00136, https://rscf.ru/project/25-73-00136/.

СТАБИЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ ПОЛИВИНИЛОВЫМ СПИРТОМ В РАМКАХ СИНТЕЗА МЕТОДОМ СООСАЖДЕНИЯ

Ануфриева Г.Б.,[1] Корсакова А.В.,[1] Терешко А.Е.[1]

[1]Ярославский государственный технический университет, Ярославль, anufrievagb@ystu.ru

Магнитные частицы на основе оксидов железа (магнетит и маггемит) перспективны как функциональные пигменты для ЛКМ, но их применение ограничено из-за склонности к агрегации и окислению [1]. Для стабильности частицы модифицируют полимерами — в частности поливиниловый спирт (ПВС), который образует водородные связи с поверхностью и создает стерический барьер [2-3].

Сравнивали одностадийный синтез (введение ПВС до осаждения) и постстабилизацию (адсорбция на готовых частицах). ИК-спектроскопия подтвердила адсорбцию ПВС и сохранение кристаллической структуры ядра; при этом постстабилизация обеспечивает более эффективную адсорбцию полимера [4].

ПВС снижает размер частиц, но не дает высокой седиментационной устойчивости. Постстабилизация предпочтительнее: она повышает намагниченность, хотя и сопровождается ростом водорастворимых солей и снижением плотности. Микроскопия показывает, что агломерация сохраняется.

Таким образом, ПВС формирует защитный слой на поверхности частиц с умеренной эффективностью стабилизации. Постстабилизация предпочтительнее — она лучше сохраняет магнитные свойства и повышает адсорбцию полимера, однако не предотвращает значительную агломерацию.

Список используемой литературы

1. Абилкосимова Г.М., Аронбаев Д.М., Аронбаев С.Д. Магнитные наночастицы: получение, стабилизация, применение // Universum: химия и биология. 2024. № 4(118).
2. Егунова О.Р., Константинова Т.А., Штыков С.Н. Магнитные наночастицы магнетита в разделении и концентрировании // Известия Саратовского университета. Серия Химия. Биология. Экология. 2014. Т. 14, вып. 4. С. 27–35.
3. Darwish M.S.A., Al-Harbi L.M., Bakry A. Synthesis of magnetite nanoparticles coated with polyvinyl alcohol for hyperthermia application // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2022. Vol. 147, No. 21. P. 11921–11930.
4. Riva'i I., Wulandari I.O., Sulistyarti H., Sabarudin A. Ex-Situ Synthesis of Polyvinyl alcohol(PVA)-coated Fe_3O_4 Nanoparticles by Coprecipitation-Ultrasonication Method // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2017. Vol. 299. 012065.

НЕГАТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ АМИННОГО КАТАЛИЗА ПРИ СИНТЕЗЕ ЭПОКСИАКРИЛАТНЫХ СМОЛ

***Амбарцумян А.Д.,* Махин М.Н.**

ИНХС РАН, г. Москва, meshkova@ips.ac.ru

До широкого распространения аддитивных технологий с высокими требованиями к качеству применяемых смол одними из наиболее эффективных катализаторов для синтеза эпоксиакрилатов считались амины, в частности триэтиламин (ТЭА). При взаимодействии диглицидилового эфира бисфенола А (ДГЭБА) с акриловой кислотой (АК) в присутствии ТЭА ИК-Фурье спектр полученной эпоксиакрилатной смолы (рисунок 1) имеет полосу поглощения в области 2360 $см^{-1}$. При этом для спектра образца, полученного без применения катализатора, этого не наблюдается. Данное различие обусловлено образованием аддукта посредством водородных связей между атомом азота амина, содержащего неподеленную электронную пару, и водородом гидроксильной группы эпоксиакрилатной смолы.

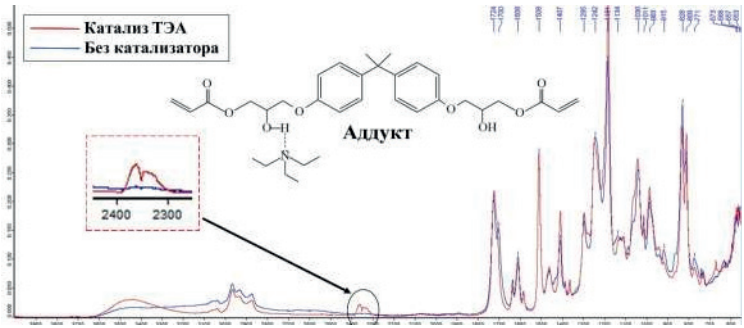


Рисунок 1. ИК-Фурье спектр образца эпоксиакрилата (условия: ДГЭБА/АК = 1/2 моль/моль, 100°С, 4 ч, 1 мас.% ТЭА)

Наличие встроенного в структуру олигомера ТЭА оказывает негативное влияние на стабильность при хранении и качество конечного материала, вызывая изменение его цветности (пожелтение) и повышая влагопоглощение. Указанные эффекты ограничивают применение синтезированных таким образом эпоксиакрилатов в оптике, микроэлектронике, аэрокосмической промышленности и других стратегических отраслях. Одним из главных критериев при разработке новой высокоэффективной технологии синтеза эпоксиакрилатных смол является возможность выделения и многократного использования катализатора из конечного продукта.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН.

ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И СВОЙСТВ БИОАКТИВНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА ДЛЯ IN SITU ПЕЧАТИ

Ан Д.А. **, *Богданова Д.Н., Львов В.А., Захарова В.А., Айдемир Т.***

Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Институт биомедицинской инженерии, Москва, an619511@gmail.com

Экструзионные методы *in situ* печати могут обеспечить доставку биоактивных компонентов в область открытого ранения с использованием полимер-матричных систем-носителей на основе биосовместимых полимеров. Несмотря на то, что тип биоактивного компонента определяется характером тканевого дефекта, матричный полимерный носитель может быть универсальным, именно поэтому подбор полимерной системы доставки и ее адаптация для направленной экструзии является актуальной задачей.

Целью данной работы является расширение ассортимента используемых материалов для технологии *in situ* печати, за счет разработки биополимерных гидрогелевых чернил, на основе сшитого альгината, содержащих лизоцим и лактоферрин в качестве биоактивных добавок, разрушающих клеточные стенки бактерий.

В качестве исследуемых систем были выбраны концентрированные растворы, а также лекарственно-наполненные сшитые гидрогели альгината натрия (ANa) (M_w 1500 кДа). Были изучены свойства исходных растворов ANa, а также процессы их гелеобразования в присутствии дигидразида адипинивой кислоты (ADH). Подобрано оптимальное мольное соотношение сшивающего агента к звену ANa. Уточнен механизм взаимодействия, ответственный за формирование устойчивой сетки зацепления системы. На основе полученных данных были установлены оптимальные рабочие концентрации, обеспечивающие получение гидрогелевых чернил с необходимыми параметрами, обеспечивающими равномерную экструзию чернил *in situ,* а также установлено оптимальное содержание лизоцима (0,1 масс. %) и лактоферрина (0,15 масс. %), обеспечивающее высокую антибактериальную активность, как в отношении *Gram+*, так и *Gram-* бактерий.

Полученные гидрогелевые чернила на основе структурированного альгината натрия, нагруженного биоактивными компонентами, перспективны для экструзии *in situ* в область воспаленного и открытого ранения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 25-23-20121.

ОЦЕНКА ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ МЕТАЛЛОВ ИЗ ПЛЕНОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ Ti/TiO_2-SiO_2-$ZnFe_2O_4$ ПОСЛЕ ФОТОДЕГРАДАЦИИ ИНДИГОКАРМИНА

***Балацкий Д.В.*[1], Будникова Ю.Б.[2], Арефьева О.Д.[1,2], Пономарева М.С.[1,2]**

Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток,
denis.balatskiy@bk.ru
Институт химии ДВО РАН, г. Владивосток

Качество питьевой воды является актуальной проблемой во многих странах мира, включая развитые страны с высокотехнологичными системами очистки, поскольку промышленный рост неизбежно сопровождается накоплением загрязняющих веществ в водных источниках. Для снижения уровня загрязнения водных объектов органическими загрязнителями в последнее время широко исследуются возможности гетерогенного фотокатализа с использованием различных полупроводниковых соединений. Однако в этом случае возникает большая вероятность вторичного загрязнения водных объектов различными металлами в результате фотокоррозии. Качество питьевой воды регулируется Санитарными правилами и нормами Российской Федерации (СанПиН 1.2.3685-21). Также Агентство по охране окружающей среды США устанавливает максимально допустимый уровень содержания железа и цинка в питьевой воде. Поэтому оценка стабильности действия фотокатализаторов путем оценки выщелачивания входящих в их состав металлов, является важной задачей.

В данной работе комбинированием метода ПЭО и золь-гель технологии были получены фотокаталитические пленочные композиты Ti/TiO_2-SiO_2-$ZnFe_2O_4$ для разложения индигокармина (ИК) и была оценена степень выщелачивания железа и цинка в обрабатываемый раствор. Было обнаружено, что степень деградации ИК (10 мг/л, pH 2.9) под воздействием УФ света составляет 77 % соответственно, тогда как при облучении видимым светом — 13 %. После эксперимента по фотодеградации ИК была оценена степень выщелачивания железа и цинка в обработанный раствор. Концентрация железа и цинка в растворе составила 0,11 и 1,00 мг/л соответственно. Согласно стандартам, допустимый уровень железа и цинка в воде составляет не более 0,3 и 5,0 мг/л соответственно. Таким образом, полученный пленочный композит Ti/TiO_2-SiO_2-$ZnFe_2O_4$ является экологически безопасным и может быть рекомендован для использования в процессах водоочистки без риска вторичного загрязнения тяжелыми металлами.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХ ДВО РАН № FWFN 2025-0001.

РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ РЕСУРСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕПЛОВЫДЕЛЯЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ КОНТУРОВ С СКД ТЕПЛОНОСИТЕЛЕМ

Букулова Л.М.

Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова, Владикавказ, bukulova.linda@mail.ru

В работе представлен обзор современных исследований, посвященных особенностям водо-водяных ядерных реакторов. Одним из ключевых направлений развития мировой атомной энергетики является концепция ядерных реакторов, охлаждаемых водой сверхкритических параметров (ВВЭР СКД). Актуальность исследований подтверждается глобальным научным интересом во всем мире. Водо-водяные реакторы под давлением признаны одними из самых эффективных среди водо-водяных реакторов в настоящее время. Их значимость для науки доказана тем фактом, что на основании опыта эксплуатации раскрыты сильные и слабые стороны технических, конструктивных и технологических решений [1]. Целесообразность развития комплементарных методов контроля ядерных материалов и процессов в активной зоне ядерного реактора широко обсуждается уже более 50 лет. С экономической точки зрения более предпочтительны детекторы на основе жидкого органического сцинтиллятора, которые легко масштабируются и являются более дешевыми. Среди самых распространенных типов коммерческих реакторов в мире выделяется ядерный реактор с водой под давлением. Топливные сборки для реакторов такого типа содержат, как правило, до 5% ^{235}U (см. рисунок 1) [2].



Рис. 1. Изотопный состав уранового топлива для коммерческих реакторов типа ВВЭР

Таким образом, перспективность ВВЭР СКД определяется возможностью совершенствования материалов активной зоны и детектирующих систем с учетом их структуры, эксплуатационных свойств и радиационной стойкости.

Список используемой литературы

1. Семченков Ю.М., Сидоренко В.А. Перспективы развития АЭС с ВВЭР // Теплоэнергетика. 2011. №5. С. 2–9.
2. Абрамов А.В., Алыев Р.Р., и др. Измерение энерговыработки реактора ВВЭР-1000 по потоку антинейтрино из активной зоны // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2025. №2. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/izmerenie-energovyrabotki-reaktora-vver-1000-po-potoku-antineytrino-iz-aktivnoy-zony (дата обращения: 31.08.2026).

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПАВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ ФОСФАТА ЦИНКА

Варгасова С.В., Саражинский Д.С., Терешко А.Е.

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, vargasovasv@ystu.ru

Для получения водных пигментных паст с целью повышения эффективности диспергирования пигментов применяются поверхностно-активные вещества (ПАВ). Чтобы установить, какие типы ПАВ наиболее эффективны для диспергирования и стабилизации фосфата цинка, нами проведены исследования адсорбционной способности фосфата цинка по отношению к ПАВам различного типа методом потенциометрического титрования. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Адсорбция ПАВ в мг/г на поверхности частиц фосфата цинка

ПАВ	Концентрация раствора ПАВ, %			
	0,5	1,0	1,5	2,0
ТПФNa	3,6	3,5	5,4	3,8
Сульфонол	4,8	3,7	5,3	3,7
ОП-7	63,2	83,9	74,6	88,5
TAMOL-681	22,4	47,2	26,7	65,7
OROTAN-731 A	23,1	25,6	49,3	27,1

Отмечена высокая адсорбционная способность частиц фосфата цинка к ОП-7, где наибольшее значение адсорбции составляет 88,5 мг/г. При этом максимальное значение адсорбции достигается при более низких концентрациях водных растворов ПАВ. ОП-7 по своей природе является продуктом обработки смеси моно- и диалкилфенолов окисью этилена, что показывает его большую адсорбционную способность с основными центрами, находящимися на поверхности частиц фосфата цинка.

Из таблицы 1 видна схожесть в значениях адсорбции TAMOL-681 и OROTAN-731 A на поверхности частиц фосфата цинка. Хорошая адсорбционная способность может быть связана с высоким сродством активных центров поверхности фосфата цинка и поверхностно-активными анионами, которые образуются в водном растворе при диссоциации данных ПАВ. [1]

Адсорбционная способность фосфата цинка по отношению к ТПФNa и сульфонолу оказалась самой низкой, что свидетельствует о слабом термодинамическом сродстве этих ПАВ к поверхности частиц фосфата цинка.

Список используемой литературы

1. К. Холмберг, Б. Йенссон, Б. Кронберг, Б. Линдман. *Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах*. БИНОМ. Лаборатория знаний: Москва. 2007. 528.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ЛЕГИРОВАННОГО ЛАНТАНОИДАМИ ШЕЕЛИТА В РЕЗУЛЬТАТЕ АКУСТОФЛЮИДНОГО СИНТЕЗА

***Гапич В.Ю.*[1], Деккер П.И.[1], Кузнецова П.Д.[1], Муханова Е.А.[1]**

[1] Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов ЮФУ, г. Ростов-на-Дону, gapich@sfedu.ru

Микрофлюидный синтез дает особый контроль над реакциями в микрообъемах жидкостей и газов и способствует узкому распределению частиц по размерам.

Вольфрамат кальция, легированный лантаноидами, обладает рентгенолюминесцентными свойствами, поэтому его широко используют в тераностике.

Данные рентгенограмм (рис. 1) были получены в диапазоне 10°-60° (2θ) с шагом в 0,01°. Согласно полученным данным, образцы $CaWO_4$:Ln, полученные микрофлюидным методом в комбинации с ультразвуком, являются однофазными. Пики соответствуют карточке PDF-2 под номером 00-077–2236, тетрагональной структуры шеелита (пространственная группа $I4_1/a$).

Методом рентгенофлуоресцентного элементного анализа (рис. 1) было определено атомное процентное содержание элементов на основе принятия содержания вольфрама за единицу. Количественные значения содержания кальция и лантаноидов были пересчитаны относительно вольфрама. При этом индекс кислорода был установлен по принципу электронейтральности.

При теоретических 0,05 ат. % лантаноида, в ходе акустофлюидного синтеза, замещение кальция некоторыми ионами оказалось 0,06% (Nd^{3+}, Gd^{3+}) и 0,07% (Ce^{3+}, Pr^{3+}, Eu^{3+}, Tb^{3+}, Yb^{3+}), что может быть связано с более высоким зарядом иона и его приоритетным встраиванием в ламинарном течении.

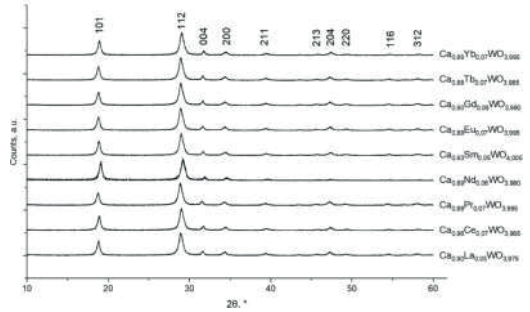


Рисунок 1. Рентгенограммы и результаты элементного анализа образцов $CaWO_4$:Ln, где Ln = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Yb

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (программа Приоритет 2030 ЮФУ).

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛОВ КАК СОРБЕНТОВ НЕФТИ И НЕФТЕПРОДУКТОВ

Герцен М.М.

ФГБОУ ВО Тульский государственный педагогический университет имени Л. Н. Толстого, Тула, mani.gertsen@gmail.com

Эффективное устранение последствий разливов нефти и нефтепродуктов требует разработки высокоселективных сорбционных материалов с регулируемыми поверхностными свойствами. Глинистые минералы, в частности бентонит, являются перспективными объектами для создания функциональных сорбентов при условии их направленной химической модификации [1]. В данной работе выбраны катионный (хлорид тетрадецилтриметиламмония) и анионный (сунатал) ПАВы для получения органоглин на основе бентонита и исследования их физико-химических свойств.

Данными ИК-Фурье спектроскопии подтверждена успешная модификация поверхности исходного минерала. Для органоглины на основе анионного ПАВ характерно появление интенсивных полос валентных колебаний С-Н (2940-2930 $см^{-1}$) и сульфокислотных групп (1046 $см^{-1}$), для органоглины на основе катионного ПАВ зафиксированы колебания CH_2-групп (713 $см^{-1}$). Анализ распределения частиц показал, что модификация приводит к увеличению объемно-среднего диаметра (D[4,3]) и росту неоднородности дисперсии. Наиболее выраженное формирование крупных агрегатов наблюдается в случае катионного ПАВ, что обусловлено электростатическими взаимодействиями между молекулами ПАВ и поверхностью глины. Изменение дзета-потенциала анализируемых коллоидов подтвердило глубокую трансформацию поверхностного заряда: модификация катионным ПАВ обеспечивает резкий переход к положительным значениям (δ 72,2 ± 1 мВ), что обуславливает высокую органофильность материала. Анионная модификация, напротив, приводит к существенному усилению отрицательного заряда (δ — 122,8 ± 3), сохраняя гидрофильные свойства за счет электростатического отталкивания [2].

Список используемой литературы

1. Alexander J.A., Ahmad Zaini M.A. et al. Surface modification of low-cost bentonite adsorbents–a review // *Particulate Science and Technology*, 2019, V. 37(5). P. 538–549.
2. Au P.I., Leong Y.K. Rheological and zeta potential behaviour of kaolin and bentonite composite slurries // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2013, V. 436. P. 530–541.

ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫЕ ОКСИДЫ КАК ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ НАКОПИТЕЛИ ЭНЕРГИИ: ОТ КОНЦЕПЦИИ К СРАВНИТЕЛЬНОМУ АНАЛИЗУ 2D И 3D ФАЗ

***Гробовой И.С.*, Сунцов А.Ю., Кожевников В.Л.**

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, i.grobovoy@mail.com

Развитие солнечной энергетики ограничивается суточной неравномерностью поступления солнечного излучения, что требует разработки эффективных систем аккумулирования. В этом отношении перспективно термохимическое хранение энергии (ТХХЭ) на основе обратимых редокс-реакций с соединениями, нестехиометричными по кислороду. При нагреве в восстановительной среде такие материалы теряют кислород и поглощают энергию, а при окислении на воздухе выделяют ее. Ключевые параметры для подобных накопителей — кислородная емкость и энтальпия окисления-восстановления. Среди оксидных материалов для ТХХЭ активно исследуются перовскитоподобные оксиды.

В настоящей работе сопоставлены две оксидные системы. В системе Ca-Sr-Mn-O сравнивались свойства слоевой —2D фазы $SrCa_3Mn_3O_{10-\delta}$ и —3D перовскита $Ca_{0.75}Sr_{0.25}MnO_{3-\delta}$. Показано, что 2D-оксид устойчив при длительном циклировании, тогда как 3D-оксид деградирует из-за сегрегации катионов поверхности, хотя и обладает большей теоретической энергоемкостью [1]. В системе Sr-Mn-Fe-O, напротив, кубический перовскит $SrMn_{0.5}Fe_{0.5}O_{3-\delta}$ оказался более стабилен в сравнении со слоевым $Sr_4Mn_{1.5}Fe_{1.5}O_{10-\delta}$, который, предположительно, претерпевает объемное разупорядочение. При этом соотношение Fe:Mn = 1:1 обеспечивает максимальный тепловой эффект при циклировании [2]. Теоретические расчеты подтверждают энергетическую неэквивалентность кислородных позиций в фазах Раддлсдена-Поппера [1-2], что обуславливает их различное участие в редокс-процессах. Таким образом, кристаллическая структура и катионный состав в равной степени определяют пригодность оксидов для ТХХЭ. Дальнейшие исследования должны быть направлены на оптимизацию кинетики кислородного обмена и повышение устойчивости материалов.

Работа выполнена в рамках реализации государственных заданий для ИХТТ УрО РАН № 124020600008-5 и 124020600004-7.

Список используемой литературы

1. Antipinskaya, E.A., et al. Reassessment of thermochemical energy storage in perovskite-like manganites at comparative studies of RP $SrCa_3Mn_3O_{10-\delta}$ vs. orthorhombic $Sr_{0.25}Ca_{0.75}MnO_{3-\delta}$ // Journal of Energy Storage. 2022. №. 53. С. 105175.
2. Grobovoy, I.S., et al. The structural and compositional trade-off in Sr-Mn-Fe oxides: 2D Ruddlesden-Popper vs. 3D perovskites for thermochemical energy storage // Journal of Energy Storage. 2026. №. 179. С. 123363.

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ ТЕТРАЗОЛЬНОГО РЯДА

***Гудкин А.В.*[1], Крыгина Д.М.[2], Гостева А.А.[2], Окатова О.В.[2], Сивцов Е.В.[1]**

[1] Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), г. Санкт-Петербург, gudkinartur@gmail.com

[2] Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург

Тетразольные производные обладают широким спектром практического применения в медицине, являясь фармакофором при создании множества препаратов. Винильные производные легко полимеризуются по радикальному механизму, образуя многофункциональные высокомолекулярные соединения, однако их радикальная полимеризация без контроля молекулярно-массовых характеристик ограничивает практическое использование полимеров. Перспективным решением является применение RAFT полимеризации, отличающейся универсальностью и простотой реализации. Высокая липофильность и физиологическая активность тетразольного цикла наряду с возможностью полимераналогичных превращений по концевым фрагментам агента обратимой передачи цепи (ОПЦ) делают данные полимеры перспективными для применения в биомедицине.

В настоящей работе методом RAFT-полимеризации с использованием 2-(((додецилтио)карбонотиоил)тио)-2-метилпропановой кислоты (ДМП) синтезированы узкодисперсные (Đ≤1.3) и композиционно однородные полимеры 2-метил-5-винилтетразола и NH-незамещенного 5-винилтетразола с молекулярными массами от 10^4 до $1.5 \cdot 10^5$. Контролируемый характер процесса подтвержден наличием групп ОПЦ-агента в структуре выделенных полимеров, а также успешными экспериментами по наращиванию цепи с использованием полученных полимеров в качестве макро-ОПЦ-агентов.

В настоящее время синтезированные полимеры изучаются методами скоростной седиментации, поступательной диффузии и вискозиметрии с целью определения конформационных параметров макромолекул в растворе и расчета коэффициентов уравнения Марка-Куна-Хаувинка-Сакурада. Полученные данные позволят не только расширить фундаментальные представления о конформационном поведении гетероциклических полимеров, но и установить корреляции между структурой тетразолсодержащей макромолекулы и ее конформационными свойствами, что является важной базой для дальнейшего целенаправленного конструирования полимерных материалов на их основе.

Работа Крыгиной Д.М. из ПИЯФ-ИВС выполнена в рамках государственного задания (124013000730-3).

ВЛИЯНИЕ ЛАНТАНОИДОВ НА РЕНТГЕНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ АКУСТОФЛЮИДНО-ПОЛУЧЕННОГО ВОЛЬФРАМАТА КАЛЬЦИЯ

Деккер П.И., Гапич В.Ю., Кузнецова П.Д., Муханова Е.А.

МИИ ИМ, г. Ростов-на-Дону, ул. Сладкова, 178/24, pdekker@sfedu.ru

Вольфрамат кальция ($CaWO_4$) применим как люминофор для рентгеновской фотодинамической терапии рака. Для настройки его рентгенолюминесцентных свойств матрицу допируют ионами лантаноидов. Серия $Ca_{0.925}Ln_{0.05}WO_4$ синтезирована в акустофлюидных условиях — интеграция ультразвука в микрофлюидику.

Графики рентген-возбужденной оптической люминесценции (XEOL) показали, что замещение кальция лантаноидами уширяет эмиссионный пик матрицы. Наиболее интенсивные пики 4f-4f переходов зафиксированы в образце, легированном Eu^{3+}.

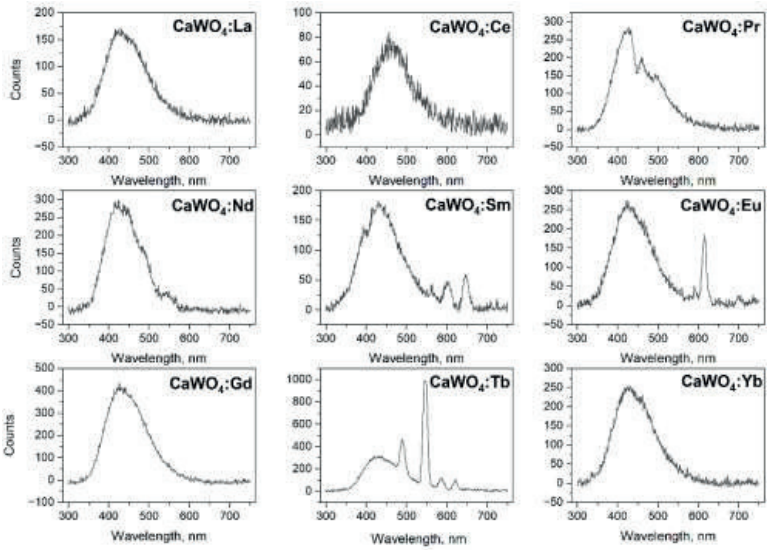


Рис.1. XEOL образцов $Ca_{0.925}Ln_{0.05}WO_4$

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (программа Приоритет 2030 ЮФУ).

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ И ТЕМПЛАТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦЕОЛИТА ZSM-5

***Исхаков А.Р.*[1], *Травкина О.С.*[1,2]**

[1] *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, iskhakov.01@internet.ru*
[2] *Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа*

Цеолит структурного типа MFI (ZSM-5) является важнейшим катализатором для нефтехимического синтеза и в процессах нефтепереработки, благодаря своей особой микропористой структуре, высокой кислотности и термической стабильности [1].

Стандартно источником кремния при гидротермальном синтезе цеолита является тетраэтоксисилан ТЭОС, гарантирующий высокую чистоту получаемого ZSM-5, однако его применение снижается, из-за стоимости и токсичности. Это приводит к поиску других источников кремния, которые влияют на термодинамику кристаллизации и ее кинетику. Также присутствуют диффузионные ограничения, связанные с размером пор, из-за чего снижается каталитическая эффективность цеолита [2]. Решением этой проблемы является синтез нанодисперсных цеолитов комбинирующих микро- и мезопоры, управление свойствами, которых возможно за счет варьирования источника кремния и темплата (структуронаправляющий агент), что и явилось целью настоящей работы.

Синтез проводили методом щелочной гидротермальной кристаллизации. В качестве темплатов использовались TBABr, HMDA и TPAOH, а источниками кремния выступали пирогенный диоксид кремния («белая сажа»), Лейксил-40 и кремнезоль. Установлено, что при использовании «белой сажи» образуются крупные кристаллы (1,5–2,5 мкм) с четко выраженными гранями, а Лейксил-40 и кремнезоль приводит к формированию мелких кристаллов размером 150–350 нм с развитой удельной поверхностью. Это обусловлено тем, что прекурсоры кремния имеют различную скорость растворения и число зародышей кристаллизации. При использовании TBABr и HMDA процесс кристаллизации занимает около 24 ч, а с TPAOH 8 ч; при этом в первом случае формируются структуры, образованные слиянием призм и пирамид, а во втором агломераты мелких кубических кристаллов.

Сделан вывод, что наиболее перспективными для создания высокоактивных катализаторов являются нанодисперсные образцы, синтезированные с применением TPAOH, обладающие максимальной удельной поверхностью.

Список используемой литературы

1. Corma A. From Microporous to Mesoporous Molecular Sieve Materials and Their Use in Catalysis // Chemical Reviews. — 1997. Vol. 97, P. 2373-2419.
2. Hartmann M., Machoke A.G., Schwieger W. Catalytic test reactions for the evaluation of hierarchical zeolites // Chemical Society Reviews. — 2016. Vol. 45, P. — 3313-3330.

РАЗРАБОТКА НАНОНОСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИСАХАРИДОВ ДЛЯ ДОСТАВКИ ГИДРОФОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Колесникова А.В.[1], Апрятина К.В.[1]

[1] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, e-mail: essence28@list.ru

Гидрофобные компоненты эфирных масел обладают доказанной антибактериальной активностью, но их применению в ЖКТ, системном кровотоке или легких мешают низкая растворимость в водных средах, быстрое выведение из организма и разрушение под действием ферментов в ЖКТ или печени. Решением могут стать системы доставки на основе биоразлагаемых полисахаридов — хитозана (ХТЗ) и натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы (Na-КМЦ), способных к самосборке в наноразмерные полиэлектролитные комплексы (ПЭК). Инкапсуляция эфирного масла в такие нанокомплексы позволяет защитить активное вещество от действия ферментов и обеспечить контролируемое высвобождение.

Цель работы: получение стабильных нанокомплексов Na-КМЦ/ХТЗ с узким распределением по размерам, изучение влияния молекулярной массы ХТЗ на их свойства, исследование коллоидной стабильности комплексов, оценка влияния ультразвуковой (УЗ) обработки на их устойчивость, а также определение эффективности инкапсуляции эфирного масла тимьяна.

ПЭК получали внесением Na-КМЦ в раствор $CaCl_2$, где ионы Ca^{2+} сшивали карбоксильные группы полимера, формируя отрицательно заряженное «ядро», затем добавляли ХТЗ, адсорбирующийся на поверхности ядра за счет своего положительного заряда с образованием «оболочки».

ХТЗ использовали с разной молекулярной массой (ММ): $2 \cdot 10^5$ и $1.3 \cdot 10^5$. Установлено, что оптимальным составом, стабильным до и после УЗ-обработки, является массовое соотношение Na-КМЦ/ХТЗ = 1:0.35. Для образцов с ММ ХТЗ = $2 \cdot 10^5$ размер частиц составил ≈ 314 нм, дзета-потенциал –21 мВ. Для образцов с ММ ХТЗ = $1.3 \cdot 10^5$ размер частиц составил 230 нм (дзета-потенциал не измеряли). Размер частиц и дзета-потенциал оценивали методом динамического светорассеяния (NanoBrook Omni, США). Эффективность инкапсуляции в ПЭК определяли спектрофотометрически (UV-1650 PC, Япония), она составила 79 %. Показана гигроскопичность лиофилизированных образцов при хранении в течение длительного времени.

МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИЙ РЫБНЫЙ ЖЕЛАТИН–АГАР: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИСАХАРИДА

Кузина Т.Д., Губский Д.М., Сидор Р.И., Воронько Н.Г.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Мурманский арктический университет», г. Мурманск, kuzinatd@mauniver.ru

Современная российская наука о полимерах сталкивается с растущим спросом на импортозамещение, а также использование соединений природного происхождения в связи с их повышенными биосовместимостью и биоактивностью. Однако различные видовой состав, условия обитания организмов — источников биополимеров, и особенности технологии их переработки влекут за собой и существенные расхождения в молекулярной структуре и свойствах получаемых веществ. Данная работа отслеживает взаимосвязь «состав → структура → свойство» для материалов на основе желатина и агара, принимая во внимание химические характеристики последнего. Использовали образцы агара производства Архангельского водорослевого комбината (Россия) и Sigma (Португалия), полученные из *Ahnfeltia plicata* и *Gracilaria spp*. соответственно. Образец рыбного желатина получен в МАУ по технологии [1].

Определены молекулярная масса (методом капиллярной вискозиметрии), содержание сульфатных групп и 3,6-ангидро-α-L-галактозы (методами турбидиметрии) в обоих видах агара; получены ИК-спектры образцов. Посредством реологических измерений установлено, что агаром российского производства формируются гели с пониженными по сравнению с агаром Sigma упруго-прочностными характеристиками, что объясняется его более высокой степенью сульфатирования. Обоснована возможность модификации российского образца агара желатином. Так, согласно данным спектроскопии нековалентные взаимодействия полимеров в водной фазе приводят к формированию ассоциатов [2], размер которых не зависит от степени сульфатирования агара. В то же время количество сульфогрупп в образце влияет на положение границы стехиометричности, структуру и pH-диапазон стабильности комплексов (вид фазовых диаграмм). Реологические характеристики концентрированных смесей желатина и агара российского производства в условиях комплексообразования превышают показатели для «чистых» желатина и обоих образцов полисахарида [3].

Список использованной литературы

1. Zuev Yu.F., Derkach S.R. et al. Underused marine resources: Sudden properties of cod skin gelatin gel // *Gels*, 2023, vol. 9. #990.
2. Воронько Н.Г., Кузина Т.Д. и др. Фазовое состояние водных смесей рыбный желатин–агар // *Коллоидный журнал*, 2025, т. 87, №5. С. 469–488.
3. Воронько Н.Г., Кузина Т.Д. и др. Коллоидно-химические свойства гидрогелей рыбный желатин–агар: влияние агара // *Коллоидный журнал*, 2026, т. 88, №3. С. 267–289.

ПРИМЕНЕНИЕ РЕГЕНЕРИРОВАННОГО БРОМИДА НАТРИЯ В СИНТЕЗЕ АЛКИЛБРОМИДОВ

***Кунда Дж.*[1], *Ахмадуллин Р.М.*[1],**
***Закиров Р.К.*[2], *Ахмадуллина Ф.Ю.*[2], *Литвинова И.Н.*[1]**

[1]ООО Научно-исследовательский центр «Ахмадуллины», Казань, Россия;
gksiwit@gmail.com
[2]Национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

Синтез алкилтиолов посредством реакции алкилбромидов с гидросульфидом натрия является фундаментальным процессом нуклеофильного замещения (S_N2), который приводит к образованию значительного количества побочного водного раствора бромида натрия [1], утилизация которого представляет собой как экологическую проблему, так и упущенную возможность для восстановления ресурсов.

В данной работе исследуется прямой синтез алкилбромидов (с использованием этилбромида (EtBr) в качестве примера) из регенерированного раствора NaBr и сравниваются его характеристики с коммерческим NaBr высокой чистоты. Полученный в результате синтеза тиола водный раствор NaBr анализировали и обрабатывали концентрированной серной кислотой и этанолом (в случае синтеза EtBr) для получения бромистоводородной кислоты *in situ*. Оптимальное мольное соотношение реакции составило NaBr(реген.водн.р-р):C_2H_5OH:H_2SO_4=1:1,2:4,5 с выходом EtBr до 96% и чистотой 99%, другие примеси составляли 1% от общего состава (Рисунок 1).

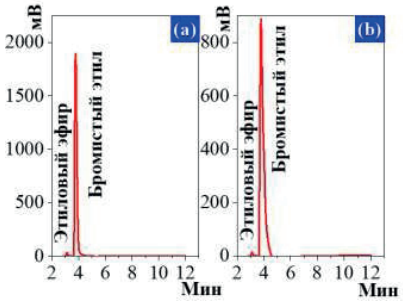


Рисунок 1. Газовые хроматограммы EtBr, синтезированного из чистого (a) и регенерированного NaBr (b).

Список используемой литературы

1. Kunda G., Akhmadullin R.M., Zakirov R.K., Akhmadullina F.Y., Gizyatullov R.N., Madaminov N.V., Musin L.I. Thiol synthesis methods: a review // Journal of Sulfur Chemistry. 2025. Vol. 46, № 3. P. 359–3 92.

БИОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ МЕТАНМОНООКСИГЕНАЗЫ ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО УЛАВЛИВАНИЯ МЕТАНА В ГАЗОВЫХ ПОТОКАХ

Курилов Д.А.

Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, kurildan@mail.ru

Переход морского флота на СПГ снижает выбросы SO_x и CO_2, но усугубляет проблему «проскока метана» (до 3–5%). Его потенциал глобального потепления в 80 раз выше CO_2, а традиционные каталитические системы дожигания требуют высоких температур (300–550 °C) и чувствительны к дезактивации [1].

Физико-химическое обоснование гибридного биокаталитического модуля для доочистки выхлопных газов с использованием иммобилизованной метанмонооксигеназы (ММО) или ее биомиметических аналогов. Методы. Междисциплинарное моделирование кинетики ферментативного окисления метана до метанола в диапазоне 40–70 °C. Рассчитано время контакта газовой смеси с пористым носителем для конверсии метана >70% с учетом ингибирования NO_x и гидродинамики потока.

Прямое применение метанотрофных бактерий в судовых условиях нецелесообразно из-за термической денатурации. Оптимальное решение — ковалентно иммобилизованная термостабильная ММО или биомиметические катализаторы (цеолиты типа Fe-BEA, функционализированные аэрогели), имитирующие биядерный активный центр фермента [2]. Предлагаемая система включает: 1) охлаждение выхлопа до 50–60 °C и мокрую очистку; 2) реактор с орошаемым биокаталитическим фильтром для селективного окисления; 3) конденсацию для рекуперации метанола. При удельной поверхности носителя 300–500 $м^2/г$ требуемое время контакта достигается в компактном объеме, сопоставимом со стандартными судовыми скрубберами [3].

Интеграция энзимологии и физической химии пористых сред позволяет преодолеть температурные ограничения классических методов, обеспечивая нейтрализацию парникового газа и рекуперацию метанола как вторичного энергоресурса.

Список используемой литературы

1. CIMAC Guideline: Methane and Formaldehyde Emissions of Gas Engines. CIMAC, 2021.
2. IMOKAT: Precious metal-free catalyst for methane oxidation. Fraunhofer UMSICHT. URL: https://www.umsicht.fraunhofer.de (дата обращения: 10.09.2026).
3. Wu Y.-M. et al. Elimination of methane in exhaust gas by immobilized methane-oxidizing bacteria // Bioresource Technology. 2017. Vol. 231. P. 124–128.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ УДАЛЕНИЯ ТИОСУЛЬФАТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Лай Х.Л.[1], Ахмадуллин Р.М.[2], Ахмадуллина Ф.Ю.[1], Закиров Р.К.[1], Хоанг Х.И. [3,4]

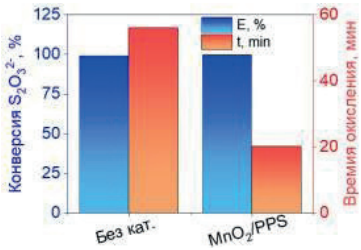
[1]Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия; e-mail: laihongdung1997@gmail.com;

[2]ООО Научно-исследовательский центр «Ахмадуллины», Казань, Россия;

[3]Центр передовой химии, Институт исследований и разработок, Университет Зуй Тан, Дананг, Вьетнам;

[4]Факультет естественных наук, Университет Дуй Тан, Дананг, Вьетнам.

В условиях постоянно возрастающего объема сточных вод, содержащих тиосульфат с высокой концентрацией загрязняющих веществ, традиционные методы очистки уже не обеспечивают необходимой эффективности. В связи с этим в настоящем исследовании мы предлагаем метод каталитического окисления для очистки сточных вод, содержащих тиосульфат в высоких концентрациях. Гетерогенный катализатор был синтезирован путем иммобилизации оксида марганца (IV) (MnO_2) на термостойком полимерном носителе-полифениленсульфиде (PPS) [1]. Каталитическая активность материала MnO_2/PPS была оценена в титановом автоклаве в жестких условиях: [$S_2O_3^{2-}$] = 46,13 г/л; T = 150 °C; P_{O_2} = 3,5 МПа; ω = 1250 об/мин. Результаты исследования представлены на рисунке 1.



Результаты показали, что присутствие катализатора MnO_2/PPS значительно ускоряет процесс превращения тиосульфата, обеспечивая его полное удаление примерно за 20 минут. В то же время процесс окисления в отсутствие катализатора требует в 3 раза больше времени для достижения той же степени конверсии. В целом, предложенный катализатор обладает значительным потенциалом для применения в очистке сточных вод с высоким содержанием тиосульфата.

Список используемой литературы

1. H. D. Lai, R. M. Akhmadullin, F. Y. Akhmadullina, R. K. Zakirov, and H. Y. Hoang, — Metal oxide-incorporated polyphenylene sulfide for enhanced catalytic oxidation of sodium sulfide,- Journal of Sulfur Chemistry, pp. 1–16, Sep. 2025, doi: 10.1080/17415993.2025.2557952.

КОНТРОЛЬ ДЕГРАДАЦИИ МАГНИЕВОГО СПЛАВА МА8 В ХЛОРИДСОДЕРЖАЩЕЙ СРЕДЕ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ

Леонов А.А.**, Гнеденков А.С., Номеровский А.Д., Марченко В.С., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.

ФГБУН Институт химии ДВО РАН, г. Владивосток, 79147063823@yandex.ru

Магниевые сплавы перспективны для создания биорезорбируемых имплантатов благодаря биосовместимости, способности к деградации в организме и механическим свойствам, близким к костной ткани [1, 2]. Однако их применение ограничено низкой коррозионной стойкостью: интенсивная коррозия в физиологических средах может привести к потере механической целостности имплантата до завершения регенерации кости [1, 2].

Для замедления деградации применяют защитные покрытия и ингибиторы коррозии. Эффективным методом формирования покрытий является плазменное электролитическое оксидирование (ПЭО) [1]. Пористая структура ПЭО-слоев позволяет функционализировать их органическими ингибиторами, полимерами и биологически активными компонентами. Однако перед этим необходимо оценить ингибирующее действие веществ непосредственно на магниевом сплаве.

Были исследованы цистеин (ЦИС), пирокатехин (ПИК), основания Шиффа (ОШ), мочевая кислота (МК) и куркумин (КУРК). Локальные сканирующие электрохимические методы (SVET, SIET) показали, что наиболее выраженной ингибирующей активностью обладают МК, ПИК и ОШ. Наиболее эффективно локальную коррозию сплава МА8 в 0,9% растворе NaCl подавляло основание Шиффа: после 24 ч выдержки максимальная разность плотностей тока между анодными и катодными областями составила Δi_{max} = 14 мкА/см^2 против Δi_{max} = 45 мкА/см^2 для образца без ингибитора.

Результаты могут быть использованы при разработке многофункциональных ПЭО-покрытий для биорезорбируемых магниевых имплантационных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 24-73-10008). Исследование локальными электрохимическими методами проведено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FWFN–2025–0001, FWFN–2026–0002, FWFN–2024–0001).

Список использованной литературы

1. Gnedenkov, A. S. et al. Control of the Mg alloy biodegradation via PEO and polymer-containing coatings // Corrosion Science. — 2021. — Vol. 182. — P. 109254.
2. Gnedenkov, A. S. et al. Electrochemical behaviour of the MA8 Mg alloy in minimum essential medium // Corrosion Science. — 2020. — Vol. 168. — P. 108552.

ГИБРИДНЫЕ ПОКРЫТИЯ С 8-ОКСИХИНОЛИНОМ ДЛЯ АКТИВНОЙ АНТИКОРРОЗИОННОЙ ЗАЩИТЫ МАГНИЕВОГО СПЛАВА МА8

Марченко В.С.*, Гнеденков А.С., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.

ФГБУН Институт химии ДВО РАН, г. Владивосток, filonina.vs@gmail.com

Магний и его сплавы перспективны для биорезорбируемых имплантатов благодаря биосовместимости и модулю упругости, близкому к костной ткани, но высокая скорость коррозии в физиологических средах ограничивает их применение. Для решения этой проблемы на биорезорбируемом сплаве МА8 (Mg-Mn-Ce) методом плазменного электролитического оксидирования (ПЭО) в кальцийсодержащем электролите сформировано биоактивное керамикоподобное покрытие, модифицированное ингибитором коррозии 8-оксихинолином (8-ОХ) и поликапролактоном (ПКЛ) двумя способами: последовательной пропиткой 8-ОХ и ПКЛ либо одноступенчатой обработкой в растворе ПКЛ с 8-ОХ. Поры ПЭО-слоя пригодны для загрузки ингибитора и полимера: 8-ОХ обеспечивает самовосстановление через образование 8-оксихинолината магния при локальном росте pH, а поликапролактон заполняет поры, усиливая барьерные свойства и удерживая ингибитор [1, 2].

Наилучшие антикоррозионные свойства были установлены для сплава с гибридным покрытием, полученным одноступенчатой обработкой в растворе на основе дихлорметана, содержащем 6 масс. % ПКЛ и 15 г/л 8-ОХ. Данное покрытие продемонстрировало наименьшую плотность тока коррозии ($3{,}02 \cdot 10^{-7}$ А/см^2), а также наибольшее значение поляризационного сопротивления ($1{,}06 \cdot 10^5$ Ом·см^2, что в 35 раз выше, чем у ПЭО-слоя). Для данного образца было зафиксировано уменьшение скорости коррозии в 18 раз по сравнению с базовым ПЭО-слоем. Эффективность ингибирования коррозии составила 83,9 % после 22 ч выдержки в 3,5 % NaCl [2].

Разработанный метод формирования гибридных покрытий на основе ПЭО, 8-оксихинолина и поликапролактона позволяет эффективно контролировать скорость биодеградации магниевого сплава МА8. Предложенные покрытия обладают эффектом самовосстановления и высокой коррозионной стойкостью, что делает их перспективными для защиты биорезорбируемых магниевых имплантатов. Использование нетоксичных компонентов подтверждает безопасность предложенного подхода.

Формирование покрытий выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 24-73-10008). Изучение антикоррозионных свойств проведено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FWFN–2025–0001, FWFN–2026–0002, FWFN–2024–0001).

Список использованных источников

1. А. С. Гнеденков, С. Л. Синебрюхов, В. С. Филонина, В. И. Сергиенко, С. В. Гнеденков Физико-химические основы локальной гетерогенной коррозии магниевых и алюминиевых сплавов. — Москва : ТЕХНОСФЕРА, 2022. — 424 с.
2. А.С. Гнеденков, С.Л. Синебрюхов, В.С. Марченко, А.Д. Номеровский, Я.И. Кононенко, В.И. Сергиенко, С.В. Гнеденков Самозалечивающиеся покрытия для защиты функциональных материалов от коррозии: стратегии формирования, механизм действия. — Москва: ТЕХНОСФЕРА, 2025. — 358 с.

ИЗОТОПНО-МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ЛАЗЕРНО-ДИФРАКЦИОННЫЙ МЕТОД ОЦЕНКИ КИНЕТИКИ РАСТВОРЕНИЯ АКТИВНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ (АФС) И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Михальченко В.А.

ФГАОУ ВО «Российский Университет Дружбы Народов им. Патриса Лумумбы», Москва, slava.mihalch@gmail.com

Предлагаемый метод основан на регистрации кинетики растворения методом малоуглового лазерного светорассеяния (LALLS) в реальном времени с использованием двух типов воды: очищенной (референс, ~150 ppm D/H) и обедненной по дейтерию (≤1–5 ppm D/H). Последняя применяется для усиления растворения веществ БКС II и IV классов. На основании полученных данных строятся экспоненциальные кривые и рассчитываются константы скорости растворения (k). В качестве критериев качества используются абсолютное значение k в стандартной воде, соотношение kH/kD (кинетический изотопный эффект) как индикатор чистоты, полиморфизма и состояния поверхности частиц, а также линейность, диапазон измерений и сравнение профилей растворения с референсной серией на основе кинетических констант. Метод применим для входного контроля АФС, контроля технологических этапов (грануляция, смешивание), оценки фармацевтической эквивалентности и биовейверов, а также мониторинга стабильности. По сравнению с классическими тестами растворения он обладает повышенной чувствительностью к размеру и поверхности частиц, позволяет регулировать скорость растворения за счет изотопного состава растворителя, дает кинетические параметры вместо единичных значений процента растворенного вещества и открывает возможности для in vitro–in vivo корреляции. Валидация включает оценку повторяемости, промежуточной прецизионности, линейности, диапазона применения и сравнение с фармакопейными методами «Растворение» и «Растворимость».

Список используемой литературы

1. Uspenskaya E.V., Pleteneva T.V. и др. Evaluation of Poorly Soluble Drugs' Dissolution Rate by Laser Scattering in Different Water Isotopologues // Molecules, 2021, Vol. 26, № 3. P. 601.
2. Uspenskaya E.V., Kazymova I.V. и др. Determination of Active Pharmaceutical Substances Dissolution Rate by Laser Light Diffraction Method // Разработка и регистрация лекарственных средств, 2020, Т. 9, № 1. С. 75–81.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦЕОЛИТА Y

***Назаров А.Р.*[1], *Костылева С.А.*[1], *Травкина О.С.*[1], *Кутепов Б.И.*[1]**

[1] *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, simchanka@mail.ru*

Цеолит Y остается ключевым компонентом промышленных катализаторов крекинга, гидрокрекинга и гидроизомеризации *н*-парафинов [1]. Однако его микропористая структура ограничивает диффузию объемных молекул, что обусловливает актуальность синтеза наноразмерных кристаллов с иерархической пористостью. В связи с этим целью работы явилось изучение влияния природы кремнийсодержащего сырья на фазовый состав, кристалличность, морфологию и текстурные характеристики цеолита Y.

Синтез цеолита NaY осуществляли гидротермальным методом из реакционных смесей состава $(1.8\text{-}5.6)Na_2O{\cdot}Al_2O_3{\cdot}(6.5\text{-}8)SiO_2{\cdot}(120\text{-}650)H_2O$ при 98 °C в течение 2-48 ч. В качестве источников кремния использовали осажденный кремнегель, силиказоли «Лэйксил-40» и ООО «ИСХЗК», а также гели, полученные кислотным и щелочным гидролизом этилсиликата-40. Физико-химические свойства образцов исследовали методами РФА, СЭМ и низкотемпературной адсорбции-десорбции азота.

Результаты показали, что применение кремнегеля и силиказолей обеспечивает получение чистой фазы цеолита Y с мольным отношением SiO_2/Al_2O_3 = 4.8-5.6 и степенью кристалличности, близкой к 100 %. Кристаллы имеют октаэдрическую и кубооктаэдрическую форму размером 50-357 нм. Удельная поверхность по БЭТ составляет 799-880 $м^2/г$ при объеме микропор 0.30 $см^3/г$, причем наиболее развитая мезопористость (0.10 $см^3/г$) достигается при использовании силиказоля ООО «ИСХЗК». В отличие от этого применение этилсиликата-40 приводит к образованию смеси цеолитов Y, A и P либо аморфного продукта.

Выявленные различия обусловлены различной реакционной способностью и кинетикой растворения кремнийсодержащих источников в щелочной среде. Кремнезоли быстро высвобождают реакционноспособные формы кремния, способствуя интенсивной нуклеации и формированию мелких кристаллов, тогда как этилсиликат-40 гидролизуется неравномерно [2]. Таким образом, разработан способ синтеза нанодисперсного цеолита Y с высокой кристалличностью и микро-мезопористой структурой; наиболее перспективным сырьем является силиказоль ООО «ИСХЗК».

Список используемой литературы

1. Gackowski M., Datka J. // Molecules. 2020. Vol. 25. № 5. P. 1044.
2. Кубасов А.А. // Соросовский образовательный журнал. 1998. № 7. С. 70–76.

РАЗРАБОТКА И ОПТИМИЗАЦИЯ СПОСОБА ФОРМИРОВАНИЯ ГИБРИДНЫХ ПОКРЫТИЙ, СОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫЕ ДВОЙНЫЕ ГИДРОКСИДЫ, НА СПЛАВЕ МА8

Номеровский А.Д.**, Гнеденков А.С., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.

ФГБУН Институт химии ДВО РАН, г. Владивосток, nomerovskii.ad@outlook.com

Магниевые сплавы перспективны для биорезорбируемых имплантатов благодаря биосовместимости и механическим свойствам, близким к костной ткани [1]. Однако их высокая электрохимическая активность вызывает ускоренное разрушение. Для защиты применяют покрытия [2], в частности плазменное электролитическое оксидирование (ПЭО) для получения керамикоподобных слоев. Перспективны гибридные покрытия со слоистыми двойными гидроксидами (СДГ) на поверхности ПЭО, обеспечивающие активную защиту за счет ингибиторов коррозии.

В данной работе были получены СДГ-содержащие покрытия с бензотриазолом и олеатом натрия двумя способами: интеркаляция ингибитора после синтеза СДГ и добавление ингибитора в раствор во время синтеза СДГ. Синтез СДГ в присутствии ингибитора дает более высокие защитные характеристики. Для олеатсодержащего покрытия установлено, что введение ингибитора в процессе синтеза СДГ уменьшает размер кристаллитов слоистых двойных гидроксидов (с 4–5 мкм до 1–2 мкм), что улучшает герметизацию пористой структуры ПЭО-слоя и повышает защитные свойства ($|Z|_{f=0,1Гц}$ = 1,1 МОм·см^2, I_C = 0,2·10^{-7} А/см^2) по сравнению с двухстадийной обработкой ($|Z|_{f=0,1Гц}$ = 24 кОм·см^2, I_C = 2,6·10^{-7} А/см^2). Для бензотриазолсодержащего покрытия, сформированного при добавлении ингибитора в процессе синтеза СДГ, также зафиксированы высокие антикоррозионные характеристики ($|Z|_{f=0,1Гц}$ = 0,85 МОм·см^2, I_C = 1,4·10^{-9} А/см^2). Результаты подтверждают высокие защитные свойства гибридных СДГ-содержащих покрытий и перспективность выбранных способов обработки магниевых сплавов для создания биорезорбируемых имплантатов.

Формирование гибридных покрытий выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 24-73-10008). Изучение антикоррозионных свойств проведено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FWFN–2025–0001, FWFN–2026–0002, FWFN–2024–0001).

Список использованной литературы

1. Gnedenkov A.S. et al. Efficient and smart hybrid coatings for active corrosion protection of magnesium alloys // J. Magnes. Alloy. 2025. Vol. 13, № 9. P. 4475–4499.
2. Gnedenkov A.S. et al. Design of self-healing PEO-based protective layers containing in-situ grown LDH loaded with inhibitor on the MA8 magnesium alloy // J. Magnes. Alloy. 2023. Vol. 11, № 10. P. 3688–3709.

МНОГОСЛОЙНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ FE_xSI_{1-x}/AL_2O_3 ДЛЯ СПИНТРОНИКИ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

***Пешков Я.А.*[1], Барков К.А.[1], Гайворонская Е.И.[1], Ситников А.В.[2], Ивков С.А.[1]**

[1] *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2] *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

tangar77@mail.ru

Развитие спинтроники требует новых ферромагнитных материалов для эффективной генерации спин-поляризованного тока в устройствах следующего поколения [1]. Стандартный аморфный сплав CoFeB со спиновой поляризацией около 65% уже не обеспечивает необходимых характеристик туннельного магнетосопротивления. Полуметаллические сплавы Гейслера с теоретически предсказанной 100% поляризацией в реальных тонких пленках теряют преимущества из-за дефектов кристаллической структуры. Принципиально новый подход — это использование аморфных нестехиометрических бинарных сплавов Гейслера Fe_xSi_{1-x}, сохраняющих высокую спиновую поляризацию (до 70%) в неупорядоченном состоянии [2]. Их ключевые преимущества — это упрощение и удешевление синтеза и повышенная стойкость к окислению по сравнению с CoFeB. Это позволяет создавать многослойные наноструктуры «ферромагнитный слой Fe_xSi_{1-x} / диэлектрическая прослойка Al_2O_3» и напрямую измерять магниторезистивный отклик в конфигурации, близкой к реальным устройствам.

Многослойные наноструктуры Fe_xSi_{1-x}/Al_2O_3 были получены попеременным ионно-лучевым распылением составной мишени Fe-Si и мишени Al. Прослойки Al_2O_3 формировали реактивным распылением мишени Al в присутствии кислорода. Рентгеновская дифракция серии образцов показала аморфное состояние всех компонентов наноструктуры. Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии продемонстрировали, что в едином цикле напыления была сформирована серия образцов с x=0.5-0.75. Кривые рентгеновской рефлектометрии выявили образование периодической структуры с толщиной слоя Fe_xSi_{1-x} около 3 нм и толщиной прослойки Al_2O_3 около 1 нм. Полученные наноструктуры являются перспективной платформой для создания устройств спинтроники нового поколения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 26-29-20055.

Список используемой литературы

1. Elphick K., Frost W., et al. Heusler alloys for spintronic devices: review on recent development and future perspectives // *Science and Technology of Advanced Materials*, 2021, 22. 235-271.
2. Karel J., Bouma D.S., et al. Enhanced spin polarization of amorphous Fe_xSi_{1-x} thin films revealed by Andreev reflection spectroscopy // *Physical Review Materials*, 2018, 2. 064411.

ПОЛИУРЕТАНОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПОНИЖЕННОЙ ГОРЮЧЕСТИ, СОДЕРЖАЩИЕ ФТОРИРОВАННЫЕ АМИНЫ

***Полицимако И.А.**, Кудашев С.В., Желтобрюхов В.Ф.*

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», г. Волгоград,
e-mail: igorpolitsimako@mail.ru

Полиуретаны широко применяются благодаря высокой прочности, эластичности, износостойкости и технологичности, однако их повышенная горючесть ограничивает области применения и требует повышения огнестойкости.

Перспективным направлением является введение фторированных аминов, содержащих аминогруппы и фторсодержащие фрагменты с высокой термической стабильностью. Их включение в структуру полимера снижает воспламеняемость и повышает устойчивость к высоким температурам.

Фторированные амины могут выступать реакционноспособными модификаторами, химически встраивающимися в полиуретановую матрицу при синтезе. Это обеспечивает долговременный огнезащитный эффект и предотвращает вымывание или миграцию добавки. При нагревании фторсодержащие группы способствуют формированию защитного слоя, замедляющего тепло- и массоперенос, ограничивающего доступ кислорода и распространение пламени.

Снижение горючести обусловлено процессами в конденсированной и газовой фазах: формированием устойчивого коксового слоя и ингибированием продуктами разложения свободнорадикальных реакций горения, что снижает интенсивность тепловыделения.

Фторированные амины также улучшают эксплуатационные характеристики полиуретанов: снижают поверхностную энергию, повышают гидрофобность, химическую стойкость и устойчивость к загрязнению. В результате формируются многофункциональные материалы, сочетающие огнестойкость и высокие эксплуатационные свойства.

Исследования показывают повышение кислородного индекса и температуры начала термического разложения, а также снижение скорости распространения пламени. Эффективность модификации зависит от химического строения амина, содержания фтора и особенностей полиуретановой матрицы.

Таким образом, фторированные амины позволяют повысить пожарную безопасность полиуретанов при сохранении механических и эксплуатационных характеристик.

ЗАВИСИМОСТЬ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗНЫХ КОМПОЗИТОВ С $CSPBBR_3$ ОТ ВРЕМЕНИ ПРЕБЫВАНИЯ В ВОДЕ

***Седегова Т.Ю.*[1], Клинков В.А.[1]**

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, TatianaSedegova@yandex.ru

Свинцовые галогенидные перовскиты привлекают внимание ученых своими уникальными спектральными характеристиками: высоким квантовым выходом люминесценции, возможностью варьирования положения пика люминесценции во всем видимом диапазоне и при этом несложной относительно большинства других полупроводниковых люминесцентных структур технологией синтеза. Эти кристаллы обладают потенциалом для использования в фотонике, оптоэлектронике и лазерной оптике, однако интеграция в существующие системы затруднена из-за их неустойчивости к влаге и кислороду воздуха. Для защиты целевых структур от внешнего воздействия их нуклеируют в защитных твердотельных матрицах, чаще всего, стеклообразных, которые существенно повышают инертность изделия к вредным факторам, но не решают проблему полностью [1, 2].

Минимизация нестабильности целевых структур требует изучения механизма работы возействия на них внешних факторов. Данная работа направленна на изучение влияния воздействия влаги на люминесцентные свойства стеклообразных композитов, содержащих галогенидные перовскиты $CsPbBr_3$. В качестве стеклообразной матрицы использовалось боросиликатное стекло, в которой нуклеировались целевые кристаллы посредством термического отжига. Выявленно, что зависимость положения пика люминесценции от врмени пребывания композита в воде нелинейна и зависит от положения в системе равновесия между процессами растворения и кристаллизации целевых структур.

Список используемой литературы

1. Klinkov V. et al. Halide-containing zinc borosilicate glass as a matrix for CsPbBr 3 crystal // Materials Physics and Mechanics. — 2023. — Т. 51. — №. 2. — С. 27-35.
2. Klinkov V. A. et al. In situ kinetics of CsPbBr3 nanocrystal formation in glass via optical absorption //Ceramics International. — 2026.

ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ АМИНОМЕТИЛФОСФОНОВЫХ ПАВ: САМООРГАНИЗАЦИЯ, АНТИМИКРОБНАЯ И АНТИКОРРОЗИОННАЯ АКТИВНОСТЬ

Синяшин К.О., Кушназарова Р.А., Захарова Л.Я.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань,
e-mail: ruwana1994@mail.ru

Супрамолекулярные системы на основе амфифильных соединений широко востребованы в современных технологиях в области биомедицины, косметики, сельского хозяйства, нефтедобывающей промышленности и экологии. В данной работе синтезирован и охарактеризован ряд аминометилфосфоновых ПАВ, отличающихся гидрофильно-липофильным балансом и строением заместителей у атома азота. Был проведен сопоставительный анализ агрегационного поведения, поверхностных и солюбилизационных свойств этих ПАВ, а также их бинарных композиций с катионными ПАВ.

Методами тензиометрии и динамического рассеяния света определены концентрационные пороги мицеллообразования изучаемых систем, размеры агрегатов, а также охарактеризована их способность к смачиванию гидрофобных поверхностей. Получены данные об их антимикробном действии в отношении патогенных штаммов, вызывающих болезни растений. Оценена возможность синергетического действия двух ПАВ различной природы. Спектрофотометрическим методом при использовании зонда-красителя Оранж ОТ, а также плохо растворимых в воде фунгицидов карбендазима и тебуконазола определена солюбилизационная емкость индивидуальных и смешанных систем. Оценена способность аминометилфосфоновых ПАВ выступать в качестве адъювантов в пестицидных композициях, способствующих проникновению действующего вещества в растение.

Кроме того, синтезированные аминометилфосфоновые ПАВ были исследованы в качестве экологически привлекательной альтернативы ингибиторам коррозии на основе катионных ПАВ. Показано, что они проявляют высокий защитный эффект (до 94%) в сильно минерализованных средах, содержащих углекислый газ и сероводород.

Таким образом, индивидуальные и смешанные системы на основе аминометилфосфоновых ПАВ представляют как фундаментальный, так и прикладной интерес в области современных технологий для создания нанокомпозиций с контролируемыми свойствами.

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТНЫХ МОДИФИКАТОРОВ В ТОКСИЧНОСТИ И ОКИСЛИТЕЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ОКСИДА КРЕМНИЯ И ЖЕЛЕЗА

Сушко Е.С.*[1,2], Кичеева А.Г.[1], Дзеранов А.А.[3,4], Кыдралиева К.А.[4], Кудряшева Н.С.[1,2]

[1] Институт биофизики СО РАН, ФИЦ «КНЦ СО РАН», Красноярск, kkovel@yandex.ru
[2] Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, СФУ, Красноярск,
[3] ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка,
[4] Московский авиационный институт, Москва

Биологическая активность наночастиц зависит от множества факторов, включая природу поверхностных модификаторов, определяющих генерацию активных форм кислорода (АФК) и токсичность. Понимание этих механизмов необходимо для разработки безопасных и эффективных наноматериалов.

Исследованы нанокомпозиты (НК) на основе магнетита (М) в матрице сополимера тетраэтоксисилана и 3-аминопропилтриэтоксисилана (ТА), модифицированные аскорбиновой (АК) или гуминовой (ГК) кислотами (ТА-АК-М и ТА-ГК-М). Генерацию АФК оценивали хемилюминесцентным методом, токсичность — по ингибированию биолюминесценции бактерий *Photobacterium phosphoreum*, высвобождение Fe^{3+}/Fe^{2+} — спектрофотометрически.

В абиотической среде (3% раствор NaCl) оба НК вызывали рост АФК (до 200% для ТА-АК-М и 160% для ТА-ГК-М). Однако ТА-АК-М подавлял биолюминесценцию бактерий, проявляя цитотоксичность, тогда как ТА-ГК-М был нетоксичным. При окислительном стрессе (в присутствии 1,4-бензохинона) ТА-АК-М усиливал образование АФК и токсичность, ТА-ГК-М повышал уровень АФК без дополнительного токсического эффекта. Различия обусловлены стабильностью покрытия: АК способствует высвобождению Fe^{3+} и локальным прооксидантным эффектам, а ГК формирует хелатный слой, ограничивающий выход ионов железа.

Биологические эффекты НК не определяются только уровнем АФК в растворах; ключевыми являются стабильность поверхности, высвобождение железа и взаимодействие с клеткой. ТА-ГК-М перспективен как биосовместимый носитель, ТА-АК-М — для терапий с контролируемым окислительным стрессом. Биолюминесцентный тест — эффективный инструмент скрининга, дополняющий физико-химический анализ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда № 25-25-20098, https://rscf.ru/project/25-25-20098/ и Красноярского регионального научного фонда.

ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИНТЕЗ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ КРЕМНЕЗЕМОВ КАК РЕГЕНЕРИРУЕМЫХ СОРБЕНТОВ КАТИОННЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

***Титов Е.Н.*[1], *Смальченко Д.Е.*[2], *Лебедева О.Е.*[2]**

[1] ФГБОУ ВО «Российский государственный социальный университет, Москва, TitovEN@rgsu.net

[2] ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет», Белгород

Катионные красители, в том числе метиленовый синий, являются стойкими компонентами сточных вод фармацевтической и полиграфической промышленности, и их удаление из водных растворов остается технологически сложной задачей. Сорбенты на основе кремнезема привлекательны для этой цели благодаря развитой поверхности, а введение катионов переходных металлов в кремнеземный каркас позволяют регулировать кислотно-основные свойства поверхности. Настоящая работа посвящена золь-гель синтезу железосодержащих кремнеземов с различными концентрациями легирующей добавки и pH синтеза и оценке сорбционной активности полученных кремнеземов по отношению к метиленовому синему в течение нескольких циклов адсорбции-регенерации.

Кремнеземы, легированные железом, были получены методом золь-гель гидролиза тетраэтоксисилана (ТЭОС : этанол : вода = 1:4:16) при содержании Fe (III) 1,5, 2,3 и 3,8 ат.%, при 50 °C и при pH 1,5, 2,5, 5,0 и 7,0. Протестированы образцы в качестве сорбентов метиленового синего в течение трех последовательных циклов адсорбции — регенерации на воздухе (180 °C, 60 минут). Значение pH синтеза значительнее влияло на процесс регенерации, чем содержание железа. Образцы, полученные при pH 7,0, 5,0 и 1,5, оставались активными во всех циклах, тогда как материалы, сформированные при pH 2,5, близком к изоэлектрической точке диоксида кремния, сохраняли лишь 3–6% сорбционной способности из-за необратимого разрушения пористой структуры. Увеличение активности после первой регенерации отражает неполное окисление сорбата при 180 °C: продукты уплотнения удерживаемого красителя сами по себе являются сорбционно-активными, поэтому регенерация действует как дополнительная модификация поверхности. Последующее монотонное снижение, менее выраженное при pH 7,0 и 1,5, объясняется прогрессирующей карбонизацией остаточных органических веществ, уменьшающей радиус и объем пор. Таким образом, pH 7,0 обеспечивает наилучший баланс активности и стабильности, в то время как карбонизация устанавливает практический предел этого режима регенерации и определяет дальнейшие исследования параметров термолиза и эволюции пористой структуры.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ КАК ИНДИКАТОР ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА В ПРОТОЧНОМ ИЗОБАРИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ

***Федосеев Т.В.*[1], Богородский С.Э. [1], Богдан Т.В. [1,2], Богдан В.И.[1]**

[1]Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, fedoseev.tv@phystech.edu

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

В работе изучено фазовое поведение 1,4-диоксана и смесей на его основе при высоких параметрах состояния в проточном реакторе. Критические параметры 1,4-диоксана известны [1], а свойства систем 1,4-диоксан–вода и 1,4-диоксан–этанол исследовались преимущественно в стационарных условиях [2]. Цель работы — оценить возможность применения температурных кривых для оперативной индикации фазового состояния среды при проточном изобарическом нагревании.

Эксперименты проводили на установке высокого давления с нагреваемым U-образным каналом переменного сечения. Исследовали чистый 1,4-диоксан и две смеси, содержащие 5об% воды или этанола. Среду подавали с постоянной скоростью при неизменном давлении, регистрируя температуру потока в процессе нагревания. По уравнению состояния Пенга — Робинсона [3] были рассчитаны изобары плотности.

Температура чистого 1,4-диоксана изменялась плавно, тогда как добавление воды или этанола вызывало выраженные флуктуации, указывающие на формирование нестационарного двухфазного течения. Расчетные температуры скачка плотности составили 289.3°C для смеси 1,4-диоксан–вода и 300°C для смеси 1,4-диоксан–этанол. Соответствие температурных флуктуаций областям разрыва изобар плотности показывает, что температурная кривая может служить оперативным индикатором для мониторинга фазового поведения жидкой стстемы.

Список используемой литературы

1. Kobe K. A., Ravicz A. E., Vohra S. P. Critical Properties and Vapor Pressures of Some Ethers and Heterocyclic Compounds // Industrial & Engineering Chemistry Chemical & Engineering Data Series, 1956, Vol. 1, No. 1. P. 50-56.
2. Matsuo, S., Mizuguchi, Y., Tanaka, Y. et al. Volumetric properties of mixtures of 1,4-dioxane and water at high pressures. // International Journal of Thermophysics, 1996, Vol. 17. P. 441–454.
3. Peng D.-Y., Robinson D.B. A New Two-Constant Equation of State // Journal of Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 1976, Vol. 15, No.1. P. 59–64.

НАТРИЙ-ИОННЫЕ АККУМУЛЯТОРЫ С ДВОЙНОЙ СОЛЬЮ $NAPF_6$/NAOTF В ЭФИРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ ДЛЯ РАБОТЫ В ШИРОКОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ДИАПАЗОНЕ

Глушкова А.С.[1,2]***, Репина А.А.***[1,2]***, Иноземцева А.И.***[1,2]

[1] *Московский Физико-Технический Институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, glushkova.as@phystech.edu*

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

Активный рост потребления электроэнергии ведет к необходимости разработки новых накопителей энергии. Натрий-ионные аккумуляторы являются перспективной альтернативой литий-ионным благодаря широкой распространенности натрия. Однако для эффективного переноса ионов, стабильной работы в широком температурном диапазоне, высокого циклического ресурса и удельной емкости требуется подбор оптимального электролита. Многообещающим подходом к регулированию свойств электролита является использование смесей солей натрия с различными анионами [1].

В настоящей работе исследуются эфирные электролиты на основе смесей гексафторфосфата ($NaPF_6$) и трифлата (NaOTf) натрия (составов 1M:0M, 0,5M:0,5M, 0,9M:0,1M, 0M:1M) в глимовых растворителях с различной длиной цепи (1G — 1,2-диметоксиэтан; 2G — бис(2-метоксиэтил) эфир; 3G — триэтиленгликоль диметиловый эфир; 4G — диметиловый эфир тетраэтиленгликоля) и их влияние на электрохимическую стабильность анода из неграфитизируемого углерода (HC) при температурах –30, +25, +40°C.

Установлено, что наибольшая проводимость достигается для 1 M $NaPF_6$ в 1G; увеличение длины цепи глима и введение NaOTf приводит к снижению проводимости. По данным КР-спектроскопии, замена части $NaPF_6$ на NaOTf способствует ослаблению координации Na^+ с молекулами растворителя и усилению взаимодействия Na^+ с анионом OTf^-.

При комнатной температуре для всех электролитов достигнута разрядная емкость анода от 150 до 270 мА·ч/г. При +40 °C добавление 0,1 M NaOTf к $NaPF_6$ повышает емкость анода с 200 до 250 мА·ч/г, однако дальнейшее увеличение доли NaOTf ускоряет деградацию емкости. При –30 °C электролиты на основе чистого $NaPF_6$ не обеспечивают устойчивого циклирования, тогда как добавление 0,1–0,5 M NaOTf (в 2G) позволяет достичь обратимого натрирования HC с емкостью до 170 мА·ч/г. Таким образом, было показано, что использование двойной соли $NaPF_6$–NaOTf улучшает сольватацию Na^+, расширяя температурный диапазон работоспособности НИА.

Список используемой литературы

1. Akila C. Thenuwar, Pralav P. Shetty, Neha Kondekar, [et al.] Enabling highly reversible sodium metal cycling across a wide temperature range with dual-salt electrolytes, Journal of Materials Chemistry A, 2021, 9(17), 10992-11000. Doi: 10.1039/d1ta00842k.

СЕКЦИЯ
«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ БИОЛОГИЯ: ОТ ХИМИИ И ФИЗИКИ К МЕДИЦИНЕ»

АНАЛИЗ МОРФОЛОГИИ МИОБЛАСТОВ C2C12 НА МЕТАЛЛООКСИДНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

***Белик П.А.*[1], *Мисюрев А.А.*[1], *Маннинен А.С.*[1], *Бузыкин А.Г.*[1]**

[1] *Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, polinabelik.itmo@gmail.com*

Морфология и адгезия клеток на металлооксидных поверхностях зависят от их микро-и наноструктуры, включая степень шероховатости. Традиционно эти особенности исследуют по организации цитоскелета и фокальных контактов [1]. В данной работе оценивали морфологию миобластов на шероховатых поверхностях с помощью компьютерного зрения.

Модельные поверхности представляли собой тонкие пленки оксидов металлов, нанесенные на боросиликатное предметное стекло методом обратного лазерного трансфера. По степени шероховатости образцы условно были ранжированы от наименее шероховатой наноструктурированной поверхности S1 через поверхности с промежуточной шероховатостью S2 и S3 до наиболее шероховатой поверхности S4 с выраженными микроструктурами. Мышиные миобласты C2C12 культивировали на поверхности в течение 24 часов в среде DMEM с добавлением 10% FBS. Фиксация клеток для изучения на сканирующем электронном микроскопе происходила по существующей методике [2]. Наибольшие значения параметра размера клеток выявлены на наношероховатой поверхности S1. Между поверхностями S2 и S3, имеющими близкие режимы обработки, статистически значимых различий по данному параметру не обнаружено, при этом попарные сравнения выявили различия между остальными группами. Клетки различались по линейным размерам, описываемым параметрами Feret Max и Feret Min. Наибольшие значения Feret Max были характерны для клеток на S1, статистически значимые различия отмечались между S1 и S4, S1 и S2/S3, а также между S4 и S2/S3, тогда как S2 и S3 не различались. По параметру Feret Min максимальные значения выявлены на S4, различия обнаружены между S4 и S1/S3, а также между S1, S2 и S3.Таким образом, разработанный подход применим для количественной оценки клеточного ответа на топографию поверхности, поскольку позволяет выявлять различия в морфометрических параметрах клеток.

Список используемой литературы

1. Dede Eren A. et al. // Front. Cell Dev. Biol. 2022. 10:863721. DOI: 10.3389/fcell.2022.863721.
2. Albuschies J., Vogel V. // Sci. Rep. 2013. 3:1658. DOI: 10.1038/srep01658.

БИОСИНТЕТИЧЕСКИЕ ГЕННЫЕ КЛАСТЕРЫ АНТИМИКРОБНЫХ ПЕПТИДОВ МОРСКОЙ БАКТЕРИИ *AQUIMARINA MUELLERI* V1SW51

***Шульга Е.А.*[1], Усов Б.В. [1], Балабанова Л.А.[1,2], Пентехина Ю.К.[1]**

[1] Научно-исследовательская лаборатория рекомбинантных ДНК технологий (молодежная), «Институт биотехнологий, биоинженерии и пищевых систем», Передовая инженерная школа, Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток

[2] Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова ДВО РАН, г. Владивосток

Штамм *Aquimarina muelleri* V1SW51 (КММ6556, Коллекция морских микроорганизмов Тихоокеанского института биоорганической химии ДВО РАН) был выбран для исследования с целью поиска биосинтетических генных кластеров с предполагаемой антимикробной активностью. На основании сформированной геномной выборки рода *Aquimarina*, включающей 75 высококачественных сборок, была построена сеть сходства последовательностей биосинтетических генных кластеров, которая продемонстрировала высокую специфичность вторичного метаболизма. В результате было выделено три уникальных для вида *A. muelleri* биосинтетических генных кластера, среди которых особый интерес представляет кластер лантипептидов I класса Aqm1. Детальная характеристика данного кластера показала, что его структурный ген кодирует прекурсор, гомологичный пинензину, но обладающий уникальным С-концевым аминокислотным удлинением, что указывает на потенциальную новизну конечного метаболита. В рамках анализа была охарактеризована сложная сопутствующая транспортная система, состоящая из мультисубъединичного ABC-транспортера и TonB-зависимого белка внешней мембраны, а также FUR-сопряженный регуляторный ген. Была обнаружена ко-локализация кластера Aqm1 с генами анаэробной рибонуклеотидредуктазы III класса, что может говорить об адаптивном механизме в гипоксических зонах морских биопленок. Предполагается, что обнаруженный биосинтетический кластер лантипептидов открывает новые перспективы для создания инновационных антимикробных агентов для борьбы с полирезистентными патогенами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FZNS-2025-0011.

МОДИФИКАЦИЯ АНАЛИЗА ИНТЕГРАЛЬНОЙ РАСТВОРИМОСТИ ПРОТЕОМА ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ МИШЕНЕЙ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

***Проскуряков Т.А.*[1,2], *Гончаров А.О.*[1,2], *Свирина Е.А.*[1], *Шендер В.О.*[1,3]**

[1] *ФНКЦ ФХМ им. Ю.М. Лопухина ФМБА России, Москва, iefomit124@yandex.ru*
[2] *РНИМУ им. Н.И. Пирогова (Пироговский университет), Москва*
[3] *ГНЦ ИБХ им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Россия, Москва*

Малые молекулы способны образовывать молекулярные связи с белками-мишенями и повышать их термическую стабильность, что сопровождается изменением их растворимости. На этом принципе основан анализ изменения интегральной растворимости протеома (PISA, Proteome Integral Solubility Alteration) — высокопроизводительный метод идентификации белковых мишеней малых молекул в живых клетках. Однако при анализе результатов затруднено разграничение прямых эффектов связывания препарата и вторичных изменений, связанных с клеточным ответом. Кроме того, временной интервал между инкубацией препарата и термопрофилированием может приводить к диссоциации комплексов препарат-мишень и снижению чувствительности детекции. Целью работы являлась модификация протокола PISA для повышения эффективности идентификации прямых мишеней малых молекул в живых клетках. В качестве модельной системы мы использовали клетки аденокарциномы яичника SKOV3 и ингибитор сплайсинга пладиенолид Б (Pl-B). В клетках SKOV3 масс-спектрометрическим анализом было обнаружено изменение растворимости (ΔS) белка сплайсосомы SF3B1, что было подтверждено выявлением термической стабилизации ортогональным методом анализа клеточного термического сдвига (CETSA) на основе вестерн-блоттинга. Одновременно было выявлено снижение представленности CTGF и CYR61. Экспрессионный протеомный анализ показал, что эти изменения отражают клеточный ответ на Pl-B, а не ΔS из-за прямого взаимодействия с препаратом. Для снижения вклада вторичных клеточных ответов был предложен модифицированный протокол, предусматривающий инкубацию предварительно открепленных клеток с препаратом непосредственно перед термопрофилированием. Модификация позволила эффективнее выявлять ΔS для SF3B1 и других компонентов сплайсосомы вследствие сокращения времени экспозиции и увеличения эффективной концентрации препарата. При этом изменения представленности CTGF и CYR61 не наблюдались, что, вероятно, объясняется как недостаточным временем, так и изменением условий для экспрессии данных белков. Таким образом, предложенная модификация PISA повышает точность идентификации прямых мишеней малых молекул и способствует их дифференциации от вторичных изменений протеома, связанных с клеточным ответом.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №25-15-00520.

БИОМИМЕТИКИ ВНЕКЛЕТОЧНОГО МАТРИКСА НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЖЕЛАТИНА: РАЗРАБОТКА И ОЦЕНКА СВОЙСТВ

***Гусева Е.А.*[1], Мосолова А.А. [1,2], Белова А.Д.[1], Немец Е.А.[1], Басок Ю.Б.[1]**

[1] ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Россия, Москва, ekaterinaa.guseva.2001@mail.ru

[2] ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И. М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), Москва

Метод электроформования позволяет получать волокнистые матриксы с развитой поверхностью, благоприятной для адгезии и пролиферации клеток [1]. Недостатками поликапролактона (ПКЛ) являются гидрофобность и низкая скорость биорезорбции. Для их коррекции ПКЛ модифицировали желатином [2]. Цель работы — получить композиционные волокнистые матриксы ПКЛ/желатин методом электроспиннинга и оценить их свойства.

Матриксы толщиной 200–220 мкм формовали из 5% раствора ПКЛ в гексафторизопропаноле с добавлением 0–50 мас.% желатина. После вакуумирования оценивали морфологию методом СЭМ, смачиваемость — по краевому углу воды, устойчивость к окислительной деструкции — в реактиве Фентона (100 мкМ $FeSO_4$, 1 мМ H_2O_2).

Получены высокопористые матриксы. Диаметр волокон чистого ПКЛ и композиции с 10% желатина составил 1,4±0,3 и 1,2±0,3 мкм соответственно. При содержании желатина 30–50% наблюдали увеличение диаметра волокон и размера пор с 13,9±4,2 до 17,5±5,3 мкм. Добавление желатина снизило краевой угол с 73,8°±2,7 до 50,1°±2,8. После 90 суток в реактиве Фентона потеря массы образцов ПКЛ и ПКЛ/10% желатина не превышала 2%, тогда как для композиций с 30 и 50% желатина составила 15,3±0,3 и 25,2±0,2%.

Содержание желатина позволяет регулировать морфологию, смачиваемость и устойчивость матриксов ПКЛ к ускоренной окислительной деструкции. Материалы перспективны для дальнейшего исследования в качестве скаффолдов для тканевой инженерии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-25-01027, https://rscf.ru/project/25-25-01027/

Список используемой литературы

1. Sevastianov VI, Nemets EA, et al. The Effect of Bilayered Bioactive Coating on Polycaprolactone Electrospun Scaffold Biocompatibility, Bioabsorption and Cellular Properties. Polymers. 2025; 17(21):2813. https://doi.org/10.3390/polym17212813
2. Lozinsky V.I., Kulakova V.K. et al. Cryostructuring of polymeric systems: 63. Synthesis of two chemically tanned gelatin-based cryostructurates and evaluation of their potential as scaffolds for culturing of mammalian cells // Gels, 2022, T. 8. № 11. C. 695.

РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ПОИСКА БИОМАРКЕРОВ НЕЙРОТРАВМЫ НА ПЛАТФОРМЕ МАЭСТРО-αMC.

***Антипова А.А.*[1], Клычникова Е.В.[2], Пеков С.И.[1]**

[1] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, rumiantseva.aa@phystech.edu*

[2] *Национальный исследовательский институт скорой помощи им. Н. В. Склифосовского, Москва*

Лечение пациентов с черепно-мозговой травмой (ЧМТ) требует непрерывного мониторинга. Целью работы является оценка возможностей метаболомного анализа на основе газовой хромато-масс-спектрометрии для выявления кандидатов в биомаркеры, характеризующих течение ЧМТ, субарахноидального кровоизлияния (САК) и нейровоспаления.

Образцы спинномозговой жидкости и сыворотки крови проходили двухфазную экстракцию в системе хлороформ:метанол:вода (2:2:1), и дериватизацию полярной фракции (MeOX/MSTFA). Анализ проводился на газовом хромато-масс-спектрометре Маэстро-αMC с колонкой Rtx-5MS и градиентным термостатированием.

В цереброспинальной жидкости выявлены достоверные ($p < 0,05$) изменения уровня ряда метаболитов, отражающие нарушения энергетического обмена и метаболизма аминокислот. При ЧМТ по сравнению с нейровоспалением отмечено повышение содержания цитрата, что может свидетельствовать об интенсификации цикла трикарбоновых кислот. При сочетании ЧМТ и САК наблюдалось снижение количества галактозы относительно нейровоспаления, что может быть связано с нарушением гликолиза и лактатного обмена. Для САК характерно повышение содержания глутамина и снижение уровней орнитина и тирозина по сравнению с нейровоспалением и ЧМТ соответственно. Эти сдвиги могут отражать перестройку глутамат-глутаминового цикла, усиление катаболизма аминокислот и нарушения нейротрансмиттерного баланса. В сыворотке крови после контроля множественных сравнений наиболее устойчивые различия обнаружены для САК относительно нейровоспаления: снижение содержания фенилаланина и аспартата, а также выраженная тенденция к снижению уровня глутамата, участвующих в энергетическом метаболизме и нейротрансмиссии. Для ЧМТ относительно нейровоспаления выявлены тенденции к повышению концентраций мочевой кислоты, миоинозитола, что может отражать окислительный стресс и нарушение осмолярности.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЙРОПРОТЕКТОРНОЙ АКТИВНОСТИ ПРЕПАРАТА CNEURO-201 ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ТАУ-ПРОТЕИНОПАТИИ

***Сединова В.Н.*[1], Небогатиков В.О.[1], Правдивцева Е.С.[1], Орлова Е.А.[1], Чапров К.Д.[1]**

[1] Институт физиологически активных веществ Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (ИФАВ РАН), г. Черноголовка, sedinova@ipac.ac.ru

Тау-протеинопатии — группа нейродегенеративных заболеваний, при которых наблюдается аномальное накопление патологически измененного белка тау, что приводит к нарушению функционирования нейронов и их гибели.

CNEURO-201 (CNE-201) — производное нафталина, показавшее мультитаргентное действие в отношении молекулярных мишеней болезни Альцгеймера в ряде *in silico*, *in vitro* и *in vivo* исследований [1]. Целью данного исследования является изучение активности CNE-201 на мышиной трансгенной модели тау-протеинопатии Tau-P301S.

Были сформированы три группы животных: контрольная Tau-P301S (n=16), Tau-P301S CNE-201 (n=17), контрольная C57Bl/6J (n=6). Препарат вводился в/ж в дозе 0,1 мг/кг с возраста животных 80 дней и до достижения ими возраста 210 дней. Для оценки действия CNE-201 ежедневно проводился мониторинг симптоматики и массы тела, еженедельно проводились тесты для анализа моторных функций («Сила хватки», «Перевернутая сетка» и

«Вращающийся стержень»). Методом qPCR была изучена динамика экспрессии генов, вовлеченных в прогрессию нейродегенерации в среднем мозге, а также проведен анализ дофамина, серотонина и их метаболитов методом ВЭЖХ в стриатуме.

Применение CNE-201 увеличивало продолжительность жизни мышей Tau-P301S в среднем на 7 дней, но не уменьшало общую смертность. Отмечается замедление прогрессии моторных нарушений в течение первых двух недель от начала симптоматики у мышей в группе CNE-201, а также более высокие показатели силы на протяжении симптоматической стадии. У мышей группы CNE-201 наблюдается увеличенное содержание дофамина в стриатуме при снижении содержания его метаболитов. Полученные данные свидетельствуют о потенциальном нейропротективном действии препарата CNE-201 в отношении тау-патологии.

Исследование поддержано грантовым соглашением № 075-15-2025-289.

Список используемой литературы

1. García-Pupo L., Crouzier L., et al. Amylovis-201 is a new dual-target ligand, acting as an anti-amyloidogenic compound and a potent agonist of the σ1 chaperone protein. // Acta Pharm Sin B., 2024, №14(10). P. 4345-4359.

ОСОБЕННОСТИ БИОХИМИЧЕСКИХ И БИОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОРГАНИЗМА У ЛИЦ, СТРАДАЮЩИХ ПОЛЛИНОЗОМ

Клименко Я.В.*[1], Павлюченко И.И.[1], Похотько А.Г.[1], Голанцев А.С.[1], Налбандян Д.А.[2], Васильева М.А.[3]

[1] Кубанский государственный медицинский университет, Краснодар,
[2] Лицей № 90 им. М.Ю. Лермонтова, Краснодар
[3] Кубанский институт профессионального образования, Краснодар, yana.klimenk@mail.ru

Поллиноз выявляется у 15-30% жителей планеты, характеризуясь неуклонным ростом заболеваемости, что актуализирует раннюю диагностику и превентивные меры [1]. Патогенез данного заболеавния ассоциирован с локальным и системным воспалением, который сопровождается окислительным стрессом (ОС) и эндогенной интоксикацией (ЭИ), приводя к формированию метаболических сдвигов в организме и, в последствии, неблагоприятному течению аллергии [1]. Анализ особенностей биохимических и биофизических параметров организма на фоне аллергической реакции — востребованная задача для разработки дополнительных диагностических и терапевтических подходов в практической медицине. Цель исследования — оценка особенностей регуляторно-метаболических сдвигов у лиц с поллинозом. Отобрана исследуемая (n = 50, 26,00 (25,00; 46,75) лет) и контрольная (n = 50, 26,00 (23,0; 43,50) лет) группы, сопоставимые по возрасту, полу и индексу массы тела [1]. Осуществлено биоимпедансное исследование, установлено, у лиц с поллинозом фиксируется повышение уровня внеклеточной жидкости на 25,4% ($p < 0,001$), а также снижение активной клеточной массы на 8,5% ($p < 0,01$) относительно контроля, что свидетельствует о развитии системного воспаления в организме, сопровождающегося нарушением водно-электролитного баланса и активацией катаболических процессов. Проведены биохимические исследования в исследуемой и контрольной группах на наличие и выраженность метаболических сдвигов при развивающимся на фоне поллиноза ОС и ЭИ (уровень малонового диальдегида; общая оксидантная активность; сорбционная способность эритроцитов; активность супероксиддисмутазы, каталазы, глутатион-S-трансферазы). Выявлено, у лиц с поллинозом имеется выраженный ОС в организме, приводящий к развитию ЭИ, при этом активность ферментов системы антиоксидантной защиты и детоксикации была недостаточна для подавления данных патологических процессов. Установлена прямая положительная сильная корреляционная связь между уровнем общего иммуноглобулина Е и малонового диальдегида в крови ($r = 0,78$; $p < 0,001$). На основании полученных результатов можно рассматривать внедрение дополнительных диагностических и лечебно-профилактических подходов для установления факта развития и снижения тяжести проявления сезонной аллергии, что приведет к социально-экономическому эффекту за счет раннего выявления, снижения рисков развития поллиноза и расходов на лечение.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта № Н-25.1/8.

Список используемой литературы

1. Павлюченко И.И. Клименко Я.В. и др. // *Передовые исследования Кубани*, 2026. 127-132.

НЕИНВАЗИВНЫЙ МОНИТОРИНГ СОСТОЯНИЯ ПАЦИЕНТОВ С МУКОВИСЦИДОЗОМ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОАНАЛИЗА КОНДЕНСАТА ВЫДЫХАЕМОГО АЭРОЗОЛЯ

***Алексеева А.И.*, Андреев Е.А.**

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, alekseevaai1@my.msu.ru

Муковисцидоз (МВ) — одно из наиболее распространенных моногенных заболеваний. Традиционно «золотым стандартом» прижизненной диагностики МВ является потовый тест. Однако этот тест может давать ложноотрицательные результаты для пациентов с «легкими» мутациями [[1]]. Учитывая, что физиологические нарушения при МВ возникают преимущественно в легких, особый интерес представляет исследование выдыхаемого воздуха в качестве одного из методов неинвазивной диагностики. В связи с этим целью работы является создание диагностического метода для неинвазивного мониторинга состояния или оценки эффективности лечения пациентов с диагнозом МВ.

Для достижения поставленной задачи при отборе проб использовали конденсор аэрозоля выдыхаемого воздуха без принудительного охлаждения, позволяющий получать на несколько порядков более концентрированные образцы [[2]], что в представляемой работе было подтверждено сравнительным анализом с коммерческой системой RTube. Для измерения проводимости биологических образцов применяли спектроскопию электрохимического импеданса, способную работать с малыми объемами проб. Эффективность разработанного подхода оценивали с помощью образцов, полученных от трех групп добровольцев: контрольной группы (без МВ), пациентов с МВ без терапии и пациентов с МВ на фоне лечения.

В результате на основе асинхронного изменения значений проводимости конденсата выдыхаемого аэрозоля (КВА) и пота был предложен двумерный диагностический критерий, который позволил разделить здоровых добровольцев и пациентов с МВ, не получающих лечения [[3]]. Кроме того, исследование показало, что на фоне терапии значения проводимости КВА у пациентов с МВ смещаются из диапазона, характерного для больных, в область значений здоровых добровольцев, что указывает на возможность применения этого метода для оценки эффективности лечения.

Список используемой литературы

1. Grasemann H., Ratjen F.N. Cystic Fibrosis // The New England Journal of Medicine, 2023, 389(18), 1693-1707.
2. Andreev E.A., Shavokshina V.A., Nikitina V.N. Sensor platform for noninvasive evaluation of pulmonary oxidative status // *Talanta*, 2025, 290, 127792.
3. Andreev E. A. et al. Breath Aerosol Admittance Orthonormal to Sweat Conductivity as a Reliable 2-D Diagnostic Criterion for Cystic Fibrosis // *Analytical Chemistry*, 2026, 98, 13, 9508-9511.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА БИОСОВМЕСТИМОСТИ РЕЗОРБИРУЕМЫХ СКАФФОЛДОВ НА ОСНОВЕ PLGA И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ В УСЛОВИЯХ *IN VITRO*

Усатов Н.С. [1,2], ***Багдасарян А.А.***[2], ***Киселева В.В.***[2] , ***Вишнякова П.А.***[2]

[1] *МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва*
[2] *ФГБУ НМИЦ АГП им. В.И. Кулакова Минздрава РФ, Москва*

Рак молочной железы является наиболее распространенным злокачественным новообразованием у женщин и в ряде случаев его лечение требует выполнения мастэктомии. Перспективным направлением реконструкции является применение трехмерных биорезорбируемых скаффолдов, обеспечивающих условия для регенерации тканей. Целью работы являлась оценка биосовместимости скаффолдов на основе поли(молочной-со-гликолевой кислоты) (PLGA) и карбоксиметилцеллюлозы (CMC) *in vitro*, а также определение оптимального способа заселения PLGA-скаффолдов мезенхимальными стромальными клетками (МСК).

На первом этапе работы в качестве клеточной модели были использованы МСК пуповины человека. Цитотоксичность PLGA- и CMC-скаффолдов оценивали методом МТТ-теста. Жизнеспособность МСК при сокультивировании с PLGA-скаффолдами была сопоставима с интактным контролем, тогда как при взаимодействии с CMC-скаффолдами отмечалось ее снижение. Дальнейшие эксперименты по клеточному заселению проводили с PLGA-скаффолдами, сравнивая статический, инъекционный и динамический методы заселения. По данным флуоресцентной микроскопии с окрашиванием DAPI и PKH26 наиболее эффективная адгезия клеток наблюдалась при динамическом методе. На втором этапе исследовали взаимодействие PLGA- и CMC-скаффолдов с $CD14^+$ моноцитами человека. После сокультивирования оценивали экспрессию генов, ассоциированных с иммунным ответом и ремоделированием тканей. Присутствие PLGA-скаффолдов сопровождалось повышением экспрессии *IL6* и снижением *TNF*, тогда как CMC-скаффолды вызывали снижение экспрессии *MMP2*. Дополнительно для PLGA-скаффолдов методом желатиновой зимографии исследовали активность матриксных металлопротеиназ MMP-2 и MMP-9.

Полученные данные свидетельствуют о более высокой цитосовместимости PLGA-скаффолдов в исследованных условиях *in vitro* и эффективности динамического метода их заселения МСК. Выявленные изменения экспрессии генов у $CD14^+$ моноцитов подтверждают влияние состава скаффолда на клеточный ответ, связанный с воспалением и ремоделированием внеклеточного матрикса.

Работа выполнена при поддержке государственного задания «Разработка 3D-биорезорбируемого скаффолда для реконструкции молочной железы» №125050605838-9.

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА НА КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛЬБУМИНА МЕТОДОМ БРЭДФОРДА

Горобец М.Г., Кузнецова А.И., Костанова Е.А., Бирюкова М.И., Котиков В.В., Шалупов А.И., Бычкова А.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия, maria.g.gorobets@gmail.com

Наночастицы оксидов железа (НЧОЖ) широко используются для создания биомедицинских материалов, предназначенных для целевой доставки лекарств, магнитной гипертермии и др. Для повышения биосовместимости НЧОЖ их поверхность покрывают различными веществами, в том числе человеческим сывороточным альбумином (ЧСА). Важным этапом разработки таких материалов является количественная оценка белка на поверхности НЧОЖ. Метод Брэдфорда — один из наиболее распространенных методов оценки количества белков благодаря сравнительно высокой чувствительности, малому объему образца, быстроте анализа. Цель исследования — выявление влияния НЧОЖ на количественное определение ЧСА в составе наносистем, содержащих НЧОЖ, методом Брэдфорда. Проведена оценка различных подходов к расчету концентрации белка на поверхности НЧОЖ: анализа наносистем и их надосадочных растворов, а также оценка взаимодействия реактива Брэдфорда с системами, содержащими ЧСА и НЧОЖ, путем добавления избытка ЧСА в надосадочный раствор и в образец после длительной инкубации с реактивом Бредфорда. В таблице (табл. 1) представлены результаты измерений.

Таблица 1. Содержание ЧСА (мг/мл) в образцах, измеренных различными подходами

Образец	НЧОЖ	ЧСА@НЧОЖ
Редиспергат, содержащий НЧОЖ	0,004±0,004	0,007±0,006
Надосадочный раствор	-	0,017±0,004
Надосадочный раствор от образцов, взаимодействовавших с реактивом Брэдфорда 2 ч, после добавления избытка ЧСА	0,008±0,003	0,018±0,005
После добавления избытка ЧСА к образцам, взаимодействовавших с реактивом Брэдфорда 2 ч	0,006±0,005	0,007±0,006

Наивысшую точность измерения имеет подход, включающий добавление избытка ЧСА к остаточному реактиву Брэдфорда после его реакции с образцами. При добавлении реактива Брэдфорда происходит растворение НЧОЖ, влияющее на определение ЧСА.

Работа выполнена при поддержке из средств федерального бюджета Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ИБХФ РАН (№ гос. регистрации 125020601631-3).

РАНОЗАЖИВЛЯЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ МАЗИ С ТИОСУЛЬФАТНЫМ ТЕТРАНИТРОЗИЛЬНЫМ КОМПЛЕКСОМ ЖЕЛЕЗА

***Новикова В.О.*, Руина К.С., Матвеева Л.М., Чичева М.М., Покидова О.В., Санина Н.А.**

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, veronika@icp.ac.ru

Монооксид азота (NO) участвует в регуляции заживления ран [1]. Цель работы — разработка мази с тиосульфатным тетранитрозильным комплексом железа (ТНКЖ) и исследование ее NO-донорной и ранозаживляющей активности.

Мазь содержала 0,4 мас. % тиосульфатного ТНКЖ, синтезированного по ранее разработанной методике [2], 10 мас. % диметилсульфоксида и 89,6 мас. % безводного ланолина. Раствор комплекса вводили в расплавленный ланолин при 40 °С и гомогенизировали. NO-донорную активность оценивали по накоплению нитрит-ионов с помощью реакции Грисса в Трис-HCl буфере (pH 7,0, 23 °С). Мазь сохраняла NO-донорную активность не менее трех месяцев при хранении при 4–8 °С в защищенном от света месте.

Ранозаживляющую активность исследовали на модели полнослойной кожной раны у мышей BDF1 при ежедневном нанесении мази в течение 11 суток. К 11-м суткам площадь раны сократилась на 93,5 %, ее остаточная площадь составила 2,3 ± 0,3 мм^2 (M ± SEM). Для декспантенола, диклофенака и необработанной раны сокращение площади составило 92,6; 80,5 и 90,2 % соответственно. К завершению опыта число лейкоцитов в группе ТНКЖ находилось в пределах референсного диапазона.

Таким образом, разработанная мазь сохраняет NO-донорную активность и демонстрирует ранозаживляющее действие, сопоставимое с декспантенолом в экспериментальной модели. Результаты обосновывают дальнейшее доклиническое изучение мази с тиосульфатным ТНКЖ.

Работа выполнена по теме Государственного задания (государственная регистрация № 124020500019-2).

Список использованной литературы

1. Witte M.B., Barbul A. Role of nitric oxide in wound repair // *Am. J. Surg.* 2002. Vol. 183, № 4. P. 406–412.
2. Sanina N.A., Aldoshin S.M., Rudneva T.N., Golovina N.I., Shilov G.V., Shul'ga Yu.M., Martynenko V.M., Ovanesyan N.S. Synthesis, structure and solid-phase transformations of Fe nitrosyl complex $Na_2[Fe_2(S_2O_3)_2(NO)_4]\cdot 4H_2O$ // *Russ. J. Coord. Chem.* 2005. Vol. 31, № 5. P. 301–306.

АНАЛИЗ СМЕСЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ЗМЕИНЫЕ ЯДЫ, МЕТОДОМ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

***Можаева В.А.*[1,2], *Уткин Ю.Н.*[2]**

[1] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, VeraMozhaev@yandex.ru*

[2] *Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва*

В некоторых случаях, запрещенные к перевозке вещества смешиваются с разрешенными бытовыми веществами, в частности, с целью маскировки. Так, змеиные яды входят в список сильнодействующих и ядовитых веществ, и их транспорт ограничен. Тем не менее, их контрабанда является сегодня глобальной проблемой [1]. Для привлечения к ответственности лица, осуществляющего незаконную перевозку ядов, необходимо доказать, что изъятый «порошок» содержит змеиный яд. Таким образом, необходима простая экспресс-методика идентификации ядов, реализуемая на местах. При этом актуальна разработка методики детекции змеиного яда в смеси с маскирующим веществом разбавителем. В данной работе в качестве основы подобной методики рассмотрена рамановская спектроскопия (или комбинационного рассеяния, КР), которая обладает рядом ключевых, с точки зрения рассматриваемой задачи, преимуществ: компактность оборудования, минимальная пробоподготовка, автоматизуемость.

Были записаны спектры КР ядов змей (*Naja oxiana, Dendroaspis angusticeps, Vipera berus*), смешенных с разбавителями (сода пищевая, крахмал картофельный, тальк, кофеин, аминокислоты, сахар). Визуально яды и разбавители представляли собой белые порошки. Их смеси были растворены в воде, и растворы нанесены на подложку. Спектры снимались с высохших капель. Был обнаружен интересный эффект: яды и разбавители в большинстве случаев пространственно отделялись друг от друга в виде колец (так называемые «кофейные кольца»), удаленных от центра сухой капли на различные расстояния, что делало возможность запись спектров отдельных компонент смеси. Это позволило идентифицировать яд в смеси с разбавителем, где масса разбавителя могла превышать массу яда в 4 раза.

Таким образом, результаты показывают переспективность разработки на основе спектроскопии КР методики идентификации непосредственно в пунктах контроля змеиных ядов при досмотре.

Список используемой литературы

1. Verma K. L., Singh A. P. et al. New forensic challenges and detection of snake venom // *Forensic Toxicology*, 2018, 36. 537–539.

ДИЗАЙН И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ КОМБИНИРОВАННЫХ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ

***Александрова Ю.И.*[1], Шурпик Д.Н.[1], Зеленихин П.В.[2], Стойков И.И.[1]**

[1] Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18, a.julia.1996@mail.ru
[2] Институт фундаментальной медицины и биологии,
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

Глобальная угроза распространения мультирезистентных штаммов бактерий, а также острая потребность в высокоизбирательных противоопухолевых препаратах диктуют необходимость поиска инновационных супрамолекулярных решений. В качестве макроциклических компонентов таких систем активно изучаются пиллар[n]арены вследствие легкости их синтеза и функционализации, высоких выходов целевых соединений и низкой токсичности. Наличие пиллар[n]арена в материалах способствует контролируемой самосборке, повышению биодоступности, водорастворимости и пролонгации действия лекарственного препарата.

Была синтезирована серия перзамещенных водорастворимых производных пиллар[5]арена, содержащих тиогликозидные и тиопуриновые фрагменты. Структура синтезированных макроциклов была подтверждена комплексом современных физических методов. Флуоресцентной и электронной спектроскопией, инжекционной микрокалориметрей и молекулярным докингом было изучено взаимодействие макроциклов с ципрофлоксацином, фторпиримидиновыми противоопухолевыми препаратами и протеазой (субтилизин). Методами электронной микроскопии и ДРС для синтезированных пиллар[5]аренов была показана самосборка в ассоциаты в водно-буферных системах. Исследуемый тиогликозидный пиллар[5]арен оказался не цитотоксичным, а его комбинированное действие с ципрофлоксацином на резистентный штамм *K. pneumoniae* повышало активность антибиотика вдвое. При этом трехкомпонентная система (тиопуриновый пиллар[5]арен/субтилизин/5-фторурацил) усиливала ферментативную активность протеазы на 220% и селективно воздействовала на клетки эпидермальной карциномы (A431).

Полученные результаты открывают возможности применения полифункциональных пиллар[5]аренов в разработке таргетных антибактериальных и противоопухолевых систем нового поколения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №25-73-00190.

ФИЗИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ НАТИВНОГО И ВЫДЕЛЕННОГО КОЛЛОИДА ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

***Гаврюшина М.С.*[1,2], Гудкова В.Р.[1,2], Ширшин Е.А.[1,2], Урусова Л.С.[1,2], Пачуашвили Н.В.[2]**

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *НМИЦ эндокринологии имени академика И.И. Дедова, Москва, Россия*
msergeevna31415@gmail.com

Тиреоглобулин (ТГ), основной белковый компонент коллоида, существует в растворимой форме и в виде компактных нерастворимых глобул, обнаруженных на срезах щитовидной железы человека и мыши [1]. Их стабилизацию связывают с ковалентными, в том числе дисульфидными, сшивками [3]. В экспериментах in vitro ТГ образует жидкоподобные конденсаты, со временем приобретающие гелеподобные свойства [2]. Однако подвижность нативного коллоида в свежей ткани и после выделения ранее не сопоставляли. Ее связь с эндогенной флуоресценцией также не установлена.

Цель работы — сопоставить физическое состояние и спектральные свойства нативного и выделенного коллоида щитовидной железы человека. Нативный коллоид исследовали в фолликулах свежей ткани, выделенный получали после инкубации ткани в диссоциирующем растворе с коллагеназой II. Молекулярную подвижность оценивали методом FRAP с определением времени восстановления τ по одноэкспоненциальной аппроксимации. Спектры регистрировали методами конфокальной микроскопии и спектрофлуориметрии.

По данным FRAP к концу наблюдения нормированная интенсивность достигала около 73% исходного уровня для нативного коллоида (τ = 52,1 с), 40% для гранулярных структур (τ= 73,7 с) и 21% для выделенного коллоида (τ = 54,6 с). Это указывает на значительную мобильную фракцию и преимущественно жидкое состояние нативного коллоида, тогда как выделенный коллоид характеризуется малой мобильной фракцией и преимущественно малоподвижным состоянием. Нативный и выделенный коллоид различались также по спектрам эндогенной флуоресценции.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о различии физического состояния нативного коллоида и исследованной выделенной фракции: в нативном коллоиде преобладает жидкая фаза, тогда как выделенная фракция характеризуется меньшей молекулярной подвижностью и иными спектральными свойствами.

Список использованной литературы

1. Gérard A.-C. et al. Evidence for processing of compact insoluble thyroglobulin globules in relation with follicular cell functional activity in the human and the mouse thyroid // Eur. J. Endocrinol. 2004. Vol. 150. P. 73–80.
2. Brix K. et al. Thyroglobulin storage, processing and degradation // The Thyroid and Its Diseases. Springer, 2019. P. 25–48.
3. Yao Y. et al. Extracellular phase separation mediates storage and release of thyroglobulin in the thyroid follicular lumen // Commun. Biol. 2025. DOI: 10.1038/s42003-025-07909-z.

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОКСИДАТИВНОГО ГЕМОЛИЗА ЭРИТРОЦИТОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РАДИКАЛЬНЫХ ИНИЦИАТОРОВ И АНТИРАДИКАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ПЕРОКСИДНОГО ОКИСЛЕНИЯ ЛИПИДОВ

Соколова Е.М., Психа Б.Л., Нешев Н.И.

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, sem89@icp.ac.ru

Поиск и исследование веществ, обладающих антиоксидантными свойствами, и последующая разработка на их основе фармакологических препаратов до настоящего времени продолжает оставаться одним из базовых направлений химической биологии и медицинской химии. Для оценки антиоксидантной активности природных и синтетических соединений часто используются эритроциты, в мембране которых предварительно индуцируют окислительный процесс с помощью того или иного инициатора, приводящий к гемолизу эритроцитов [1]. При этом механизмы взаимодействия инициаторов и ингибиторов окисления с эритроцитом как сложной клеточной системой остаются во многом не изученными, что затрудняет анализ результатов экспериментальных исследований в данной области.

Были изучены кинетические закономерности окислительного гемолиза 0,2%-ной суспензии эритроцитов мыши под действием инициаторов окисления ААРН, пероксида водорода (HP), гидропероксида кумола (Cumyl-OOH). *трет*-бутилгидропероксида (*t*-BuOOH) и ААРН. HP и Cumyl-OOH вызывали гемолиз эритроцитов в широком диапазоне концентраций без выраженной концентрационной зависимости, что может свидетельствовать о многофакторном характере гемолиза. Тогда как гемолитическая активность ААРН и t-BuOOH была концентрационнозависимой, в связи с чем они были выбраны для дальнейших исследований в качестве инициаторов оксидативного гемолиза. В качестве ингибиторов индуцированного гемолиза эритроцитов использовали известные антиоксиданты фенозан калия, гидрохлорид 6-метил-2-этил-3-гидроксипиридина (эпигид) и нироксильный радикал ТЕМПОЛ. Установлено, что все исследуемые соединения вызывали увеличение периода индукции гемолиза (Δt), как при ААРН-, так и при *t*-BuOOH-зависимом инициировании, что качественно подтверждает их антиоксидантные свойства. Количественный анализ антиоксидантного эффекта проводили путем аппроксимации экспериментальных значений степенными зависимостями $\Delta t = aC^b$. Были выявлены различия в отклике гемолитической системы на действие антиоксидантов, связанные с особенностями инициирования гемолитического процесса в эритроцитах.

Работа выполнена в рамках госзадания №124020500019-2

Список использованной литературы

1. Соколова и др. //Биофизика. 2023. Т. 68. №4. С. 705-710

НПВП КАК ИНГИБИТОРЫ ПРОСТАГЛАНДИН-Н-СИНТАЗЫ: ОСНОВНЫЕ МЕТОДЫ ДЕТЕКЦИИ И КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Кривошей А.В.*[1], *Мухаметова Л.И., Вржещ П.В., Еремин С.А.

ФГБОУ ВО Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, г. Москва

krivoshey.alexr@gmail.com

Нестероидные противовоспалительные препараты (НПВП) являются одной из наиболее востребованных групп лекарственных средств. Действие этих препаратов обусловлено ингибированием одного и того же фермента — простагландин-Н-синтазы (PGHS; другое название — циклооксигеназа). Однако специфика их применения может существенно различаться, как по форме выпуска (таблетки, уколы, мази и пр.), так и по фармакологическим эффектам (противовоспалительные, обезболивающие, жаропонижающие). В связи с этим, необходимо более подробное исследование кинетических свойств НПВП, а также разработка универсальных методов детекции этих препаратов.

В настоящей работе исследовали ингибирующие свойства различных НПВП с помощью измерения циклооксигеназной реакции фермента PGHS-1, полученного из везикулярных желез барана. Реакцию детектировали амперометрическим методом по изменению концентрации растворенного кислорода. Для всех ингибиторов продемонстрировано медленное обратимое связывание с ферментом PGHS и определены кинетические константы. На примере напроксена, ибупрофена и индометацина показано, что если концентрация ингибитора гораздо больше концентрации фермента, то, кроме медленной стадии, наблюдается и быстрая стадия ингибирования. В перспективе, НПВП можно детектировать не только по изменению активности фермента при добавлении ингибитора, но и по непосредственному измерению концентрации различных форм ингибиторов, например, с помощью поляризационного флуоресцентного иммуноанализа (ПФИА). Данный метод применяли ранее для определения таких препаратов, как диклофенак [1] и флуниксин [2].

Работа выполнена с использованием оборудования, приобретенного за счет средств Программы развития Московского университета.

Список используемой литературы

1. Raysyan A. et al. Fluorescence polarization immunoassay for the determination of diclofenac in wastewater // *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2021, № 4. P. 999-1007.
2. Арутюнян Д.А. и др. Применение поляризационного флуоресцентного иммуноанализа для определения флуниксина в молоке // *Журнал аналитической химии*, 2025, № 6. С. 592-603.

4-α-ГАЛОГЕНАЦИЛСИДНОНЫ: СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

***Соколов С.С.*[1,2], Егорова К.С.[3], Калганова Н.В.[2], Черепанов И.А.[2]**

[1] *Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, sokolov_st1@mail.ru*

[2] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва*

[3] *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва*

Сидноны относятся к классу мезоионных 1,2,3-оксадиазолов и обладают широким спектром биологической активности, включая антимикробное и фунгицидное действие, что позволяет рассматривать их в качестве перспективных антисептических агентов [1]. В ходе данной работы были разработаны и оптимизированы методы получения 4-α-галогенацилсиднонов, а также исследована их цитотоксичность методом MTS. Оказалось, что для α-бромзамещенных производных цитотоксичность возрастает с увеличением липофильности ацильного фрагмента. Таким образом, наиболее низкие значения выживаемости клеток линии HEK293T были получены для 3-фенил-4-α-бромбутирилсиднона и 3-фенил-4-α-бром-(2-метилпропаноил)сиднона — 0,69 и 0,89% соответственно. Стоит отметить, что α-хлорацетилсидноны **1** также проявили выраженную цитотоксичность, при этом выживаемость клеток составила 0,30 — 2,11%. Для данного ряда соединений была определена антимикробная и фунгицидная активность. Показано, что несмотря на невысокие значения антимикробной активности, минимальная ингибирующая концентрация 3-(4-метоксифенил)-4-α-хлорацетилсиднона **1б** и 3-метил-4-α-хлорацетилсиднона **1в** по отношению к дрожжеподобным грибам *C. parapsilosis* оказалась ниже, чем у противогрибкового препарата амфотерицина В (см. рисунок 1).

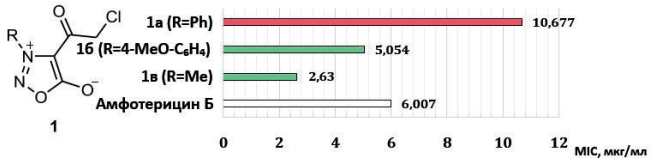


Рисунок 1. Минимальные ингибирующие концентрации 4-α-хлорацетилсиднонов в отношении C. parapsilosis в сравнении с амфотерицином B.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-63-00002) с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН.

Список используемой литературы

1. Stebletsova I.A., Larin A.A., Fershtat L.L. Recent advances in the synthesis of pharmacologically active 1,2,3-, 1,2,4-, and 1,2,5-oxadiazole-based lead compounds // Russian Chemical Reviews, 2025, Vol. 94, № 10. RCR5185.

ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК БЕЛКА ЛИЗОЦИМА

***Аристов А.Е.*[1,2], *Астафьев А.А.*[1,2]**

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, aristov.ae@phystech.edu*

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

Фемтосекундное лазерное излучение является перспективным способом получения новых структур благодаря возможности реализации нелинейного поглощения в прозрачных материалах. Это приводит к локальным изменениям с малым термическим и фотовоздействиями на структуры и запускает фотохимические реакции, происходящие при возбуждении высоколежащих состояний [1]. Однако модификации свойств белков данным способом практически не рассматриваются, несмотря на то что их структурирование имеет значительный потенциал за счет доступности сырья, малой токсичности, высокой биосовместимости и биоразлагаемости.

В данной работе на примере тонких пленок белка лизоцима куриного яйца, содержащего весомое число ароматических аминокислот, рассматривались изменения структуры и оптических свойств (поглощения и люминесценции) белка под воздействием фемтосекундного излучения. Для модификации использовался лазер с длиной волны 1033 нм с генерацией третьей гармоники (344-345 нм).

В конечном итоге, нами было продемонстрировано формирование люминесцентных (в том числе и в видимом диапазоне) микроструктур в пленке лизоцима. Описаны поглощение и люминесцентные свойства модифицированного белка. Показано существование двух основных режимов воздействия лазера на белок: фотохимического с постепенным усилением люминесценции, образованием углублений в пленке, а также практически отсутствующим нагревом, и термического, для которого характерны ослабление люминесценции, набухание белка и рост температуры около ста градусов. За счет этого яркостью и цветом (спектрами) флуоресценции можно управлять вариацией мощности излучения и его длительности. Выявлен характер химических и структурных изменений белков при лазерном воздействии: разрыв амидных связей, окисление, деградация ароматических оснований, формирование бета-складок.

Список используемой литературы

1. Gao L., Zhang Q., Gu M. Femtosecond laser micro/nano processing: from fundamental to applications // *International Journal of Extreme Manufacturing*, 2025, Т. 7, №. 2. С. 022010.

ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРХБЫСТРОГО ДЕТЕКТОРА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕЦИФИЧНОСТИ ВРЕМЯ-РАЗРЕШЕННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БИОИМИДЖИНГА

Афанасьев Я.В.[2], Горбунова И.А.[1], Никонова Е.Е.[1], Можеров А.М.[1], Кузнецова Д.С.[1], Щеславский В.И.[3], Ширманова М.В.[1], Ширшин Е.А.[1,2], Тимашев П.С.[1]

[1] Институт регенеративной медицины, Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, Москва, Россия
[2] Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва.
[3] Институт экспериментальной онкологии и биомедицинских технологий, Приволжский исследовательский медицинский университет, Нижний Новгород, Россия

Флуоресцентная время-разрешенная микроскопия (FLIM) — эффективный метод неинвазивной диагностики метаболического статуса живых клеток по автофлуоресценции эндогенных коферментов NADH и NADPH. Однако разделение их спектрально близких сигналов, интерпретация многокомпонентных затуханий и высокая точность определения соотношения свободной и связанной форм остаются сложной задачей [1, 2].

В настоящей работе предложено использовать быстрый детектор с временным разрешением ~15 пс для регистрации FLIM-изображений. Проведены сравнительные исследования время-разрешенной флуоресценции NADH и NADPH в растворах (в свободном состоянии и в комплексах с ферментами IDH и MDH), а также в клетках линии HEK293 в параллельном режиме на быстром и стандартном детекторах.

Использование быстрого детектора позволило впервые экспериментально разрешить два времени жизни свободного NADH не только в гомогенном растворе и в присутствии ферментов IDH и MDH, но и непосредственно в живых клетках. Кроме того, выявлены различия в эффективности связывания NADH и NADPH с ферментом IDH. Это существенно повысило точность определения относительных концентраций форм кофермента и расчета метаболического индекса клеток, открывая новые возможности для изучения клеточного метаболизма.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-79-10362.

Список используемой литературы

1. Gorbunova I.A. et al. Two-Photon Excited Fluorescence of NADH-ADH Complex // Biomolecules. 2023. V. 13, No. 2. P. 256.
2. Gorbunova I.A. et al. TPEF Dynamics in NADH // J. Phys. Chem. B. 2020. V. 124, No. 47. P. 10682–10697.

ПОЛЯРИЗАЦИОННО-РАЗРЕШЕННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Квасов Е.В. [1], ***Горбунова И.А.*** [2], ***Белтюков Я.М.*** [3], ***Сасин М.Е.*** [3], ***Якимов Б.П.*** [1], ***Перминова И.В.*** [4], ***Тимашев П.С.*** [2,5], ***Ширшин Е.А.*** [1,2]

[1] *Физический факультет, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, egorkvasov2103@gmail.com*
[2] *Институт регенеративной медицины, Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Москва*
[3] *Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*
[4] *Химический факультет, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва*
[5] *Кафедра биологической химии, Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Москва*

Гетерогенные молекулярные системы участвуют в процессах фотостарения, окислительного стресса и накопления метаболических продуктов в клетках и тканях. Для них характерны широкое бесструктурное поглощение в УФ-видимой области, широкие полосы флуоресценции, зависимость спектра от длины волны возбуждения и красный сдвиг эмиссии. Установление природы этих свойств затруднено вследствие невозможности выделения отдельных хромофоров стандартными спектроскопическими методами [1, 2].

В данной работе показано, что анализ анизотропии и времени деполяризации флуоресценции гуминовых веществ, синтетического меланина и окисленного триптофана указывает на суперпозицию невзаимодействующих флуоресцирующих компонентов. В частности, было получено, что анизотропия и времена деполяризации флуоресценции зависят от длины волны возбуждения, диапазона наблюдения флуоресценции и молекулярных фракций исследуемых гетерогенных систем. Анализ этих параметров позволяет предположить, что хромофоры, входящие в состав гуминовых веществ, представляют собой ароматические гетероциклы с высокой степенью структурной симметрии. Полученные результаты создают основу для установления физических механизмов формирования оптического отклика природных гетерогенных молекулярных систем.

Список используемой литературы

1. Yakimov B.P., Rubekina A.A., Budylin G.S. и др. Ultrafast Energy Transfer Determines the Formation of Fluorescence in DOM and Humic Substances // Environmental Science & Technology, 2021, 55(15). С. 10365–10377.
2. McKay G. Emerging Investigator Series: Critical Review of Photophysical Models for the Optical and Photochemical Properties of Dissolved Organic Matter // Environmental Science: Processes & Impacts, 2020, 22(5). С. 1139–1165.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РЕАЛИЗАЦИИ МАГНИТОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОДХОДА В НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Никитин А.А.

Лаборатория Биомедицинские наноматериалы, Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва
Отдел медицинских нанобиотехнологий, Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н. И. Пирогова, Москва

Разработка эффективного и универсального метода передачи энергии единичным биомолекулам с использованием различных наносистем является одним из самых передовых направлений науки. Данная работа демонстрирует методологические основные создания и тестирования экспериментальной системы на основе олигонулкеотидных-микроматриц, которая впервые позволила количественно оценить энергию магнитомеханического эффекта, опосредованного отдельными магнитными наночастицами с известными параметрами в режиме квазистатических нагрузок (<10 пН·с$^{-1}$). Важно отметить, что в таком квазистатическом режиме тепловые флуктуации ($k_BT \approx 4{,}1 \cdot 10^{21}$ Дж или ≈ 4,1 пН·нм) становятся существенными и ими нельзя пренебрегать при оценке минимальных механических сил, передаваемых наночастицей. Было показано, что единичные магнитные наночастицы размером от 5 до 20 нм способны передавать энергию порядка 90 ккал/моль связанным с ней молекулам, что приводит к нетермической диссоциации коротких двухцепочечных олигонуклеотидов и одного из самых прочных комплексов биотин-стрептавидин. При этом величина силы, действующей на биомолекулы со стороны наночастицы, составляет менее 2 пН, что на несколько порядков меньше характерных сил отрыва в экспериментах с использованием АСМ. Даже в отсутствие внешнего магнитного поля наночастицы выступают в роли «теплового паруса», снижая стабильность межмолекулярных комплексов и приводя к их самопроизвольной диссоциации. Максимальный магнитомеханический эффект может быть достигнут для наночастиц с толщиной немагнитной оболочки, сопоставимой с размером их магнитного ядра, тогда как при большей толщине оболочки выявить дополнительное влияние магнитных полей становится невозможным. В заключении, методом двухэлектродной фиксации потенциала было показано, что магнитные наночастицы, конъюгированные с харибдотоксином, способны оказывать селективное воздействие на потенциал-чувствительные калиевые каналы в зависимости от типа прикладываемых внешних магнитных полей. Полученные результаты позволяют проводить точный подбор свойств магнитных наночастиц для решения конкретных магнитомеханических задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-00100)

НАПРАВЛЕННАЯ САМОСБОРКА СФЕРОИДОВ МЕТОДОМ МИКРОПАТТЕРНИНГА: ГИБРИДНАЯ СИСТЕМА GPOSS-PDMS / DMAEMA-EDMA

***Шарапенков Э.Г.*[1], Мамонова О.В.[1], Карцев Д.Д.[1], Прилепский А.Ю.[1]**

[1] Национальный исследовательский университет ИТМО, центр молекулярных и биологических технологий, Санкт-Петербург, egsharapenkov@itmo.ru

Трехмерные клеточные модели, в частности сфероиды, широко применяются в исследованиях, поскольку воспроизводят сложную пространственную организацию клеток *in vivo*. Исследования показывают, что свойства таких моделей зависят от способа их получения, что может определять их клеточную организацию, функциональную активность и, в конечном счете, пригодность для решения конкретных экспериментальных вопросов [1–3]. Поэтому разработка новых методов создания сфероидов остается актуальной задачей.

В отличие от традиционных подходов, основанных на полном предотвращении клеточной адгезии, представленный метод сохраняет прикрепление клеток к поверхности микроструктурированного чипа и обеспечивает возможность их перемещения. Чип представляет собой массив круглых пористых доменов из сополимера 2-диметиламиноэтилметакрилата и этиленгликольдиметакрилата (DMAEMA–EDMA), который окружен омнифобным фоном из полидиметилсилоксана, модифицированного октаглицидил полиэдрическим олигомерным силсесквиоксаном (GPOSS-PDMS). Различия в шероховатости и поверхностной энергии способствуют миграции клеток с омнифобного фона в пористые домены, где они агрегируют и формируют сфероиды. Способность к образованию сфероидов на разработанной платформе была исследована для 14 клеточных культур. В результате все линии были разделены на 3 группы: в первой сфероиды образовывались, в среднем, за четыре дня, во второй — за девять дней, а в третьей формирования сфероидов не отмечено. Для клеток C2C12 показано, что исходная концентрация клеток влияет на скорость формирования, размер и округлость сфероидов, а изменение размера пористых доменов позволяет регулировать диаметр сфероидов в диапазоне от 62,2 ± 9,6 до 164,0 ± 16,6 мкм. Для исследования свойств сфероидов из линии C2C12, полученных на чипе, их сравнивали со сфероидами, выращенными в агарозных лунках. Парафиновые срезы выявили различия в пространственной организации клеток, а вестерн-блоттинг показал повышенную экспрессию N-кадгерина и интегрина-1β в сфероидах, полученных на чипе.

Работа выполнена в рамках государственного задания ПТНИ FSER 2025-0017.

Список используемой литературы

1. Raghavan S. et al. Comparative analysis of tumor spheroid generation techniques for differential in vitro drug toxicity //Oncotarget. — 2016. — Т. 7. — №. 13. — С. 16948.
2. Guillaume L. et al. Characterization of the physical properties of tumor-derived spheroids reveals critical insights for pre-clinical studies //Scientific reports. — 2019. — Т. 9. — №. 1. — С. 6597.
3. Ko E. et al. Engineering 3D cortical spheroids for an in vitro ischemic stroke model //ACS Biomaterials Science & Engineering. — 2021. — Т. 7. — №. 8. — С. 3845-3860.

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ПЛАТФОРМА АНАЛИЗА БЕЛОК-БЕЛКОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ИММУНОДИАГНОСТИЧЕСКИХ И ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ

Подлесных С.В.[1,2]*, Шаповал А.И. [2]

[1]ФГБУ «НМИЦ АГП им. В.И. Кулакова» Минздрава России, Москва, stepanpodlesnykh@gmail.com

[2]ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет», Барнаул

Современные биомедицинские исследования изменились с развитием постгеномных технологий. Секвенирование нового поколения (NGS) и микрочипы, стали высокопроизводительными инструментами для изучения генома, протеома. Пептидные микрочипы могут обеспечить раннее профилирование репертуара циркулирующих антител (изучение иммуносигнатуры онкологических, инфекционных, аутоиммунных, нейродегенеративных и аллергических заболеваний) и поиск неоантигенов, а также оценку белок-белковых взаимодействий при разработке иммунотерапии. Молекулы контроля иммунитета (МКИ), например, комплексы B7-1/B7-2/CTLA-4 и PD-L1/PD-L2/PD-1, регулируют полярность, силу и завершение иммунного ответа, это используют и опухолевые клетки, уклоняясь от иммунитета. Против МКИ используют моноклональные антитела (мАТ) и это повышает выживаемость, но в клинике они имеют ряд недостатков и нежелательные реакции, альтернатива — пептиды.

Цель — исследование репертуара циркулирующих антител плазмы крови пациентов с онкологическими (рак молочной железы), а также изучение белок-белковых взаимодействий, на примере МКИ (CTLA-4 и PD-1), с помощью пептидных микрочипов.

В этом исследовании микрочипы (330 тыс. пептидов со случайными аминокислотными последовательностями) были использованы для изучения репертуара антител в 81 образце плазмы крови женщин 40-60 лет с диагнозом РМЖ (C50, TI-II) и контроль. Также, с помощью микрочипов проведен отбор пептидов, связывающихся с МКИ (белки CTLA-4 и PD-1), проведена оценка методом иммуноферментного анализа.

Мы оценивали перспективы платформы на основе пептидных микрочипов. На старте исследования выявлено, что в плазме крови пациентов с диагнозом РМЖ могут быть обнаружены антитела (иммуносигнатуры). Они взаимодействуют с 119 комбинаторными пептидами (мимотопами, неоантигенами). Были определены частые мотивы аминокислот в пептидах для группы с РМЖ. На следующем этапе установлено, что циркулирующие антитела пациентов при различных молекулярно-биологических подтипах РМЖ имеют взаимодействие с разными пептидами, и смешанными группами пептидов — 634 шт. Они специфически взаимодействуют

с антителами пациентов, имеющих разные подтипы РМЖ. Были выявлены и смешанные подтипы РМЖ. Обнаружены мотивы в пептидах подтипов РМЖ. В базе PDB выявлены частичные гомологии с опухолеассоциированными белками и их экспрессией в опухолях. При оценке белок-белковых комплексов, выявлены 350 пептидов, которые взаимодействуют с CTLA-4Fc, B7-1, B7-2, отобраны 19 пептидов и для анализа синтезированы 8 пептидов. Используя ИФА, была подтверждена специфичность взаимодействия пептидов с белками, при этом высокий сигнал выявлен для p339, p344, p345, p346. Далее построены модели комплекса «пептид-белок». Конформация пептида p344 оказалась энергетически оптимальной вблизи петли ^{99}MYPPPY^{104} (отвечает за связывание CTLA-4 с B7-1) молекулы CTLA-4. Далее была проведена инкубация CTLA-4Fc в присутствии p344 снизила связывание CTLA-4 с B7-1 т.е. произошла блокада взаимодействия CTLA-4 и B7-1. Запланированы следующие этапы.

Таким образом, пептидные микрочипы имеют потенциал мощного инструмента для изучения репертуара циркулирующих антител у здоровых и больных людей, ранней диагностике молекулярных изменений, поиска неоантигенов, а также при оценке белок-белковых взаимодействий для исследования и разработки новых лекарственных средств.

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ХЛОРИНА e_6 С Е-ПОЛИЛИЗИНОМ НА ГЕНЕРАЦИЮ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА И ФОТОИНАКТИВАЦИЮ ПАТОГЕННЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ

***Ляпин Д.С.*[1,2], *Кустов А.В.*[1], *Березин Д.Б.*[2], *Калягин А.А.*[1], *Шухто О.В.*[2], *Юров М.Ю.*[1]**

[1] *ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия, denislyapin2004@mail.ru*

[2] *ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново, Россия*

Анионные фотосенсибилизаторы (ФС) на основе хлорина e_6 («Фотодитазин», «Фотолон», «Радахлорин») широко используются в противоопухолевой фотодинамической терапии (ФДТ). Их применение в антимикробной фотодинамической терапии (аФДТ) рассматривается как перспективная стратегия борьбы с антибиотикорезистентными патогенами. Однако данные ФС проявляют ограниченную активность в отношении Грам (-) бактерий вследствие электростатического отталкивания между отрицательно заряженными молекулами ФС и внешней липополисахаридной мембраной. Добавление небольшого количества биосовместимого поликатионного полимера ε-полилизина (ПЛ) повышает сродство ФС к бактериальной мембране и, соответственно, эффективность аФДТ.

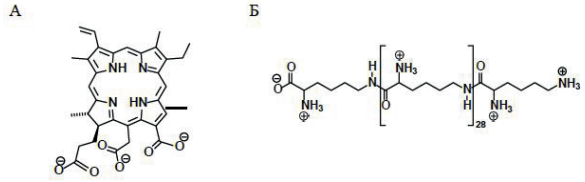


Рисунок 1. Структуры молекул хлорина e_6 (А) и ε-полилизина N~30 (Б) в воде.

Проведенные нами исследования указывают на сильное взаимодействие между хлорином e_6 и ПЛ. По данным спектрофотометрического титрования оптическая плотность в Q-полосе хлорина e_6 выходит на плато при мольном отношении ПЛ:ФС >10. Анализ зависимости анизотропии флуоресценции от концентрации ε-полилизина позволяет определить величину константы связывания, равную ~9×10^3 кг/моль. Генерация синглетного кислорода подавляется в разбавленных растворах ПЛ в 2-5 раз, что связано как с повышением кислотности среды, так и, прежде всего, с взаимодействием между макроциклом и полярными группами полимера. Тем не менее повышенное сродство комплекса ФС-ПЛ к внешней мембране грамотрицательных бактерий обеспечивает усиление фотонактивации микроорганизмов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ №25-23-00037.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТИОЛСУЛЬФАТНОГО НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ДИАЗОЛАМИ И ИМИДАЗОЛ-СОДЕРЖАЩИМИ БИОМОЛЕКУЛАМИ

***Руина К.С.*[1], Новикова В.О.[1], Покидова О.В. [1], Санина Н.А.[1,2]**

[1] *Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, ruinaks@icp.ac.ru*

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

Нитрозильные комплексы железа (НКЖ) с серосодержащими лигандами представляют собой перспективный класс соединений[1], способных выступать в роли доноров оксида азота (II) в биологических системах. Исследование механизмов взаимодействия НКЖ с азотистыми гетероциклами и их производными необходимо для понимания путей стабилизации и деградации комплеков в условиях живого организма.

В данной работе спектральными методами анализа и с помощью реакции Грисса было исследовано взаимодействие тиосульфатного НКЖ с имидазолом, пиразолом и природными имидазол-содержащими соединениями. Установлено, что природа азотсодержащего лиганда оказывает существенное влияние на стабильность нитрозильного фрагмента комплекса.

Сравнительный анализ систем в аэробных и анаэробных условиях выявил существенные различия в кинетике их распада. Во всех случаях наблюдались изменения в спектрах поглощения, свидетельствующие о координации диазолов и их производных по атому железа. В анаэробных растворах распад НКЖ протекает значительно медленнее, чем в присутсвии кислорода, что, в целом, характерно для ранее изученных НКЖ [2]. Установлено, что продукты, образующиеся с ансерином, карнозином, гистидином и гистамином более стабильны по сравнению с имидазолом и пиразолом, что, по-видимому, связано с формированием дополнительных координационных связей с участием функциональных групп боковых цепей и пептидного остова.

Полученные данные расширяют фундаментальные представления о реакциях тиосульфатного НКЖ в биологически значимых средах, позволяя прогнозировать возможные пути его биотрансформации *in vivo*.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, государственное задание № 124020500019-2.

Список используемой литературы

1. Алдошин С.М., Санина Н.А., Функц. нитрозильные комплексы железа — новый класс доноров монооксида азота для лечения соц. знач. заболеваний//*Фунд. науки в медицине,* 2015, т.1, 72-102
2. Pokidova O.V. Decomposition of the binuclear nitrosyl iron complex with thiosulfate ligands in aqueous solutions: Exp. and theor. study//*Inorganica Chimica Acta,*2020, 502, 119338-119369

СОЗДАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО КОМПЛЕКСА ХЛОРОФИЛЛ-СОДЕРЖАЩЕГО ЭКСТРАКТА КРАПИВЫ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

***Грузнова О.А.*[1,2], *Грузнов Д.В.*[2], *Лобанов А.В.*[3]**

[1] ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, gruznova_olga@bk.ru

[2] ВНИИВСГЭ — филиал ФГБНУ ФНЦ ВИЭВ РАН, Москва

[3] ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет», Москва

Сдерживание супербактерий, устойчивых к лекарственным препаратам в медицине и ветеринарии, — ключевой приоритет концепции One Health [1]. Наряду с другими серьезными заболеваниями резистентные микроорганизмы способны вызывать раневые инфекции. Особую опасность представляет золотистый стафилококк, так как является оппортунистическим патогеном [2]. Кроме того, раневой процесс может осложняться присоединением *Escherichia coli* и спорообразующих аэробов *Bacillus cereus*. Для эффективной терапии инфицированных ран разрабатываются различные подходы. В частности, отличных результатов удается достичь с помощью применения природных и синтетических тетрапиррольных соединений [3]. В данной работе был оценен антимикробный потенциал хлорофилл-содержащего крапивного экстракта (Chl), включенного в биосовместимый полимер поли-*N*-винилпирролидон (PVP). Было установлено, что минимально ингибирующие концентарции (МИКи) Chl-PVP при воздействии на *S. aureus*, MRSA, *E. coli*, MDR *E.coli* и *B. cereus* составили 12.5, 15.63, 40.0, 21.88 и 5.41 мкг/мл, соответственно. Облучение (16.2 Дж/см^2, λ = 660 нм, 30 мин) увеличивало эффект в среднем на 52.5%. Полного уничтожения перечисленных микроорганизмов удавалось достичь при применении >2×МИК препарата. Обработка инфицированных MRSA ран мышей линии Balb/c полимерной формой Chl показала терапевтический эффект, сопоставимый с хлорамфениколом, и обеспечила более быструю реэпителизацию.

Список используемой литературы

1. Al-Khalaifah H., Rahman M.H. et al. A One-Health Perspective of Antimicrobial Resistance (AMR): Human, Animals and Environmental Health // Life (Basel), 2025, V. 15(10). P. 1598
2. Howden B.P., Giulieri S.G. et al. *Staphylococcus aureus* host interactions and adaptation // Nature Reviews Microbiology, 2023, V. 21. P. 380-395.
3. Daramola O.B., George R.Ch. et al. Comparative screening of porphyrins and chitosan-porphyrin composites as potential antibacterial photodynamic inactivation photosensitizers against multidrug-resistant ESKAPE pathogens // Biomedical Materials Science, 2026, V. 1(6). P. 1-15.

ОСТЕОПЛАСТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(Е-КАПРОЛАКТОНА) И ЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ

Соломаха О.А., Никифоров А.А., Гофман И.В., Коржикова-Влах Е.Г.

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург, solomanya@bk.ru

Разработка новых остеопластических материалов является критически важной задачей современного медицинского материаловедения. Одним из наиболее перспективных направлений является создание материалов на основе биоразлагаемых алифатических сложных полиэфиров (полилактид, поликапролактон, и др.). Последние лишены собственной биоактивности, что компенсируется введением наполнителей и получением композитов на их основе. В этой связи значительный интерес вызывают наночастицы диоксида церия (CeO_2). Они регулируют способны регулировать окислительный стресс и стимулировать остеогенную дифференцировку клеток. Сочетание биорезорбируемого каркаса и активной нанодобавки позволяет создать материалы с высокой биосовместимостью и остеогенным потенциалом, что открывает новые возможности для повышения эффективности лечения костных дефектов.

В рамках данной работы получены наноразмерные частицы CeO_2 и частицы CeO_2, модифицированные поли(глутаминовой кислотой) (CeO_2-ПГлу). Функционализация поверхности частиц CeO_2 выбранным анионным полипептидом, дополнительно обеспечит остеокондуктивность получаемых композитов за счет активации процессов минерализации, что выступает ключевым фактором при создании материалов, ориентированных на успешное восстановление костных дефектов. С целью получения CeO_2-ПГлу, предварительно поверхность частиц CeO_2 была силанизирована (3-аминопропил)триэтоксисиланом, с последующим взаимодействием аминогрупп силана с активированными карбоксильными группами ПГлу. Модификация CeO_2-ПГлу была подтверждена методами ИК-спектроскопии, термогравиметрического анализа, динамического и электрофоретического рассеяния света.

Полученные частицы вводили в качестве наполнителя в композиты на основе биодеградируемых полиэфиров, выступающих матричной основой остеопластических материалов. Для оценки влияния частиц на свойства композитов на основе поли(ε-капролактона) были изготовлены образцы, содержащие 0.5, 1, 3 и 5 масс% CeO_2-ПГлу и CeO_2, в форме пленок и трехмерных матриц. Результаты механических испытаний на растяжение и сжатие подтвердили значительный потенциал разработанных частиц в качестве эффективного наполнителя для биодеградируемых полимерных матриц, применяемых в остеопластике.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №26-13-00196).

АМФИФИЛЬНЫЕ КАТИОННЫЕ СОПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ), ПОЛИ(*Е*-КАПРОЛАКТОНА) И ПОЛИАМИНОКИСЛОТ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ СИСТЕМ КОМБИНИРОВАННОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ

***Багаева И.О.*[1], Кулагина А.В.[1], Синицына Е.С.[1,2], Коржикова-Влах Е.Г.[1,2]**

[1] Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия, bagaeva_irina2000@rambler.ru

[2] НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ — ИВС, Санкт-Петербург, Россия

Применяемые подходы лечения онкологических заболеваний, такие как химио- и генная терапии, демонстрируют свою неэффективность, выражающуюся в высокой системной токсичности лекарств, негативном воздействии терапевтических агентов на здоровые клетки, а также быстрой деградации и низкой эффективности трансфекции генетических субстанций *in vivo*. Использование стратегии комбинированной доставки лекарств на основе полимерных наночастиц позволит защитить лекарства от метаболических изменений, а также усилить терапевтическое действие за счет воздействия на различные факторы развития опухоли.

Представляемое исследование посвящено синтезу амфифильных сополимеров на основе поли(этиленгликоля) (ПЭГ), поли(*ε*-капролактона) (ПКЛ) и таких поликатионных фрагментов, как поли(L-орнитин) (ПОрн), поли(L-аргинин) (ПАрг), поли(L-орнитин-*со*-L-аргинин) П(Орн-*со*-Арг) и поли(L-орнитин)-*б*-поли(L-аргинин) (ПОрн-*б*-ПАрг) с целью их дальнейшей апробации в виде наноформ, содержащих одновременно цитостатическую субстанцию диоксадэт и миРНК. Синтез сополимеров проводили посредством полимеризации мономеров с использованием макроинициаторов. В частности, путем полимеризации с раскрытием цикла *ε*-капролактона с участием мПЭГ в качестве макроинициатора был получен диблок-сополимер мПЭГ-*б*-ПКЛ-ОН. Гикдроксильная функция последнего инициировала полимеризацию с раскрытием цикла *N*-КА Orn(Z) с получением триблок-сополимера. С целью синтеза блок-статистического сополимера мПЭГ-*б*-ПКЛ-*б*-П(Орн-*со*-Арг) аминогруппы ПОрн были модифицированы гуанидин-содержащим реагентом. Четыреблок-сополимер мПЭГ-*б*-ПКЛ-*б*-ПОрн-*б*-ПАрг был синтезирован путем полимеризации с раскрытием цикла *N*-КА Arg с использованием триблок-сополимера в качестве макроинициатора.

На основе полученных сополимеров методом наноосаждения были сформированы наночастицы (70-105 нм) с унимодальным распределением и положительным электрокинетическим потенциалом (40 мВ). Также были изучены как однокомпонентные системы цитостатика или модельной миРНК, так и их со-инкапсулированные наноформы. В ходе исследования установлено влияние природы поликатиона на свойства полимерных носителей и их способность инкапсулировать и высвобождать лекарственные субстанции.

Исследования проведены с использованием оборудования Научного парка СПбГУ.

АМФИФИЛЬНЫЕ ПРИВИТЫЕ СОПОЛИМЕРЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ ПАКЛИТАКСЕЛА И МИРНК

***Джужа А.Ю.*[1,2], *Левит М.Л.* [1], *Коржикова-Влах Е.Г.*[1,2]**

[1] *Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург, polinadzhuzha@mail.ru*

[2] *Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург*

Создание полимерных систем доставки лекарств является перспективным подходом для повышения эффективности фармакотерапии. За счет инкапсулирования лекарственных молекул в полимерные нано- и микрочастицы могут быть решены проблемы низкой растворимости некоторых лекарств, что способствует повышению их биодоступности. Кроме того, использование систем доставки лекарств на основе полимерных носителей позволяет обеспечить защиту лекарства от преждевременной инактивации. Среди прочих полимеров для конструирования систем доставки интерес представляют амфифильные полипептиды, гликополимеры и их гибридные сополимеры, структура которых схожа с природными молекулами, а сочетание гидрофобных и положительно заряженных аминокислотных звеньев в цепи позволяет связывать нуклеиновые кислоты и инкапсулировать гидрофобные лекарственные вещества при самоорганизации полимера в водной среде.

В представленной работе с целью получения систем для доставки лекарственных веществ различной природы были синтезированы амфифильные производные гибридных привитых сополимеров. Методом контролируемой радикальной полимеризации с обратимой передачей цепи по механизму присоединения–фрагментации синтезированы аминосодержащие гликополимеры различного состава, использование которых в качестве макроинициаторов полимеризации с раскрытием цикла, а также метода пост-полимеризационной модификации позволило получить привитые сополимеры, содержащие амфифильные полиаминокислотные фрагменты в боковых цепях. Определены составы синтезированных сополимеров и изучены физико-химические характеристики, а также биологические свойства формирующихся полимерных частиц. Получены инкапсулированные формы различных по химической природе лекарственных веществ, а именно, гидрофобного цитостатического препарата паклитаксела и агентов генной терапии (миРНК), и изучены закономерности инкапсулирования и высвобождения лекарственных веществ. Дополнительно исследована *in vitro* биологическая эффективность действия инкапсулированных форм выбранных субстанций.

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ РЕГУЛЯЦИЯ ЗАХВАТА МИКРО-/НАНОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПНИПАМ КЕРАТИНОЦИТАМИ ЧЕЛОВЕКА

***Кардош А.В.*[1], *Нифонтова Г.О.*[1], *Загороднев Е.В.*[1], *Бикмулина П.Ю.*[1], *Березянко И.А.*[2], *Костюк С.В.*[1], *Шпичка А.И.*[1], *Тимашев П.С.*[1,3]**

[1] *Институт регенеративной медицины Научно-технологического парка биомедицины Сеченовского университета, Москва, ankardosh@gmail.com*

[2] *Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Беларусь, Минск*

[3] *Кафедра биологической химии Сеченовского университета, Москва*

Трансдермальная доставка позволяет обеспечить локальное и контролируемое высвобождение лекарственных средств, а также повысить их биодоступность и эффективность. В настоящее время разработаны различные типы носителей для трансдермальной доставки, включая липосомы, неорганические микро- и наночастицы, полимерные мицеллы и гидрогелевые системы. Среди материалов, используемых для создания таких носителей, особый интерес представляет термочувствительный полимер поли(N-изопропилакриламид) (ПНИПАМ). Нижняя критическая температура растворения (НКТР) ПНИПАМ составляет около 32 °C, что близко к температуре поверхности кожи.

Целью настоящей работы являлось исследование взаимодействия микро-/наногелей на основе ПНИПАМ с иммортализованными кератиноцитами человека линии HaCaT. Микро- /наногели формировали методом полимеризации в мини-эмульсии. Один из двух типов частиц дополнительно содержал метоксиполиэтиленгликоль (мПЭГ) в составе полимерной сетки. Для визуализации в клетках частицы метили флуоресцентным красителем Alexa Fluor 488. Микро-/наногели инкубировали с клетками в течение 2, 4, 6 и 16 часов при температурах ниже и выше НКТР — 25 и 37°C соответственно. Интернализацию частиц и их ассоциацию с клеточной мембраной оценивали методом конфокальной микроскопии.

Было установлено, что повышение температуры до 37°C вызывало коллапс полимерной сетки микро-/наногелей, сопровождавшийся изменением их размеров и увеличением механической жесткости. Эти изменения оказывали выраженное влияние на взаимодействие частиц с кератиноцитами: более жесткие частицы поглощались клетками эффективнее. Степень интернализации также зависела от продолжительности инкубации и состава полимерной сетки микро-/наногелей. Полученные результаты подтверждают возможность термомеханического управления взаимодействием микро-/наногелей на основе ПНИПАМ с кератиноцитами человека и перспективность использования данной системы для контролируемой трансдермальной доставки лекарств.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 26-75-10148).

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАСТИТЕЛЬНОГО РУТИНА С ИОНАМИ МАГНИЯ (II)

Гладун Е.А.*[1], Козырев Н.А.[2], Саватейкин Я.М.[2], Ле-Дейген И.М.[2], Клячко Н.Л.[2], Кочиш И.И.[1].

[1] Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии — МВА имени К. И. Скрябина, факультет зоотехнологий и агробизнеса, Москва [2] Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва

Тепловой стресс негативно влияет на физиологическое состояние и продуктивность сельскохозяйственной птицы, в том числе за счет усиления окислительных процессов. В связи с этим актуален поиск природных антиоксидантов, одним из которых является рутин, добываемый из бутонов софоры японской, гречихи и других растений, — флавоноид, обладающий выраженной антиоксидантной активностью, но низкой растворимостью в воде [1]. Перспективным подходом к решению данной проблемы является комплексообразование с биологически значимыми ионами металлов, такими как Mg^{2+}. В связи с этим, получение комплексного соединения растительного рутина с ионами магния представляет интерес для разработки средств, потенциально направленных на снижение последствий теплового стресса у птицы и повышение биодоступности рутина в кормовых добавках. В настоящей работе изучено взаимодействие рутина с ацетатом магния в метаноле и ДМСО. Методом непрерывных вариаций определена стехиометрия комплексных соединений рутина с ионами магния, соответствующая соотношению компонентов 1:1 в обоих растворителях. Условные константы устойчивости комплексов были определены методом спектрофотометрического титрования в УФ-видимой области. Для установления предполагаемых центров связывания рутина с ионами магния проведено исследование методом ИК-спектроскопии Фурье. Спектральные изменения указывают на преимущественное участие 5-гидрокси-4-кето-фрагмента рутина в координации ионов Mg^{2+}. Полученные результаты открывают новые перспективы создания функциональных кормовых добавок, направленных на снижение последствий теплового стресса у птицы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 25-45-02002. Оборудование для проведения исследований (ИК-спектрометр Bruker Tensor 27) приобретено при поддержке Программы Развития МГУ.

Список используемой литературы

1. Tobar-Delgado E., Mejía-España D., Osorio-Mora O., Serna-Cock L. Rutin: Family Farming Products' Extraction Sources, Industrial Applications and Current Trends in Biological Activity Protection. Molecules. 2023. Vol. 28, No. 15. 5864.

ВЛИЯНИЕ N-ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ АМИРИДИНА НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ЕГО КОНЪЮГАТОВ

***Штейнберг Т.С.*[1], *Астахова Т.Ю.*[1,2], *Грищенко М.В.*[3], *Ковалева Н.В.*[1], *Болтнева Н.П.*[1], *Рудакова Е.В.*[1], *Пронкин П.Г.*[2], *Щегольков Е.В.*[3], *Бургарт Я.В.*[3], *Махаева Г.Ф.*[1]**

[1] *Институт физиологически активных веществ ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка*
[2] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва*
[3] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург*
skorniakowat@yandex.ru

Амиридин является отечественным антихолинэстеразным препаратом, применяющимся в терапии различных форм деменций, в частности, болезни Альцгеймера (БА). N-Функционализация амиридина и последующее конъюгирование с другими фармакофорами позволяют получить мультитаргетные препараты с дополнительными полезными свойствами.

Цель работы: выяснение влияния N-функционализации амиридина на биологические свойства его конъюгатов, важные для терапии БА. Синтезированы конъюгаты амиридина и салицилимина/амина с N-ацильным спейсером и проведена сравнительная оценка биологической активности данных конъюгатов с ранее изученными аналогами с N-аминогексаметиленовым спейсером [1].

Показано, что замена N-алкиленового спейсера на N-ацильный приводит к существенному снижению ингибирования бутирилхолинэстеразы (в 35 раз для иминов и в 8 раз для аминов), исчезновению антиацетилхолинэстеразной (АХЭ) активности и утрате способности ингибировать самоагрегацию $A\beta_{42}$. При этом N-ацильная функционализация не влияет на способность блокировать АХЭ-индуцируемую агрегацию β-амилоида и антирадикальную активность. Результаты квантово-химических расчетов и молекулярного докинга показали, что N-ацилирование по внешнему азоту приводит к снижению pK_a амиридина, вследствие чего он практически не протонируется, что приводит к снижению антихолинэстеразной и антиагрегационной активности.

Таким образом, результаты данного исследования подтверждают нашу гипотезу о том, что использование аминоалкиленового спейсера является более перспективной стратегией в создании конъюгатов амиридина как мультитаргетных средств терапии БА.

Исследование поддержано грантом РНФ № 24-63-00016.

Список используемой литературы

1. Makhaeva G.F. et al. Conjugates of amiridine and salicylic derivatives as promising multifunctional CNS agents for potential treatment of Alzheimer's disease // *Archiv der Pharmazie*, 2025, № 1. С. e2400819.

РОЛЬ ЛИГАНДНОЙ АРХИТЕКТУРЫ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА В РЕГУЛЯЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ ПРОГРАММИРУЕМОЙ ГИБЕЛИ КЛЕТОК HEPG2

Терехова А.А.*[1,2], Амозова В.И. [1], Ступина Т.С. [1], Мумятова В.А. [1], Мищенко Д.В. [1], Санина Н.А.[1], Балакина А.А.[1]

[1]Федеральный исследовательский центр Проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка
[2]Московский физико-технический институт, Москва
al-ksana13@mail.ru

Патологические изменения процессов генерации оксида азота (NO) тесно связаны с развитием онкогенеза, что определяет актуальность поиска и разработки эффективных доноров NO. В настоящем исследовании проведено сравнительное изучение биологической активности трех оригинальных НКЖ, различающихся типом серосодержащих лигандов в координационной сфере железа. Исследованы механизмы действия трех структурных типов НКЖ: катионно-нейтрального (1), смешанно-лигандного (2) и анионного биядерного (3). Эксперименты проводили in vitro на модели клеток гепатоцеллюлярной карциномы HepG2. В работе использовали методы проточной цитофлуориметрии, иммунофлуоресценции и РВ-ПЦР. Показано, что пространственная организация и динамическая лабильность лигандного окружения играют определяющую роль в формировании кинетики радикальных процессов. Высокая подвижность лигандов в комплексах 2 и 3 способствует ускоренному высвобождению NO. Возникающие нарушения клеточного гомеостаза приводят к пермеабилизации плазматической мембраны и преимущественной реализации механизма первичного некроза. В отличие от них, комплекс 1 характеризуется более медленной и продолжительной кинетикой генерации NO, что способствует активации молекулярных механизмов, соответствующих апоптотической программе клеточной гибели. Действие комплекса 1 сопровождается активацией цитопротекторной системы Nrf2/HO-1, проявляющейся увеличением ядерной локализации фактора Nrf2 вследствие его фосфорилирования по остатку Ser40 и одновременным снижением содержания белка KEAP1. Наряду с этим комплекс 1 подавляет активность сигнального пути NF-κB, что сопровождается уменьшением уровня антиапоптотического белка XIAP. Полученные данные раскрывают ключевые закономерности переключения внутриклеточных программ выживания опухолевых клеток и создают основу для рационального конструирования металлокомплексных доноров NO с заданным профилем цитотоксического действия.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание № 124020500019-2)

ГЕНЕТИЧЕСКИЕ МОДИФИКАЦИИ СВИНЕЙ, НАПРАВЛЕННЫЕ НА СНИЖЕНИЕ ИММУННОГО ОТТОРЖЕНИЯ ОРГАНОВ ПОСЛЕ КСЕНОТРАНСПЛАНТАЦИИ

Зубкова А.Е.[1], Юдкин Д.В.[1]

[1]Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), ул. Трубецкая 8/2, Москва, Россия, zubkova_a_e@staff.sechenov.ru

Нехватка донорских органов существенно ограничивает возможности современной трансплантологии. Одним из способов решения этой проблемы является ксенотрансплантация. Свиньи считаются наиболее подходящими донорами, но их выраженные иммунологические различия с человеком требуют использования генетически модифицированных животных для снижения риска отторжения трансплантатов.

На сегодняшний день в США и Китае выполнено девять клинических ксенотрансплантаций органов, таких как сердце, почки и печень, от генетически модифицированных свиней. В России ксенотрансплантация только начинает развиваться, одной из первоочередных задач является разработка отечественных генетических вариантов свиней с учетом результатов зарубежных исследований. Целью данной работы является анализ генетических модификаций свиней, использованных для ксенотрансплантаций.

Наиболее важной генетической модификацией свиней является тройной нокаут генов *ggta1*, *cmah* и *b4galnt2* для устранения иммуногенных эпитопов свиней. Для увеличения срока функционирования трансплантата в геном свиней интегрируют иммунорегуляторные гены человека: *CD46*, *CD55*, *TNFAIP3*, *HMOX1*, *CD47*, *THBD* и *PROCR*. Дополнительно инактивируют все копии генов эндогенных ретровирусов для исключения риска передачи инфекций. Для снижения риска гиперплазии трансплантата используют миниатюрные породы свиней без нокаута гена рецептора гормона роста *ghr* [1-2].

Таким образом, комбинация известных генетических модификаций может быть использована для создания новых линий свиней для ксенотрансплантации. Полученные результаты уже применяются при разработке генетически модифицированных фибробластов свиней. Дальнейшее развитие направления потребует взаимодействия исследовательских центров с медицинскими учреждениями.

Работа поддержана программой «Приоритет 2030».

Список использованной литературы:

1. Litvinova I.S., Zubkova A.E., Yudkin D.V. Genetically modified pigs as organ donors: challenges and prospects // *Molecular biology*, 2026, 60(2). P.171-185.
2. Phillips K.G., Aljabban I., Wolbrom D.H. et al. Cardiac xenotransplantation: current state and future directions // *Circulation*, 2025, 152(1). P. 58-73.

ОЦЕНКА ДИНАМИКИ КОНЦЕНТРАЦИИ ЦИРКУЛИРУЮЩЕЙ ОПУХОЛЕВОЙ ДНК У БОЛЬНЫХ ТРОЙНЫМ НЕГАТИВНЫМ РАКОМ МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ НА ФОНЕ НЕОАДЪЮВАНТНОЙ ХИМИОТЕРАПИИ (СЕРИЯ СЛУЧАЕВ)

Мазина П.С.*[1,2], Заварыкина Т.М.[1,2], Руженцева Д.А.[2], Зленко К.А. [2], Ходырев Д.С.[1,2], Дудкина Е.С.[1,2], Жанин И.С.[3], Гольцов А.Ю.[2], Кометова В.В.[2], Колядина И.В.[2,4], Хохлова С.В.[2]

[1] ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, mazina-polina@bk.ru

[2] ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии и перинатологии им. В.И. Кулакова Минздрава России», Москва

[3] ФГАУ «Национальный медицинский исследовательский центр здоровья детей», Минздрава России, Москва

[4] ФГБОУ ДПО РМАНПО Минздрава России, Москва

Тройной негативный подтип РМЖ (ТНРМЖ) — высокоагрессивный вариант заболевания, который характеризуется негативным прогнозом и ограниченными терапевтическими возможностями. Подход на основе точной детекции концентрации циркулирующей опухолевой ДНК (цоДНК), характеризующейся наличием генетических изменений, которые формируются в опухоли в ходе канцерогенеза, позволяет решить ряд методологических проблем, связанных с гетерогенностью опухоли и ее предрасположенностью к изменению биологических характеристик. цоДНК представляется перспективным маркером для персонализации лечения, оценки эффективности терапии и прогноза отдаленных рецидивов. Цель работы — оценить прогностическую значимость динамики цоДНК у больных ТНРМЖ как биомаркера для мониторинга ответа на лечение. В работе рассмотрена серия клинических случаев анализа цоДНК у 5 пациенток с ТНРМЖ II-III стадии. Были собраны образцы опухолевой ткани и цельной крови, плазмы крови на разных этапах неоадъювантной химиотерапии (НАХТ): до лечения (Т0), перед вторым (Т1) курсом 1 блока и перед 2 блоком (Т2) НАХТ, в середине 2 блока (Т2а), перед операцией (Т3) и после (Т4). Проведено полноэкзомное секвенирование парных образцов опухолевой ткани и крови пациенток, биоинформатический анализ для отбора соматических мутаций в опухоли. Для оценки уровня цоДНК проводилась цифровая ПЦР с образцами внеклеточной ДНК из плазмы крови, собранной на разных этапах лечения.

При анализе уровней цоДНК выявлено, что у всех пациенток до НАХТ была зарегистрирована цоДНК. У пациенток без прогрессирования цоДНК в большинстве случаев отсутствовала во время НАХТ и после. У пациентки с отдаленными метастазами цоДНК наблюдалась как во время, так и после НАХТ, а также при выявлении рецидива заболевания.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ ТРАНСКРИПТОВ МАРКЕРНЫХ ГЕНОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

Мазина П.С.*[1], Путляев Е.В.[1], Эпова Е.Ю.[1], Дудкина Е.С.[1], Руженцева Д.А.[2], Бикеев Ю.В.[2], Кометова В.В.[2], Хохлова С.В.[2], Заварыкина Т.М.[1]

[1] ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва

[2] ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии и перинатологии им. В.И. Кулакова Минздрава России», Москва

Разработка новых методологических подходов для определения молекулярно-биологического подтипа рака молочной железы (РМЖ) представляет собой актуальную задачу, с одной стороны, из-за необходимости обязательного его определения для выбора тактики лечения пациентки, с другой стороны, в связи с последними данными о расхождении в точности определения принадлежности опухоли к определенному подтипу при использовании стандартной иммуногистохимической методики и молекулярно-биологического подхода. При этом для валидации новых методов определения подтипа РМЖ на основе анализа экспрессии возникает необходимость аналитического определения количества ключевых маркерных транскриптов.

Цель данной работы заключалась в подборе методического подхода для аналитического определения количества транскриптов ключевых молекулярно-биологических маркеров для молекулярного профилирования РМЖ и оценки диапазона их концентрации в биопсийном материале РМЖ.

В работе использовали образцы биопсии РМЖ, из которых была выделена РНК и проведена обратная транскрипция. С образцами полученной кДНК с помощью цифровой ПЦР был проведен анализ количества транскриптов рецепторов эстрогена (РЭ) и прогестерона (РП), эпидермального фактора роста (HER2) и маркера пролиферации Ki67 и оценка уровня гена домашнего хозяйства B2M в ткани биопсии РМЖ. Для ряда образцов проводилась ПЦР в реальном времени в качестве дополнительного метода оценки относительной экспрессии исследуемых генов.

Был отработан протокол получения абсолютных количественных данных содержания транскриптов основных маркерных генов в ткани биопсии РМЖ. Разработана система пересчета полученных данных в количество вещества (моль) целевых транскриптов в выделенном образце РНК из биопсийного материала РМЖ. Проведена оценка концентрации маркерных транскриптов и анализ вариабельности гена домашнего хозяйства в образцах РНК из ткани РМЖ.

ПОЛИМОРФНЫЕ ВАРИАНТЫ ГЕНОВ *ABCB1* И *ABCC1* У БЕРЕМЕННЫХ С ОНКОЛОГИЧЕСКИМИ ЗАБОЛЕВАНИЯМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРОГНОСТИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ

Дудкина Е.С.*[*1,2], Козырко Е.В.[2], Руженцева Д.А.[2], Лужина Е.А.[2], Хохлова С.В.[2], Заварыкина Т.М.[1,2]

ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва
ФГБУ Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии и перинатологии им. В.И. Кулакова Минздрава России, Москва
**e-mail: esd06012005@gmail.com*

Важной проблемой современной медицины является устойчивый рост частоты онкологических заболеваний на фоне беременности. При лечении онкологических заболеваний у беременных женщин влияние противоопухолевого лечения на плод является одним из ключевых вопросов. Поиск маркеров, отражающих индивидуальные особенности плацентарного транспорта химиотерапевтических препаратов, является актуальным направлением в современной медицине.

Цель исследования заключалась в изучении возможной взаимосвязи влияния полиморфных вариантов генов транспорта лекарственных веществ и типа проводимой химиотерапии на неонатальные исходы и акушерские параметры новорожденных.

В исследование были включены 77 пациенток с раком молочной железы (РМЖ), раком шейки матки (РШМ), раком яичников (РЯ) на фоне беременности, получавшие цитостатическую химиотерапию (ХТ). Из плаценты выделяли ДНК, методом ПЦР проводили анализ полиморфных маркеров *rs2032582* и *rs1045642* гена *ABCB1*, *rs4148353* и *rs35625* гена *ABCC1* в плаценте. Анализ связи изученных маркеров с акушерскими данными и неонатальными исходами проводился методом Спирмена, количественные параметры дополнительно оценивали критерием Манн-Уитни в программе Statistica 8.0 (StatSoft).

Наибольшую значимость показал аллель *A* маркера *rs2032582* гена *ABCB1*. В подгруппе РМЖ он коррелировал со снижением веса и роста ребенка (p = 0,002; p = 0,01) и повышенной частотой выявляемых отклонений при нейросонографии (p = 0.01). Для маркера *rs4148353* гена *ABCC1* выявлено положительное влияние носительства аллеля *T*: увеличение массы плаценты у больных РМЖ. Оценка влияния проводимой ХТ выявила для маркеров rs2032582 гена *ABCB1*, rs4148353 и rs35625 гена *ABCC1* тенденцию к повышению частоты встречаемости ряда состояний новорожденных при включении в схемы таксанов и препаратов платины. Отмечено влияние используемых схем химиотерапии на проявление связей изучаемых полиморфизмов с неонатальными исходами.

Таким образом, исследованные варианты генов *ABCB1* и *ABCC1* представляются перспективными прогностическими маркерами при лечении беременных с онкологическими заболеваниями.

ДИАГНОСТИКА РАКА МОЧЕВОГО ПУЗЫРЯ НА ОСНОВЕ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРОТОПОРФИРИНА IX

***Сувернева Д.О.*[1], Хасан А. [1,5], Будылин Г.С. [2], Филиппов И.Д.[1], Давыдов Д.А.[1,2], Корнева Н.В. [6], Кисляков Д.А. [3], Щеславский В.И. [4], КамаловА.А. [6], Ширшин Е.А.[1,2]**

[1] МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия,
[2] Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Москва, Россия,
[3] ГБУЗ МО «Воскресенская больница», Воскресенск, Россия,
[4] ФГБОУ ВО «ПИМУ» Минздрава России, Нижний Новгород, Россия,
[5] ООО ВПГ Лазеруан, Фрязино, Россия,
[6] Университетская клиника МНОИ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Рак мочевого пузыря является одной из актуальных проблем современной онкоурологии. Более 75% случаев относятся к немышечно-инвазивным формам заболевания, для которых точное выявление опухолевой ткани имеет ключевое значение в снижении риска рецидивов. Однако стандартная цистоскопия в белом свете обладает ограниченной чувствительностью, что стимулировало развитие методов улучшенной визуализации, включая фотодинамическую диагностику (ФДД) с использованием 5-аминолевулиновой кислоты (5-АЛК). Данный метод основан на накоплении протопорфирина IX (PpIX) в опухолевых клетках. При возбуждении синим светом PpIX излучает характерную красную флуоресценцию, что позволяет визуализировать области повышенного накопления PpIX. Несмотря на более высокую чувствительность ФДД (92–96%) по сравнению с белым светом, ее специфичность остается ограниченной из-за возможного накопления PpIX в воспаленных тканях, что приводит к ложноположительным результатам. Одним из перспективных подходов к повышению специфичности является анализ времени жизни флуоресценции PpIX. В отличие от интенсивности флуоресценции, данный параметр в меньшей степени зависит от условий регистрации и оптических свойств среды и отражает особенности микроокружения флуорофора, что делает его потенциально более стабильным диагностическим показателем. В данной работе разработана и собрана экспериментальная установка для регистрации кинетики затухания флуоресценции методом время-коррелированного счета одиночных фотонов. На первом этапе исследования были выполнены измерения в модельных биологических системах для оценки влияния концентрации PpIX на параметры затухания флуоресценции. На следующем этапе были проведены измерения кинетик затухания флуоресценции образцов опухолевых, воспаленных и здоровых тканей мочевого пузыря, полученных во время эндоскопических операций после введения 5-аминолевулиновой кислоты с последующим гистологическим подтверждением. Анализ данных *ex vivo* показал, что опухолевые ткани характеризуются более высокими значениями времени жизни долгоживущей компоненты (τ_2) и отношения амплитуд долгоживущей и короткоживущей компонент (a_2/a_1) по сравнению со здоровыми и воспаленными тканями. Выявленные различия свидетельствуют о диагностической значимости данных параметров и подтверждают перспективность использования времени жизни флуоресценции PpIX для дифференциации опухолевых и неопухолевых тканей.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ЭЛЕКТРОСПИННИНГА ДЛЯ СОЗДАНИЯ БИОДЕГРАДИРУЕМЫХ КОНДУИТОВ ИЗ ПОЛИКАПРОЛАКТОН–ЖЕЛАТИН В НЕЙРОХИРУРГИЧЕСКОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ

Мосолова А.А. [1, 2], ***Гусева Е.А.*** [1], ***Немец Е.А.*** [1], ***Басок Ю.Б.*** [1]

[1] *ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва*
[2] *ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России, Москва*
mosnast24@mail.ru

Применение аутологичных трансплантатов при лечении поврежденных периферических нервов ограничены травмой донорской зоны. Альтернативой являются искусственные нервные каналы, направляющие регенерацию аксонов без повреждения здоровых нервов. Поликапролактон (ПКЛ) — синтетический полимер, обладающий хорошими механическими свойствами. Для повышения биосовместимости целесообразнее использовать его в комбинации с природным полимером, например, желатином [1,2].

Целью работы являлось формирование биодеградируемых нановолоконных кондуитов из композитов поликапролактон–желатин с помощью электроспиннинга.

Исследуемые образцы (толщиной 200±10 мкм) получали из раствора ПКЛ в гексафторизопропаноле с добавлением желатина 25%, 50% и 100% от массы полимера. Печать образцов осуществлялась методом электроспиннинга на установке NANON-01A. Для имитации воспалительной реакции организма использовали реактив Фентона в соответствии с ГОСТ ISO 10993-13-2009.

По мере увеличения содержания желатина в кондуитах степень деградации возрастала. За 5 месяцев потеря массы у композитов со 100% желатина составила практически 50%. Образцы с 25% желатина деградировал медленнее (17±0,5%), а чистый ПКЛ практически не менял массу (менее 1%). ПКЛ отличается высокой стабильностью, тогда как кондуиты с высоким содержанием желатина деградируют быстрее и требуют дополнительной стабилизации для сохранения формы, прочности и механических свойств.

Список используемой литературы

1. Sevastianov, V.I., Nemets, E.A. and et al. The Effect of Bilayered Bioactive Coating on Polycaprolactone Electrospun Scaffold Biocompatibility, Bioabsorption and Cellular Properties // *Polymers*, 2025, 17(21):2813.
2. Немец Е.А., Белов В.Ю. и др. Биомиметический подход к разработке протезов кровеносных сосудов малого диаметра // *Вестник трансплантологии и искусственных органов*, 2024, Т. 26, № 2., С. 145-155.

ВЛИЯНИЕ $Ti_3C_2T_x$ МХЕНОВ, ОБРАБОТАННЫХ NAOH, НА ЖИЗНЕСПОСОБНОСТЬ КЛЕТОК HUH7 В ХОДЕ ФОТОТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Корепанова Е.П., Шилов Н.Р., Аникин А.А., Пшеничников С.Е., Левада Е.В.

Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия, Rina.Korepanova@ya.ru

Благодаря высокой удельной площади поверхности и высокой электропроводности, МХены $Ti_3C_2T_x$ являются перспективными материалами для создания фототермических агентов (ФТА) [1]. Межслоевое расстояние и функционализация поверхности влияют на структурные и оптические свойства, а также на цитотоксичность МХенов [2]. Обработка NaOH позволяет уменьшить количество -F и увеличивает количество -O групп, и способствует деламинации МХенов $Ti_3C_2T_x$ [3]. В этом исследовании был проведен анализ влияния МХенов $Ti_3C_2T_x$, обработанных NaOH (MX-Na), на жизнеспособность клеток гепатоцеллюлярной карциномы человека Huh7 после фототермического воздействия. МХены $Ti_3C_2T_x$ были синтезированы путем травления MAX-фазы Ti_3AlC_2 смесью HCl/HF, и обработаны 1 M NaOH в течение 15 мин. Клетки Huh7 (10 000 клеток/лунку, 96-луночный планшет) инкубировали 24 ч с MX-Na (100 мкг/мл) и облучали лазером 808 нм, 0.563 Вт, 20 мин. Температура перед началом облучения составляла 37 °C. Жизнеспособность Huh7 была оценена путем окрашивания CCK8. При фототермическом воздействии температура лунки с Huh7, инкубируемых с MX-Na (ФТТ), достигала 43°C, тогда как лунка с Huh7 без MX-Na (Л), достигала лишь 38°C. Жизнеспособность Huh7, инкубируемых с MX-Na составила 78%, а после воздействия лазером снизилась до 41% (Рис. 1). Полученные результаты демонстрируют потенциал применения MX-Na в качестве ФТА.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 25-22-00433.

Список используемой литературы:

1. Driscoll N., Richardson A.G. et al. Two-Dimensional Ti_3C_2 MXene for High-Resolution Neural Interfaces // *ACS Nano*, 2018, № 10. С. 10419–10429.
2. Diedkova K., Roslyk I. et al. Effects of Etching and Delamination on Biocompatibility of Ti-Based MXenes // *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2025, № 34. С. 47919–47937.
3. Halim J., Persson I. et al. Sodium hydroxide and vacuum annealing modifications of the surface terminations of a Ti_3C_2 (MXene) epitaxial thin film // *RSC Advances*, 2018, № 64. С. 36785–36790.

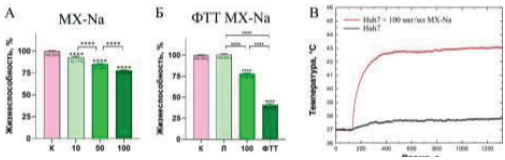


*Рис. 1. А: Жизнеспособность Huh7, инкубируемых с MX-Na в концентрациях 10, 50, 100 мкг/мл. Б: Жизнеспособность Huh7, инкубируемых с MX-Na в концентрации 100 мкг/под воздействием лазерного облучения. Уровень статистической значимости данных между контрольной и экспериментальной группами представлен в виде: **** $p < 0,0001$. В: Фототермическая кривая нагрева лунок с клетками Huh7, инкубируемых с MX-Na, под воздействием лазерного облучения в течение 20 минут.*

ОБРАЗОВАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДНК-DPS ПОД ДЕЙСТВИЕМ 4-ГЕКСИЛРЕЗОРЦИНА В КЛЕТКАХ ESCHERICHIA COLI.

***Генералова А.А.*[1], *Коваленко В.В.*[1], *Терешкин Э.В.*[1], *Терешкина К.Б*[1], *Лойко Н.Г.*[1,2], *Крупянский Ю.Ф.*[1]**

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия
[2]Федеральный исследовательский центр —Фундаментальные основы биотехнологии Российской академии наук, Москва, Россия

Целью данной работы было изучить клетки на стационарной фазе роста под действием различных концентраций 4-гексилрезорцина с индукцией оверэкспрессии белка DPS и без нее. В ходе исследования было обнаружено, что образцы клеток претерпели значительные изменения. В клетках без индукции DPS и без добавления гексилрезорцина отсутствовало какое-либо упорядочение. Электронная микроскопия выполнена на просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100 (JEOL, Япония) показала что в бактериальных популяциях E. coli Top без оверэкспрессии белка Dps размер межплоскостного расстояния кристаллов ДНК–Dps(7,44 нанометра) в клетках отличаются от размеров межплоскостного расстояния, кристаллов у бактерий, полученных в условиях оверэкспрессии белка(7,39 нанометра), но структура кристаллов в обоих случаях идентична. Эти образцы дают следующую дифракционную картину, полученную с помощью малоуглового рассеяния на Курчатовском источнике синхротронного излучения, на ней виден четкий пик на 44,5 ангстрем и сателлиты. По нашему предположению ДНК уложено слоями на расстоянии 45 ангстрем, повернутыми относительно друг друга.

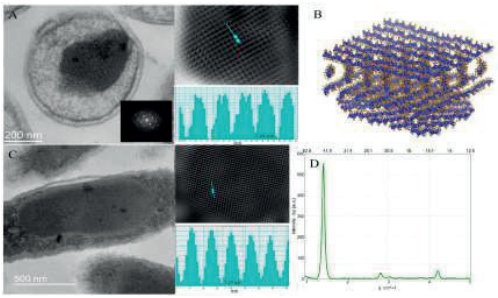


Рисунок 1. Клетка E.coli под действием 4-гексилрезорцина в концентрации 10^{-4}; A — с оверэкспресией DPS, C — без оверэкспресии DPS;), график зависимости интенсивности рассеяния от угла 2Θ для образцов клеток E.coli под действием гексилрезонрцина (C), структура ДНК (D).

Работа выполнена в рамках Госзадания для ФИЦ ХФ РАН (№ Государственной регистрации 125012200614-6)

КАРДИОПРОТЕКТОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНОГО НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ПЕНИЦИЛЛАМИНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ: КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НА МОДЕЛЯХ *IN VITRO* И *IN VIVO*

Тагирова А.Р.*[1@], Смолина А.В.[1], Полетаева Д.А.[1], Солдатова Ю.В.[1], Забельникова А.М.[1], Санина Н.А.[1], Файнгольд И.И.[1]

[1] ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН
alsu.tagirova.02@mail.ru

Известно, что одним из механизмов повреждения кардиомиоцитов является окислительный стресс. Продукты перекисного окисления липидов (ПОЛ) и конечные продукты гликирования (КПГ) влияют на проницаемость митохондриальных мембран и дыхательную функцию митохондрий. Воздействие на процессы ПОЛ, активность МАО и неферментативного гликирования белков может служить перспективной стратегией поиска соединений, обладающих терапевтическим потенциалом для лечения сердечно-сосудистых заболеваний.

Целью работы было комплексное исследование кардиопротекторных свойств перспективного донора монооксида азота — синтетического катионного биядерного тетранитрозильного комплекса железа с природным тиолигандом пенициллламином (TNIC–PA) на моделях *in vitro* и *in vivo*. Биядерные серосодержащие нитрозильные комплексы железа в воде и физиологических растворах спонтанно генерируют NO без дополнительной активации.

Спектрофотометрическим методом TBARS показано, что TNIC–PA замедляет накопление МДА (малонового диальдегида) в процессе распада ненасыщенных жирных кислот в гомогенате мозга мышей (IC50 = 21,4 ± 0,6 мкМ). TNIC–PA ингибирует каталитическую активность мембраносвязанного фермента моноаминоксидазы А (МАО-А) на 33-71% в зависимости от концентрации. Исследуемый в работе комплекс TNIC–PA ингибировал неферментативное гликирование альбумина с IC50 7,7± 0,9 мкМ (для КПГ типа весперлизина) и 4,3 ± 0,4 мкМ (для КПГ типа пентозидина).

В экспериментах *in vivo* на самцах мышей линии C57Bl/6J с кардиотоксичностью, индуцированной азитромицином, введение TNIC–PA в терапевтической дозе эффективно снижало ПОЛ в гомогенате печени мышей, что возможно обусловлено его способностью улавливать гидроксильные радикалы, гипохлорит-анионы и пероксинитрит. Также, показано, что терапия TNIC–PA снижает активность МАО-А по сравнению с группой здоровых животных, что вероятно определяется прямым взаимодействием высвобождаемого NO с молекулой фермента или присутствием биологически активных тиолов, способных высвобождать флавин из состава моноаминоксидазы.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда проект №25-24-00890

ЛАЗЕРНАЯ ДЕАКТИВАЦИЯ ДНК В ООЦИТАХ МЫШИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО КРАСИТЕЛЯ HOECHST В КАЧЕСТВЕ СЕНСИБИЛИЗАТОРА

***Шахов А.М.*[1], *Осыченко А.А.*[1]**

[1]*ФИЦ ХФ РАН, 119991, Москва, physics2007@yandex.ru*

Удаление ДНК в яйцеклетках и эмбрионах активно применяется во вспомогательных репродуктивных технологиях при лечении митохондриальных наследственных заболеваний и нормализации плоидности трехпронуклеарных зигот. Классический метод удаления ДНК опирается на использование микроиглы, вводимой в ооцит или эмбрион через цитоплазматическую мембрану с последующей аспирацией ДНК и части связанного с ДНК материала клетки.

В данной работе демонстрируется метод лазерной деактивации ДНК с использованием в качестве сенсибилизатора флуоресцентного красителя Hoechst 33342, связывающийся с малой бороздой двойной спирали ДНК. При воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в спектральном диапазоне 730-790 нм на ДНК возникают свободные электроны и радикалы приводящие к цепному разрушению ДНК. Использование красителя Hoechst в качестве сенсибилизатора позволяет снизить необходимую дозу лазерного излучения и повреждающие эффекты, при этом повышая селективность воздействия, позволяя одновременно контролировать деактивацию флуоресцентными методами (рис. 1).

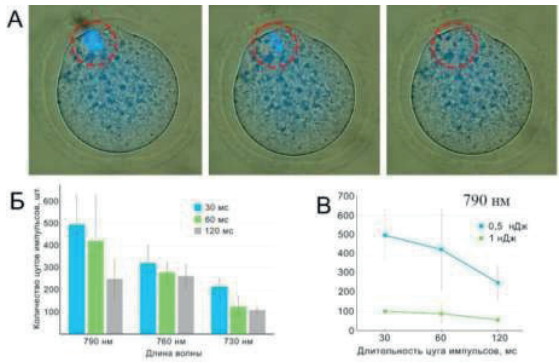


Рисунок 1. А — Деактивация ДНК в метафазной пластинке ооцита, подкрашенной Hoechst 33342, с помощью фемтосекундных лазерных импульсов на длине волны 730 нм. Б, В — зависимость количества цугов лазерных импульсов необходимых для деактивации ДНК.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 25-75-20020.

РАЗРУШЕНИЕ ДНК ФЕМТОСЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ БЛИЖНЕГО ИК ДИАПАЗОНА: МЕХАНИЗМ И ПРИМЕНЕНИЕ

***Осыченко А.А.*[1], *Шахов А.М.*[1], *Залесский А.Д.*[1], *Айбуш А.В.*[1]**

1ФИЦ ХФ РАН, 119991, Москва, alina.chemphys@gmail.com

Фемтосекундный (ФС) лазерный скальпель — высокоточный и малоинвазивный инструмент, который может применяться для проведения операций микро- и нано- масштаба внутри живых клеток. ФС лазерный скальпель может применяться для разрушения ДНК в яйцеклетках — энуклеации, в том числе, в сфере вспомогательных репродуктивных технологий человека. Ввиду перспективы применения методики лазерной энуклеации в медицине, необходимо понимать, каков механизм разрушения ДНК фемтосекундным лазером ближнего инфракрасного диапазона, и каковы возможные продукты фотохимических реакций.

Поскольку живая клетка — очень многокомпонентный по химическому составу объект, вопрос механизма и продуктов фотохимических реакций мы исследовали на модельной системе — растворе ДНК. Раствор ДНК объемом 1 мл (содержание ДНК 2 мг/мл) облучали в кварцевой кювете диаметром 10 мм с оптическим путем 8 мм, а лазер фокусировали в центре объема раствора через асферическую линзу (NA 0,3). Облучение проводили при различной частоте следования фемтосекундных лазерных импульсов (1-200 кГц), и для анализа отбирали пробы объемом 120 мкл через 1, 3, 10 и 30 минут после начала облучения. При этом интенсивность облучения раствора ДНК в кювете подбирали таким образом, чтобы она соответствовала условиям, при которых ДНК облучается в клетке. Облученный раствор анализировали при помощи целого набора методов: спектрофотометрия, измерения рамановских спектров и спектров кругового дихроизма, флуоресцентная микроскопия, гель-электрофоретическое разделение.

Показано, что лазерное воздействие в течение 30 минут при действии лазером с длиной волны 1033 нм (1-50 кГц) приводит к практически полной деградации высокомолекулярной ДНК; однако в режиме 1033 нм 200 кГц изменения не столь существенны. По мере облучения ДНК степень фрагментации увеличивается во всех экспериментальных группах. Результаты, полученные методом гель-электрофореза, полностью согласуются с данными, полученными методами спектроскопии. Исследование рамановских спектров показало нарушение двойной спирали ДНК, наличие разрывов цепи, диссоциацию оснований от дезоксирибозы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 25-75-20020.

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОСОВМЕСТИМОСТИ НАНЕСЕННЫХ ЛАЗЕРОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ МЕТОДОМ ОКРАШИВАНИЯ LIVE/DEAD

***Маннинен А.С.*[1], Белик П.А.[2], Афанасьев Н.А.[3], Бузыкин А.Г.[3]**

[1] *Университет ИТМО, Санкт-Петербург, amanninen@itmo.ru*
[2] *Университет ИТМО, Санкт-Петербург*
[3] *ООО —Лазерный центр, Санкт-Петербург*

В последние годы в биомедицине растет запрос на поверхности, обладающие повышенной биосовместимостью. Они применяются в выращивании искусственных тканей на чипе, клеточном скрининге, создании металлических имплантатов и других областях [1].

В работе методом live/dead окрашивания [2] оценена цитотоксичность тонких металлических пленок на основе Ti, Al и Zn с использованием пропидия йодида и акридинового оранжевого. Пленки были получены методом Laser-Induced Backward Transfer (LIBT) [3]. В качестве контроля использовали чистое предметное стекло.

Миобласты C2C12 были культивированы в течение 24 и 48 часов при 37 °C и 5 % CO_2 в культуральном планшете с использованием среды DMEM (Dulbecco's modified Eagle medium) (—БиолоТ) с добавлением 10 % FBS (fetal bovine serum) (—БиолоТ), после чего были подвержены окрашиванию.

Для Ti и Al доля выживших составила 98,7±0,6 % и 96,7±0,8 % соответственно, что близко к показателям контроля — 99,0±0,3 %; а для Zn — 14,3±4,8 %.

В рамках данного исследования было продемонстрировано, что поверхности на основе титана и алюминия не оказывают токсичного влияния на клетки, в отличие от поверхностей на основе цинка. Таким образом, метод LIBT может быть использован для формирования морфологии тонких пленок для дальнейшего формирования модельных поверхностей для решения задач клеточной инженерии, таких как формирования клеточных сфероидов и выращивания тканей.

Список используемой литературы

1. Bhatia S. N., Ingber D. E. Microfluidic organs-on-chips // *Nature Biotechnology*, 2014, 32(8). 760–772.
2. Zhou S., Cui Z., Urban J. Dead cell counts during serum cultivation are underestimated by the fluorescent live/dead assay // *Biotechnology Journal*, 2011, 6(5). 513–518.
3. Buzykin A., Ramos-Velazquez A., Amiaga J. Morphology and Chemical Composition study of Thin Films on Transparent Substrates, deposited with Laser-Induced Backward Transfer (LIBT) // *Frontiers in Optics + Laser Science,* 2024. JTu5A.17.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ЭЛЕКТРОСПРЕИНГА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ МИКРОЧАСТИЦ

Хроменкова Т.А., Минаева С.А., Миронов А.В.

Отделение Институт Фотонных Технологий, Курчатовский комплекс Кристаллография и Фотоника, НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия.
tatyana.hromenkova@yandex.ru

Алифатические полиэфиры, в частности сополимеры молочной и гликолиевой кислот (полилактогликолиды) активно применяются в медицине и фармацевтике. Благодаря своей биосовместимости и способности постепенно разлагаться в организме до нетоксичных продуктов, такие полимеры значительно снижают риск отторжения и воспалительных реакций. Это делает разработку новых лекарственных форм на основе этих материалов особенно актуальной задачей современной биомедицины и фармацевтики. К традиционным методам получения микрочастиц на основе полилактогликолида относятся эмульгирование, нанопреципитация (замена растворителя), высаливание и распылительная сушка.

Целью работы стала разработка методики получения пористых микрочастиц с диаметром менее 500 мкм на основе полилактогликолида методом электроспреинга.

Процесс формирования частиц включал два этапа: формирование первичного потока 10% р-ра полилактогликолида, с последующим дроблением и электроформованием при заряде 16 кВ, что способствовало образованию сферических частиц. Вторым этапом было удаление растворителя, что приводило к затвердеванию микрочастиц. В результате были получены пористые сферические микрочастицы. Согласно данным электронной микроскопии, диаметр частиц находился в диапазоне 15–30 мкм, что меньше предполагаемого критического порога в 500 мкм, необходимого для безопасного прохождения через капиллярные поры в зоне воспаления .

Таким образом, полученные пористые микрочастиц на основе полилактогликолида представляют собой перспективную платформу для создания целевых лекарственных форм, которые потенциально применимы в онкологии и терапии хронических воспалительных заболеваний.

Работа выполнена в рамках государственного задания Научно-исследовательского центра «Курчатовский институт»

ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ФОРМ ОКСИДОВ МАРГАНЦА И МОЛИБДЕНА НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ПОСЕВНЫХ КУЛЬТУР

Аскерова А.С.[1], Блинов А.В.[1]

[1] ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет», г. Ставрополь, vikalinka04@mail.ru

Марганец и молибден относятся к эссенциальным микроэлементам, необходимым для роста и развития растений. Марганец играет роль в активации ферментов, окисляющих фитогормон ауксин, участвующий в росте растений [1]. Молибден служит кофактором нитратредуктазы и нитрогеназы. В форме стандартных неорганических подкормок эти элементы малодоступны и легко вымываются. Наноразмерные оксиды обладают высокой удельной поверхностью, способны проникать через клеточные стенки и постепенно высвобождать ионы микроэлементов у корневой зоны.

В ходе исследования был выявлен положительный росстимулирующий эффект наноразмерных форм оксидов марганца и молибдена на рост и развитие культуры *Pisum sativum L*. На рисунке 1 предствлен спектр EDS-карты среза посевного гороха после нанопрайминга наночастицами оксида марганца и молибдена.

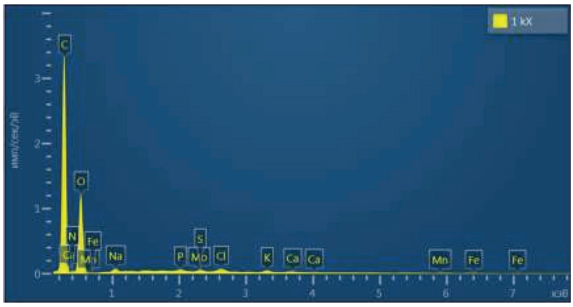


Рисунок 1. Спектр EDS-карты среза посевного гороха после нанопрайминга наночастицами оксида марганца и молибдена.

В настоящее время исследлования продложаются в направлении изучения влияния наноформ на микробиоценоз почвы, а также дальнейшей оптимизации компоненнтого состава высокостабильных форм.

Работа выполена за счет средств гранта РНФ № 23-76-10046.

Список используемой литературы

1. Значение марганца и меди в питании растений / Р. Эсенов, О. Сапармедова, О. Сапармырадова, А. Розыева // Символ науки: международный научный журнал. — 2024. — Т. 2, № 5-2. — С. 72-73.

СИНТЕЗ СУПЕРПАРАМАГНИТНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ МАГНЕТИТА ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

***Леонова Т.В.*[1], Дроздов А.С.[1]**

[1]АНОО ВО Научно-технологический университет «Сириус», Научный центр генетики и наук о жизни
e-mail: leonova.taisiia.07@mail.ru

Магнитные наночастицы представляют значительный интерес благодаря широкому спектру практических применений. Особый интерес представляют магнитные нанокластеры, размер которых может варьироваться в широком диапазоне, что позволяет управлять их физико-химическими свойствами.

В данной работе исследовались возможности синтеза магнитных кластеров полиольным методом, в ходе которого исследовалось влияние содержания воды в реакционной системе на формирование агрегатов магнетита. Показано, что изменение содержания воды позволяет контролируемо изменять размер формирующихся нанокластеров в диапазоне 70–250 нм. При этом изменение количества воды оказывает влияние не только на размер частиц, но и на ширину распределения по размерам, что позволяет получать нанокластеры с различной степенью монодисперсности. Полученные материалы могут быть использованы в биомедицинских технологиях, включая магнитную сепарацию, доставку лекарственных препаратов и магнитную гипертермию.

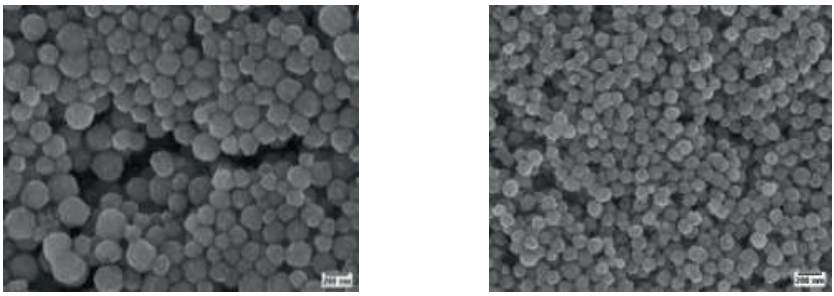


Рисунок 1. Нанокластеры с различным содержанием воды 0 мкл (а) и 400 мкл (б)

Работа была выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-20032.

Список используемой литературы

1. Wang W., Tang B., Ju B. и др. Size-controlled synthesis of water-dispersible superparamagnetic Fe3O4 nanoclusters and their magnetic responsiveness // *RSC Advances*, 2015, № 5 (92). С. 75292–75299.
2. Deng H., Li X., Peng Q. и др. Monodisperse Magnetic Single-Crystal Ferrite Microspheres // *Angewandte Chemie International Edition*, 2005, № 44 (18). С. 2782–2785.

БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛАЗЕРНО-СИНТЕЗИРОВАННЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ AU–TIO_2: ОЦЕНКА ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И ФОТОТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА КЛЕТОЧНЫХ ЛИНИЯХ

Голованова Л.М.[1], Горохова А.А.[1], Кириллин М.Ю.[2], Амосов А.В.[3], Кучмижак А.А.[3], Балалаева И.В.[1]

[1]ННГУ имени Н.И. Лобачевского, 603022, Нижний Новгород, просп. Гагарина, 23, lida98734@yandex.ru

[2]ИПФ РАН, 603155, Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46

[3]ИАПУ ДВО РАН, 690041, Владивосток, ул. Радио, 5

Тераностика онкологических заболеваний является перспективным направлением в современной медицине. Она объединяет диагностику и терапию. Наночастицы композитного состава золото-диоксид титана (Au-TiO_2 NPs) демонстрируют значительный потенциал для применения в тераностике. Для синтеза данных нанокомпозитов была применена жидкофазная импульсная лазерная абляция, позволяющая получать ультрачистые Au-TiO2 NPs со сложной структурой и средним размером около 90 нм, который в отличие от традиционного химического синтеза, сопряженного с использованием стабилизаторов и риском токсичных остатков, является более дешевым, легким и безопасным.

Целью настоящего исследования являлось исследование наночастиц Au-TiO2 NPs как потенциальных агентов для тераностики опухолей.

С целью изучения биосовместимости гибридных наночастиц Au-TiO_2 было проведено исследование методом МТТ-теста в широком диапазоне концентраций от 0,1 до 100 мг/л при 4 и 24-часовой экспозиции. Исследования проводились на клеточных линиях HaCaT (нормальные кератиноциты) и A431 (эпидермоидная карцинома человека). Результаты показали, что наночастицы сохраняют жизнеспособность нормальных клеток HaCaT на уровне не менее 80%, тогда как опухолевые клетки A431 менее устойчивы: при высоких концентрациях (10-100 мг/л) их жизнеспособность падает до 60%. С целью анализа возможности ассоциации фототермического эффекта, с помощью прибора «Гармония» опухолевые клетки A431 облучали на 5 режиме мощности в течении 9 минут 31 секунды, что соответствует дозе 100 Дж/$см^2$. В сравнении с контролем, жизнеспособность которых снижалась до 80%, выживаемость облученных клеток уменьшилась до 50%. Результаты указывают на более высокую устойчивость нормальных клеток к наночастицам и наличие фототермического эффекта.

Исследование показало, что Au-TiO_2 NPs можно рассматривать как потенциальный агент для проведения фототермической терапии.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЦИТОТОКСИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ КУРКУМИНА НА ОСНОВЕ (СО)ПОЛИМЕРОВ N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА

***Ягодка Г.А.*[1], Курмаз С.В.[2], Ульянов И.В.[2], Балакина А.А.[2]**

[1]ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет»
[2]ФИЦ «Проблем химической физики и медицинской химии РАН»; Россия, 142432 Московская область, Черноголовка, пр-т Академика Семенова, 1.

Куркумин обладает выраженной противоопухолевой и антиоксидантной активностью, но при этом характеризуется низкой гидрофобностью и биодоступностью. Перспективным является создание водорастворимых полимерных композиций на основе поливинилпирролидона (ПВП) и сополимеров N-винилпирролидона с (ди) метакрилатами.

Цель исследования — оценить цитотоксичность водорастворимых композиций куркумина и его нативной формы на различных линях опухолевых клеток человека.

На основе линейного ПВП (M_w = 59 кДа) и сополимеров N-винилпирролидона были разработаны водорастворимые полимерные композиции (ПК1–ПК3). Носители, получены методом радикальной сополимеризации в этаноле. Исследования проводили на опухолевых линиях клеток человека HeLa, A431 и HepG2. Жизнеспособность клеток оценивали с помощью МТТ-теста (72 ч инкубации, 0–200 мкМ). Расчет IC_{50} выполняли методом нелинейной регрессии с использованием четырехпараметрической логистической модели.

Для линии HeLa наиболее эффективной была композиция ПК3 (IC_{50} = 4.31 мкМ). На линии A431 нативный CUR проявил наивысшую токсичность (IC_{50} = 3.44 мкМ), а среди полимерных форм лидерство сохранилось за ПК3 (IC_{50} = 4.88 мкМ). При этом на кривых выживаемости клеток A431 при максимальных дозах полимерных форм фиксировалось плато резистентности (15–19%). Линия HepG2 оказалась наиболее устойчивой: IC_{50} для CUR составила 5.75 мкМ. Особенностью HepG2 стало формирование высокого плато выживаемости (до 25.5%) даже при концентрации 200 мкМ.

Таким образом, переход к водорастворимым полимерным композициям куркумина позволяет модулировать его цитотоксические свойства *in vitro*. Наиболее перспективной полимерной композицией, обеспечивающей максимальный терапевтический эффект, является ПК3. При этом ключевую роль в процессах внутриклеточного трафика и высвобождения вещества играет гистогенез опухоли и структура полимерного носителя.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание № 124020500019-2).

ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАГРУЖЕННОГО МЕТАЛЛА В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ НАНОЧАСТИЦ

***Иваненко А.Д.*[1], Кулебякина А.И. [1], Бакиров А.В.[1], Стрельцов Д.Р.[1]**

[1] *НИЦ «Курчатовский институт», Москва,*
antoninaiv2001@mail.ru

Развивающимся направлением в области создания новых радиофармпрепаратов является бесхелаторная загрузка изотопов металлов в полимерные наночастицы (НЧ) посредством инкапсуляции их в ядро НЧ или их адсорбции на поверхность без ковалентного связывания. В этом контексте мало изученным остается вопрос локализации действующего загружаемого агента по объему полимерного носителя. Этот аспект немаловажен в прогнозировании поведения НЧ в биологических средах, он определяет профиль высвобождения, стабильность и фармакокинетику. Целью данной работы является получение НЧ на основе полилактид-со-гликолида (ПЛГА), загруженных солями металла эрбия (III) и разработка подхода к оценке локализации загруженного металла по объему полимерной матрицы.

Методом нанопреципитации получены НЧ на основе ПЛГА с адсорбированными на поверхность 2,5 масс. % нитрата эрбия (НЧ-адс), а также с инкапсулированными в ядро частиц 2,5 масс. % лактата эрбия (НЧ-инк). Гидродинамические диаметры составили для НЧ-адс 120±5 нм и для НЧ-инк 140±5 нм. Изображения атомно-силовой микроскопии продемонстрировали для НЧ-адс диаметры 53±10 нм, а для НЧ-инк — 80±20 нм. Эффективность загрузки опрелелялась методом рентгено-флуоресцентной спектроскопии и составила для нитрата эрбия 10±5 %, а для лактата эрбия — 30±10 %.

Для оценки локализации металла в матрице НЧ было проведено математическое моделирование кривых молоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) с помощью модели «multishell model with core size distribution». По результатам моделирования ненагруженная НЧ имеет равномерную электронную плотность по всему объему. В случае НЧ-инк электронная плотность ядра возрастает на 40% относительно ненагруженных частиц, что подтверждает наличие металла в ядре. А для НЧ-адс присутствует поверхностный тонкий слой высокой плотности, в котором предположительно и сконцентрированы ионы металла. Кроме того, были проанализированы профили высвобождения эрбия из НЧ, которые демонстрируют в случае НЧ-адс начальный быстрый «burst release» и последующее высвобождение около 50% металла уже к 30 минутам. В случае НЧ-инк профиль имеет двухступенчатый характер: быстрое начальное высвобождение 20% эрбия, по-видимому, из приповерхностных слоев, и после 15минутного индукционного периода более медленное высвобождение, связанное с диффузией эрбия из объема ядра. Данные результаты хорошо коррелируют с выводами, полученными из моделирования кривых МУРР.

АНТИОКСИДАНТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} С АМИНОФОСФОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ

***Астафьев О.М.*[1,2], Полетаева Д.А.[1], Тагирова А.Р.[1], Комчихина О.М.[1], Смолина А.В.[1], Краевая О.А.[1], Большакова В.С.[1], Трошин П.А.[3,1], Файнгольд И.И.[1]**

[1]ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, oleg.astafev.04@inbox.ru

[2]Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный

[3]Харбинский политехнический университет, Харбин, Китай

Присоединение к фуллереновому ядру фосфоизостеров аминокислот может существенно улучшить и расширить спектр их биологической активности, поскольку фосфатная группа является одной из важнейших функциональных групп: она служит ключевым компонентом ДНК и РНК, а в молекуле АТФ осуществляет хранение, перенос и выделение энергии. Лиганды, содержащие фосфатные группы, могут выступать периферическими сайтами связывания с различными белками и ферментами.

В настоящей работе исследованы антиоксидантная и антирадикальная активность новых водорастворимых производных фуллерена C_{60}, функционализированных пятью аминофосфоновыми кислотами. Окислительный стресс играет важную роль в патогенезе целого ряда заболеваний. В связи с этим производные фуллеренов, которые являются одними из самых эффективных ловушек свободных радикалов, рассматриваются как перспективная платформа для создания лекарственных средств для терапии социально-значимых заболеваний. Антиоксидантную активность производных фуллерена C_{60} изучали с помощью спектрофотометрического определения конечных продуктов пероксидного окисления липидов (ПОЛ) в гомогенате мозга мышей. Антирадикальную активность исследовали с помощью высокочувствительного метода хемилюминесценции.

Показано, что новые производные фуллерена C_{60} с аминофосфоновыми кислотами эффективно ингибируют образование конечных продуктов ПОЛ, при этом полумаксимальные ингибирующие концентрации исследуемых производных оказались на несколько порядков ниже, чем у эталонного антиоксиданта тролокса — водорастворимого аналога витамина Е. Исследуемые производные фуллерена C_{60} ингибируют хемилюминесценцию люминола в несколько раз эффективнее, чем известный антиоксидант ионол.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, государственное задание № 124020500019-2.

ДВУХСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ АНТИБИОТИКОРЕЗИСТЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ ДНК-КОНСТРУКЦИЙ ТИПА 4 WAY-JUNCTION

Чернышова К.Д.[1], Филатов П.В.[2], Швецов В.А.[1], Зюзин М.В.[2]

[1] Факультет Биотехнологий Университет ИТМО 19002, Санкт-Петербург, xeniia.chernyshova@gmail.com

[2] Физико-технический мегафакультет Университет ИТМО 19002, Санкт-Петербург

Разработка высокоспецифичных методов для детекции однонуклеотидных вариаций (SNV) в геноме бактерий, связанных с антибиотикорезистентностью, является актуальной задачей для молекулярной диагностики [1]. Перспективным инструментом их распознавания выступают сенсоры на основе ДНК-конструкций типа 4 way-junction (4WJ). Несмотря на высокую специфичность к SNV, описанные сенсоры 4WJ зачастую разрабатывались только для обнаружения целевого участка и давали сигнал лишь при его наличии, поэтому отсутствие отклика не позволяло различить отсутствие аналита и мишень с SNV.

В данной работе была разработана система на основе двух флуоресцентных сенсоров, использующая конструкцию 4WJ для детекции SNV в гене *GyrA E.Coli*: один направлен на обнаружения штамма дикого типа (wild type, WT), другой на штамм с SNV (resistant type, RT). Система позволяет одновременно устанавливать присутствие целевой последовательности и выявлять наличие SNV, что является более применимым для клинической практики, чем система на основе одного сенсора.

Для каждого сенсора определялись чувствительность (LoD) и специфичность (reduction factor, RF). Для WT получены LoD 0,7 нМ и RF 75,9%, для RT — LoD 2,5 нМ и RF 87,5%.

Полученные значения сравнимы с литературными данными, что свидетельствует об успешной работе сенсоров. В отличие от ранее известных сенсоров 4WJ, разработанная система способна селективно различать WT и RT, что делает ее перспективным инструментом диагностики антибиотикорезистентности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского Научного Фонда № 25-25-00982.

Список используемой литературы

1. Jiang, H. *et al*. Biosensors for Point Mutation Detection// *Front. Bioeng. Biotechnol.,* 2021, 9. 797831.

ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ НОСИМЫХ СЕНСОРНЫХ СИСТЕМ

Пляшечник Е.С.[1]

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, pliashechnik.es@mipt.ru

Альгинат натрия (АН) — природный полисахарид, образующий гидрогели с ионами поливалентных металлов, за счет чего находит применение в доставке лекарств, 3D-биопечати и в качестве биосовместимых гибких подложек для носимых сенсоров. В работе проведены сравнительный анализ методик получения АН-гидрогелей, сшитых ионами Ca^{2+}, и оптимизация их свойств за счет выбора сшивателя и состава среды.

Полисахаридную основу готовили из 0,25 г АН на 25 мл воды или водно-органической среды и наносили на стекло каплями 0,2-0,8 мл, часть образцов дополнительно распределяли центрифугированием при 100-200 rpm. Для ионной сшивки сравнивали три подхода: (1) смешивание АН с растворами $CaCl_2$ [1] или лактата кальция, (2) напрыскивание раствора сшивателя на слой АН [2], (3) заливка слоя АН раствором сшивателя [3]. Также варьировали содержание глицерина (0-0,3 г) и объема воды для оценки их влияния на структуру и эластичность пленки.

Смешивание растворов сшивателя и АН без центрифугирования дает наиболее однородные пленки, тогда как центрифугирование при 200 rpm приводит к неравномерному распределению слоя. Лактат кальция обеспечивает более медленную сшивку и формирует более эластичные гидрогели с выраженной адгезией к коже по сравнению с $CaCl_2$. Добавление глицерина увеличивает растяжимость и облегчает отделение влажных гелей от подложки, а замена воды на антисептические среды заметно уменьшает развитие плесени при хранении. При регидратации пленки быстро набухают и выдерживают удлинения порядка 20–30%, что делает их перспективными подложками для носимых сенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 26-19-00062).

Список используемой литературы

1. Bekin S., Sarmad S. et al. Dielectric, Thermal, and Swelling Properties of Calcium Ion-Cross-linked Sodium Alginate Film // *Polymer Engineering & Science*, 2014, 54(6). 1372–1382.
2. Mulyani S., Dharmawan M.R. et al. Development and Characterization of Calcium Lactate-Activated Sodium Alginate-Gum Arabic Edible Films // *Journal of Applied Food Technology*, 2025, 12(2). 182-188.
3. Bekin S., Sarmad S. et al. Microstructural and Mechanical Properties of Calcium-Treated Cactus Pear Mucilage (Opuntia spp.), Pectin and Alginate Single-Biopolymer Films // *Polymers*, 2023, 15(21). 4295.

ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СУБМИКРОННЫЕ НОСИТЕЛИ НА ОСНОВЕ ЭМУЛЬСИИ ПИКЕРИНГА ДЛЯ КАПСУЛИРОВАНИЯ И ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ

***Марченкова Н.С.*[1], *Кулебякина А.И.*[1]**

[1] *НИЦ «Курчатовский институт», Москва,*
marchenkova.nata@inbox.ru

Эмульсии Пикеринга, стабилизированные твердыми частицами, широко применяются в фармацевтике и системах адресной доставки лекарств благодаря их высокой кинетической стабильности. Создание термочувствительных носителей на их основе с ядром из фазопереходных материалов делает такие системы перспективными платформами для управляемого высвобождения лекарственных веществ.

Эмульсии получали методом ультразвуковой гомогенизации. В качестве дисперсной фазы был выбран эйкозан (n-$C_{20}H_{42}$, $T_{пл}$=36-38 °C), в качестве дисперсионной среды — водный золь наночастиц SiO_2 (0,14 масс.%) с цетилтриметиламмоний бромидом (ЦТАБ) (0,01 М) при pH=2. Методами динамического рассеяния света, крио-ПЭМ, АСМ и малоуглового рентгеновского рассеяния изучена самоорганизация SiO_2/ЦТАБ в водном растворе и на поверхности эйкозана. Методами ДСК и широкоуглового рентгеновского рассеяния определены температурные границы фазовых переходов эйкозана при субмикронном размере. В качестве лекарственного вещества в эмульсию включали куркумин ($C_{21}H_{20}O_6$) и изучали его кинетику высвобождения при двух температурах: 25 °C и 37 °C (см. рисунок 1).

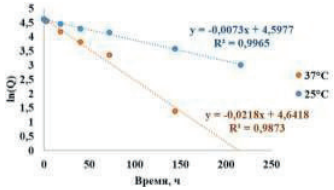


Рисунок 1. Сравнение кинетики высвобождения куркукмина в моделях первого порядка

Для количественной характеристики механизма высвобождения экспериментальные данные были аппроксимированны рядом кинетических моделей. При комнатной температуре наилучшую аппроксимацию обеспечивает модель Корсмейера-Пеппаса (R^2=0,997) — кристаллическое ядро выступает как двойной барьер, обеспечивая пролонгированное высвобождение включенного вещества. При физиологической температуре наилучшую аппроксимацию обеспечивает модель первого порядка (R^2=0,987) — происходит плавление носителя с последующим ускоренным высвобождением инкапсулированного вещества.

Исследование выполнено за счет средств госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

КАРДИОПРОТЕКТОРНЫЕ И ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНОГО ПИРИДОКСИНА B6NO: NRF2-ЗАВИСИМЫЙ МЕХАНИЗМ И СИНЕРГИЗМ С ЦИТОСТАТИКАМИ ПРИ МЕЛАНОМЕ B16

Копылец Т.А., Амозова В.И., Приходченко Т.Р., Мищенко Д.В., Балакина А.А.

ФИЦ «Проблем химической физики и медицинской химии РАН», Россия, Московская область, Черноголовка, Kopylets03@mail.ru

Современные подходы к фармакологической защите миокарда от оксидативного стресса все чаще базируются на модуляции транскрипционного фактора Nrf2, регулирующего экспрессию антиоксидантных генов. Одним из сдерживающих факторов в клиническом применении химиопрепаратов выступает их высокая кардиотоксичность, вносящая существенный вклад в летальность онкологических больных, что делает обоснованным поиск мультимодальных агентов, сочетающих индукцию эндогенных защитных систем в миокарде с подавлением пролиферации опухолевых клеток.

Такие свойства демонстрирует новое производное пиридоксина B6NO (ди(3-гидрокси-4,5-бис(гидроксиметил)-2-метилпиридиний)): при его введении мышам линии BDF1, несущим перевиваемую меланому B16, активация транскрипционного фактора Nrf2 и белков антиоксидантной системы регистрируется в кардиомиоцитах, не затрагивая опухолевые клетки, что исключает защиту последних от оксидативного стресса, опосредующего цитостатический эффект. На фоне доксорубицин-индуцированного повреждения миокарда соединение B6NO эффективно препятствует снижению глутатионового пула и падению актиивности ферментов антиоксидантной системы, тем самым нивелируя окислительный стресс.

Многократное внутрибрюшинное введение B6NO само по себе сопровождалось умеренным противоопухолевым эффектом, однако более значимые результаты были достигнуты при комбинировании этого соединения с доксорубицином или цисплатином. Их сочетание давало ярко выраженный синергический эффект, проявляющийся в торможении роста меланомы и увеличении медианы выживаемости мышей в группах комбинированной терапии по сравнению с режимами монохимиотерапии.

Применение нового производного пиридоксина B6NO позволяет одновременно нивелировать побочный кардиотоксический эффект стандартной цитостатической терапии и повышать ее противоопухолевую эффективность, что открывает новые перспективы в оптимизации комбинированного лечения онкозаболеваний.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание № 124020500019-2).

ОБНАРУЖЕНИЕ НОВОГО КЛАССА АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ АГЕНТОВ, АКТИВНЫХ В ОТНОШЕНИИ БАКТЕРИАЛЬНОГО МИТОТИЧЕСКОГО БЕЛКА FTSZ

Коблов И.А.[a], ***Семенов К.А.***[a,b], ***Чупров-Неточин Р.Н.***[c], ***Кислый В.П.***[a], ***Семенов В.В.***[a]

[a] *Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, koblov.nacl@yandex.ru*

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

[c] *Институт биофизики будущего, Московский центр перспективных исследований, Москва*

С начала XX в клинической практике применяется более 100 антибиотиков, особый интерес представляют антибиотики с новыми механизмами действия. Одной из перспективных мишеней для разработки антибактериальных препаратов является митотический белок FtsZ [1]. Ранее нами были получены аминоарил замещенные изоксазолы [2]. В настоящей работе в качестве антибактериальных агентов были исследованы аминоацилпроизводные данных изоксазолов (см. схему 1). Также был предпринят синтез ряда оксадиазоло[3,4-*b*]пиразинов.

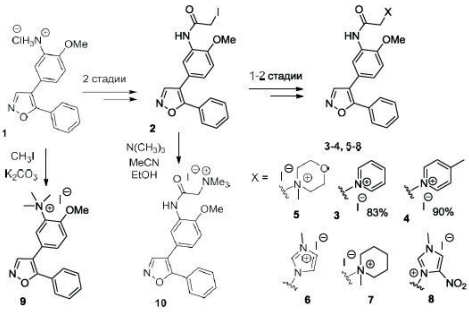


Схема 1. Получение аминоацилзамещенных диарилизоксазолов Полученные соединения были протестированы на E.Coli и S. Aureus. Активность проявили структуры, содержащие четвертичный атом азота, а также оксадиазолы.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда, проект № 25-24-00854.

Список используемой литературы

1. Wang Y.-T., Liu L.-T., et al. Recent advances in studies on FtsZ inhibitors // Biochemical Pharmacology. — 2024. — Т. 230. — С. 116551.
2. И.А. Коблов, К.А. Семенова, и др. Синтез водорастворимых вицинальных диарилизоксазолов — высокоактивных антимитотиков, дестабилизирующих микротрубочки. // Изв. РАН, сер. хим. — в печати

НОВЫЕ ГИБРИДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ D-СЕКОСТЕРОИДОВ И НАФТАЛИМИДА

Цай С.[1,2], Чернобурова Е.И.[2], Иловайский А.И.[2], Заварзин И.В.[2]

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

[2]Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

Одной из главных проблем медицины является лечение раковых заболеваний. Известно, что производные D-секостероидов обладают значительным противоопухолевым потенциалом [1]. Известна также высокая антипролиферативная активность 1,8-нафталимидов [2]. Поэтому эти объекты были выбраны для создания гибридных-противораковых агентов.

В настоящей работе был разработан синтез новых гибридных соединений на основе D-секостероидов и производных нафталевого ангидрида. Целевые структуры получали реакцией нуклеофильного присоединения, где нуклеофилом выступал D-секостероидный гидразид, а электрофилом — полученные нами производные нафталевого ангидрида. В качестве исходных для синтеза D-секостероидов были использованы производные Δ^5-андростена (1), 5α-андростана (2) и эстрона (3). Использование данных стероидов позволит исследовать вклад архитектуры колец А и Б в формирование цитотоксических свойств гибридных молекул (Рис. 1).

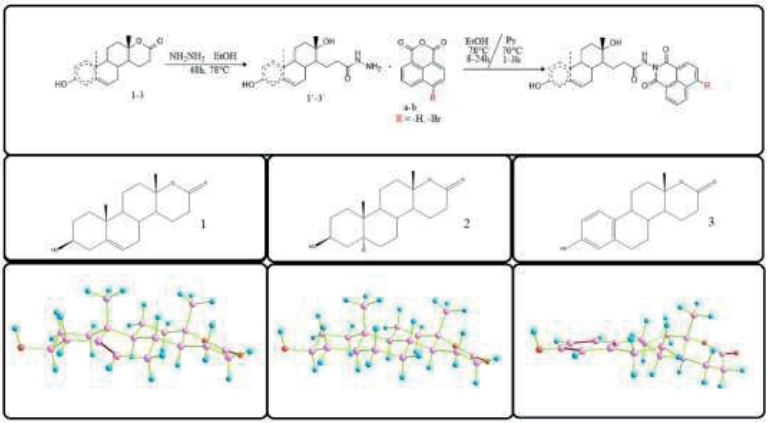


Рисунок 1. Схема реакции, 2D-структуры и 3D-структуры веществ 1-3.

Список используемой литературы

1. A.I.Ilovaisky, V.M.Merkulova, E.I.Chernoburova, M.A.Shchetinina, D.I.Salnikova, A.M. Scherbakov, I.V. Zavarzin, A.O. Terent'ev. *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.* 2021, *214*, 10600
2. M. Verma, V. Luxami and K. Paul.*RSC Adv*2015,*5*, 41803–41813.

МОДИФИКАЦИЯ КОЛЬЦА А В Г-ЛАКТОНЕ 17-ГИДРОКСИ-3-ОКСО-17А-ПРЕГН-4-ЕН-21-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

***Нижник О.А.*[1,2], *Чернобурова Е.И.*[2], *Иловайский А.И.*[2], *Заварзин И.В.*[2]**

[1]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

[2]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

Стероидные соединения — перспективная основа для создания противоопухолевых препаратов, способных преодолевать приобретенную резистентность. Направленная модификация стероидного скелета позволяет получать новые молекулы с повышенной биологической активностью. В настоящей работе с целью синтеза новых фармакологически активных производных проведена химическая модификация кольца А в молекуле γ-лактона 17-гидрокси-3-оксо-17α-прегн-4-ен-21-карбоновой кислоты (1, «альдона»).

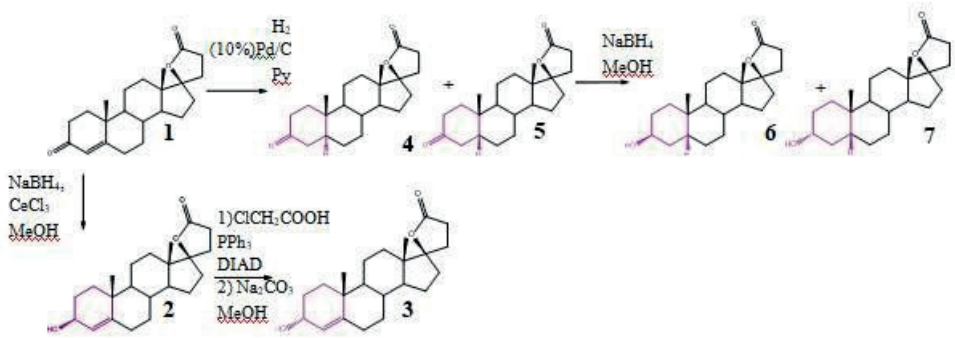


Схема 1. Общая схема синтеза.

В результате работы синтезировано 6 новых соединений (2–7) (рис. 1). Модификация включала восстановление 4,5-двойной связи в стероиде 1 до 5α- и 5β-изомеров (4, 5) и восстановление 3-кетогруппы в 1 и 5 до 3α- и 3β-гидроксипроизводных (2, 6, 7). Обращением конфигурации 3β-ОН группы в соединении 2 в условиях реакции Мицунобу получено 3α-ОН производное (3). В перспективе производные 2, 3, 6, 7 будут использованы для синтеза гибридных молекул и переданы на испытания антипролиферативной активности.

Список используемой литературы

1. Mackenzie I. S., Morant S. V., Wei L., Thompson A. M., MacDonald T. M. // British Journal of Clinical Pharmacology. — 2016. — Vol. 82, No. 6. — P. 1594–1603

АЭРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ СШИТОГО ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА, СОДЕРЖАЩИЕ РАСТИТЕЛЬНЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ ДОБАВКИ

Костандян Е.С., Давыдов Р.Э., Хаев А.О., Чистяков Е.М.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва,
eva.kostandyan@yandex.ru

Благодаря своей уникальной пористой структуре, высокой биосовместимости и влагопоглощению, аэрогели на основе поливинилового спирта (ПВС) представляют особый интерес в разработке перевязочных раневых материалов нового поколения [1]. Так как любое повреждение кожного покрова является первично инфицированным, актуальной задачей является придание раневым покрытиям антимикробных свойств. Использование в качестве антимикробных добавок растительных экстрактов и эфирных масел в настоящее время является перспективным и способно повысить эффективность терапии, так как позволяет одновременно ингибировать рост микроорганизмов и активно участвовать в процессе регенерации тканей [2].

Настоящая работа посвящена синтезу аэрогелей на основе сшитого глутаровым альдегидом ПВС (Mw=38-40 кДа), содержащих в качестве противомикробных добавок экстракт чеснока (ЭЧ) и эфирное масло розмарина (ЭМР). Химическое строение аэрогелей подтверждали методом ИК-спектроскопии. Максимальная водопоглощающая способность аэрогелей, содержащих экстракт чеснока и эфирное масло розмарина составила 276 % и 229 % соответственно. Методом сканирующей электронной микроскопии подтверждена макропористая структура геля с размерами пор достигающих до 100 микрон. Антимикробную активность образцов в отношении тест-культур *S. aureus*, *E. coli*, *S. epidermidis* оценивали методом дисковой диффузии в агар. Было установлено, что оба образца способны ингибировать рост микроорганизмов.

Таким образом синтезированные аэрогели, содержащие противомикробные растительные добавки, могут быть использованы в качестве компонентов раневых повязок, обладающие способностью эффективно впитывать раневой экссудат, ингибировать рост микроорганизмов и стимулировать процесс заживления раны.

Список используемой литературы

1. Jin S.G. Production and Application of Biomaterials Based on Polyvinyl alcohol (PVA) as Wound Dressing // *Chemistry — An Asian Journal*. 2022. Vol. 17. Is. 21. P. e202200595.
2. Firoozbahr M. et al. Recent Advances in Using Natural Antibacterial Additives in Bioactive Wound Dressings // Pharmaceutics. 2023. Vol. 15. Is. 2. P. 1-33.

ВКЛЮЧЕНИЕ 17-ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕВОГО ЭФИРА ПИРОФЕОФОРБИДА *а* В СОСТАВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОСИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА И СЫВОРОТОЧНЫЙ АЛЬБУМИН

Торопцева А.В.[1], Горобец М.Г.[1], Абдуллина М.И.[1], Шалупов А.И.[1], Градова М.А.[2], Белых Д.В.[3], Бычкова А.В.[1]

[1] Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, stropdiva@yandex.ru

[2] Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

[3] Институт химии Коми научного центра Уральского отделения РАН, Сыктывкар

Создание и оценка эффективности функциональных гибридных наноструктур, обладающих широким спектром биомедицинского применения является актуальной задачей для современных исследователей в сфере бионанотехнологий. В настоящей работе состав гибридной наноструктуры предопределяет ее физико-химические свойства: основа из наночастиц оксидов железа (МНЧ) позволит осуществлять магнитно-резонансые исследования, гипертермию и термоабляцию, а также концентрировать наносистему в целевой области градиентом магнитного поля; покрытие, основным компонентом которого является человеческий сывороточный альбумин, предовратит нежелательную адсорбцию белков плазмы крови, облегчит модификацию наносистемы лигандами различного применения и повысит биосовместимость наносистемы; включение в состав наносистемы фотосенсибилизатора 17-диэтиленгликолевого эфира пирофеофорбида *а* (пиро-ДЭГ) раскрывает возможности к проведению фотодинамической терапии со сниженной цитотоксичностью в темноте и высокой фотоиндуцированной цитотоксичностью в отношении некоторых раковых клеточных линий, например, HeLa, A549, Hek293.

Проведено связывание пиро-ДЭГ и ЧСА в различных условиях реакции (% об. содержание ДМСО, мольное соотношение компонентов, время инкубации). Осуществлено включение пиро-ДЭГ в состав наносистемы двумя способами — добавление лиганда к альбуминизированным наночастицам и адсорбция альбумина со связанным с ним лигандом на поверхности МНЧ. Выявлены следующие физико-химические параметры синтезированных наносистем: гидродинамический диаметр системы, устойчивость и целостность покрытия, концентрация ЧСА и МНЧ в составе наносистем, пероксидазоподобная активность МНЧ в составе наносистем, фотохимическая активность пиро-ДЭГ в составе наносистем.

РАЗРАБОТКА ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ДЕЦЕЛЛЮЛЯРИЗОВАННОЙ ТКАНИ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ РАНЕВЫХ ДЕФЕКТОВ КОЖИ

***Белова А.Д.*[1], *Кузнецова Е.Г.*[1], *Пономарева А.С.*[1], *Нефоткина В.С.*[2], *Басок Ю.Б.*[1]**

[1] ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва, sashak1994@mail.ru

[2] ФГБОУ ВО «МИРЭА — Российский технологический университет», Москва

Восстановление целостности кожных покровов при острых и хронических ранах остается актуальной медицинской проблемой, диктующей необходимость совершенствования существующих и разработки новых методов и подходов к лечению раневых дефектов. Целью работы являлась разработка и исследование коллагенсодержащего гидрогеля на основе продукта ферментативного гидролиза печени свиньи (ПФГПс).

Материалы и методы. Гидрогель получали, подвергая децеллюляризованные микрочастицы печени свиньи ферментативному гидролизу пепсином в присутствии 0,5М уксусной кислоты [1, 2]. Процесс формирования гидрогелей происходил в нейтральной среде при температуре 37°С. Кинетику полимеризации исследовали с помощью спектрофотометра Tecan Spark 10M. В составе гидрогеля анализировали содержание фибриллярного коллагена (Sircol Soluble Collagen Assay, Biocolor). Цитотоксичность образцов изучали на культуре фибробластов мыши линии NIH/3T3 методом прямого контакта.

Результаты. При исследовании процесса полимеризации наблюдалось формирование S-образной кинетической кривой и достижение фазы плато к 120 минуте наблюдения, при которой происходила стабилизация гидрогеля. Содержание коллагена составило 98,8±0,9 мкг/мг. По отношению к фибробластам мыши гидрогели не проявляли цитотоксического эффекта *in vitro*.

Заключение. Разработан коллагенсодержащий гидрогель на основе ПФГПс, способный к полимеризации в физиологических условиях и не проявляющий цитотоксических свойств *in vitro*. Полученные результаты позволяют перейти к более детальным исследованиям разработанного гидрогеля.

Список используемой литературы

1. Kirillova A.D. et al. Creating a tissue-specific microdispersed matrix from a decellularized porcine liver // Inorganic Materials: Applied Research, 2021, 12(3). 812–819.
2. Немец Е.А. и др. Особенности технологии децеллюляризации фрагментов печени человека как тканеспецифического мелкодисперсного матрикса для клеточно-инженерной конструкции печени // Вестник трансплантологии и искусственных органов, 2017, 19(4). 70–77.

БУЛЕВО МОДЕЛИРОВАНИЕ СИГНАЛЬНЫХ ПУТЕЙ WNT/B-CATENIN И PI3K/AKT/MTOR ПРИ ОКИСЛИТЕЛЬНОМ СТРЕССЕ: ПРЕДСКАЗАНИЕ УЗЛОВ-МИШЕНЕЙ

Борисенко Е.А. [1]

[1] *Лаборатория «Молекулярная нейробиология», НИИ физической и органической химии, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия; ebori@sfedu.ru*

Пути канонического Wnt и IGF–PI3K–AKT–mTOR, пересекающиеся через GSK3β, критически важны для выживания нейронов при окислительном стрессе. Построена интегрированная булева модель (23 узла) для анализа динамики этой сети.

При окислительном стрессе сеть сходится к единственной фиксированной точке с выключенным Wnt-выходом (TCF/LEF=0). Бит-флип анализ показал полную робастность состояния (return rate=1.0), причем узлы обратных связей (PI3K, AKT, GSK3β) формируют барьер релаксации (40–50 шагов).

Скрининг пертурбаций (рис. 1) выявил, что нокаут DKK1, CK1, bCat_PS45 или GSK3β_bound полностью восстанавливает TCF/LEF. Оверэкспрессия PTEN или нокаут PI3K индуцируют циклические аттракторы с осцилляциями AKT/mTORC1 (~50% ON), указывая на нестабильность ответа при таргетинге PI3K-ветви.

Модель предсказывает DKK1 и CK1 как перспективные мишени для фармакологического восстановления Wnt-сигналинга при окислительном стрессе.

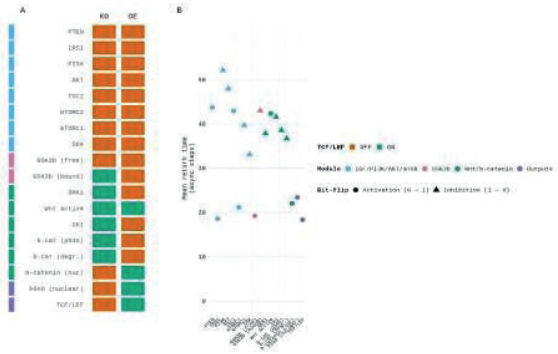


Рисунок 1. Панель A: Тепловая карта результатов KO/OE-скрининга для сценария окислительного стресса. Панель B: Профиль робастности стрессового состояния (бит-флип анализ). Время возврата (Mean return time) для 18 внутренних узлов сгруппировано по модулям.

Работа поддержана Министерстовом Науки и Высшего образования (FENW 2026-0009)

РОЛЬ АЦЕТИЛТРАНСФЕРАЗ В ФИТОИММУННОМ ОТВЕТЕ ПШЕНИЦЫ НА ИНФИЦИРОВАНИЕ ВОЗБУДИТЕЛЕМ СЕПТОРИОЗА

Воротник И.С.

УФИЦ РАН, Институт биохимии и генетики», Уфа, ilavorotnik@gmail.com

Септориоз, вызываемый аскомицетным грибом *Parastagonospora nodorum*, относится к числу наиболее экономически значимых болезней мягкой и твердой пшеницы (*Triticum aestivum* L.). Заболевание поражает листья, листовые влагалища и колос, приводя к потерям урожая [1]. Углубленное понимание молекулярных механизмов взаимодействия «пшеница – *P. nodorum*» необходимо для разработки рациональных стратегий селекции и создания эффективных иммуномодуляторов.

Состояние клеточной стенки активно регулируется в ходе инфицирования. Ацетильные группы ксиланов влияют на формирование вторичной клеточной стенки и устойчивость к ферментативной деградации патогенами [2]. Ключевыми ферментами, контролирующими уровень ацетилирования полисахаридов, являются ацетилтрансферазы. Цель — систематизация данных о функциях ацетилтрансфераз полисахаридов в фитоиммунитете пшеницы при септориозе.

Получены основные результаты.

1. Ацетилирование хитина как ключевой фактор PTI-ответа. Ацетилированные хитоолигосахариды (степень ацетилирования 65%) индуцируют у пшеницы экспрессию анионной пероксидазы и ингибиторов протеиназ, укрепляя клеточную стенку и подавляя грибные протеазы. Деацетилированные формы неэффективны.

2. О-ацетилирование ксилана (семейство TBL/ESK1) — регуляция структурной целостности и сигналинга. Предполагается ESK1-ацетилтрансферазы у пшеницы обеспечивают устойчивость в ответе на *P. Nodorum*. Дефицит ацетилирования ксилана воспринимается как DAMP-сигнал, запускающий компенсаторную активацию защитных генов через абсцизовую кислоту.

3. Связь с ацетилированием белков и эпигенетикой. У пшеницы гистоновые ацетилтрансферазы такие как, TaHAG1 регулируют экспрессию генов устойчивости. Ацетилирование транскрипционных факторов усиливает защитный ответ.

Сделаны выводы.

1. Баланс ацетилирования хитина и ксилана в зоне инфекции — критический фактор, определяющий исход взаимодействия пшеницы с *P. nodorum*.

2. Ацетилированные хитоолигосахариды — перспективная основа для иммуномодуляторов. Гены TBL/ESK1 и предполагаемые хитин-ацетилтрансферазы — мишени для маркер-ориентированной селекции и геномного редактирования.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ И СОЛЮБИЛИЗИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ТОКОФЕРОЛА ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ СУКЦИНАТА

***Гаврилов А.В.*[1], *Стрельцова К.А.*[1]**

[1] *МИРЭА — Российский технологический университет, Москва, a.gavrilov-v@yandex.ru*

Низкая растворимость многих лекарственных веществ в водных средах является существенным ограничением при создании эффективных лекарственных форм. Одним из подходов к повышению растворимости гидрофобных соединений является применение амфифильных веществ, способных к самоорганизации в водных растворах. К числу таких соединений относится токоферола полиэтиленгликоля сукцинат (TPGS) — водорастворимое производное витамина Е, молекула которого сочетает гидрофобный фрагмент α-токоферола и гидрофильную полиэтиленгликолевую цепь.

Амфифильное строение TPGS определяет его поверхностно-активные свойства и способность к образованию ассоциатов в водной среде. При достижении определенной концентрации молекулы TPGS самоорганизуются в мицеллярные структуры: гидрофобные фрагменты ориентируются преимущественно во внутреннюю область агрегата, а гидрофильные полиэтиленгликолевые цепи формируют внешнюю оболочку, контактирующую с водой. Переход от преимущественно молекулярно-дисперсного состояния к образованию мицелл характеризуют критической концентрацией мицеллообразования (ККМ).

Особенности строения мицелл TPGS обусловливают их способность включать липофильные соединения во внутреннюю гидрофобную область. Такой процесс рассматривается как солюбилизация и приводит к увеличению кажущейся растворимости веществ, малорастворимых в воде. Эффективность солюбилизации связана со строением гидрофобного соединения, концентрацией амфифильного компонента, характеристиками образующихся агрегатов и условиями среды. Благодаря этому TPGS представляет интерес как компонент систем доставки гидрофобных лекарственных веществ.

Исследование мицеллообразования амфифильных систем основывается на изменении физико-химических свойств раствора при формировании агрегатов. Для определения ККМ могут использоваться методы, чувствительные к изменению состояния границы раздела фаз и микросреды раствора, в том числе тензиометрия и спектрофотометрические подходы. Размер и распределение мицеллярных частиц могут характеризоваться методом динамического рассеяния света.

Теоретическое рассмотрение этих закономерностей служит основой для понимания применения TPGS в составе мицеллярных систем и лекарственных форм, предназначенных для работы с малорастворимыми соединениями.

ПОЛИМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ КОЛХИЦИНА: ИНКАПСУЛИРОВАННЫЕ И КОНЪЮГИРОВАННЫЕ ФОРМЫ

Соломаха О.А., Джужа А.Ю., Скорик Ю.А., Коржикова-Влах Е.Г.

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург

Колхицин представляет собой природный алкалоид с выраженным противовоспалительным действием, который в последние годы привлек внимание кардиологов для вторичной профилактики сердечно-сосудистых заболеваний. Однако его клиническое применение серьезно ограничено высокой системной токсичностью, в связи с чем разработка современных систем доставки колхицина становится критически важной задачей. Использование систем доставки может позволить снизить токсичность и обеспечить контролируемое высвобождение лекарственной субстанции.

В рамках данной работы были разработаны различные полимерные системы доставки колхицина. Для получения инкапсулированных наноформ использовали амфифильный полипептид способный к самоорганизации в водной среде. Полипептид был синтезирован методом полимеризации с раскрытием цикла *N*-карбоксиангидридов аминокислот и содержал звенья глутаминовой кислоты и лейцина. В водной среде полипептид формировал наночастицы с гидродинамическим диаметром менее 200 нм и отрицательным дзета-потенциалом. Эффективность инкапсулирования колхицина зависела от начального количества лекарства, взятого для загрузки. При инкапсулировании колхицина гидродинамический диаметр наночастиц возрастал. Высвобождение колхицина носило взрывной характер, значительная часть лекарства высвобождалась в течение первых суток. Для получения наноформ с более пролонгированным профилем высвобождения лекарства были получены конъюгированные формы колхицина с различными полимерами. В этом случае, использовали аминосодержащий колхицин и полипептид на основе глутаминовой кислоты и лейцина, а также анионные полисахариды. Конъюгирование проводили за счет реакции аминогруппы колхицина с активированными эфирами, полученными после активации карбоксильных групп полимеров. Успешность конъюгирования была подтверждена методом ^{1}H ЯМР-спектроскопии. Полученные конъюгаты демонстрировали более пролонгированный характер высвобождения лекарства по сравнению с инкапсулированными формами. Все полученные системы доставки были стабильны при хранении в условиях пониженной температуры в течение нескольких недель.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ-СПбНФ №25-15-20110.

ADP-РИБОЗИЛИРОВАНИЕ РИБОСОМНОГО БЕЛКА EL6 ЧЕЛОВЕКА ФЕРМЕНТАМИ PARP1 И PARP2 *IN VITRO*

Жакупова Ю.Б. [1,2]***, Красников А.С.*** [1,2]***, Науменко К.Н.*** [2]***, Малыгин А.А.*** [2]***, Лаврик О.И.*** [2]***, Грайфер Д.М.*** [1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, y.zhakupova@g.nsu.ru*

[2] *Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск*

Поли(ADP-рибозил)ирование (PAR-илирование) — посттрансляционная модификация, при которой к белкам присоединяются звенья из ADP-рибоз. Реакция катализируется поли(ADP-рибоза) полимеразами (PARP), которые используют молекулы NAD^+ как источник ADP-рибозных остатков. Семейство PARP человека включает 17 белков, наиболее изученные из них — ядерные PARP1 и PARP2. Их активность регулируется несколькими белками, в частности, фактором PAR-илирования гистонов 1 (HPF1). Наше недавнее исследование [1] показало, что ключевой мишенью для модификации ферментами PARP1/2 среди суммарного рибосомного белка, выделенного из 60S субчастицы человека (TP60S), является белок eL6 (RPL6). Известно, что он обладает яркой внерибосомной функцией: eL6 рекрутируется PARP1-зависимым образом к поврежденным участкам ДНК, взаимодействуя с фосфорилированным гистоном H2AX, способствуя запуску сигнального каскада для привлечения факторов репарации [2]. Однако остается неизвестным происходит ли в этом процессе PAR-илирование eL6.

Нами показано, что индивидуальный рекомбинантный белок eL6-$(His)_6$ PAR-илируется ферментами PARP1/2 как в присутствии, так и в отсутствии HPF1. Было выявлено влияние уровня двуцепочечной ДНК с повреждениями на модификацию eL6-$(His)_6$ и природного eL6 в составе TP60S: снижение концентрации ДНК стимулирует PAR-илирование eL6-$(His)_6$. Напротив, в случае TP60S, при снижении концентрации ДНК, происходит подавление как реакции PAR-илирования самих PARP1/2, так и природного eL6.

Исследование поддержано грантом РНФ (№ 25-74-10045).

Список используемой литературы

1. Krasnikov A. S., Naumenko K. N., Kutuzov M. M., Zhakupova Y. B., Pavlov M. O., Malygin A. A., Pastre D., Graifer D. M., Lavrik O. I. Interplay between human ribosomal proteins, PARP1, PARP2, HPF1 and histones // bioRxiv, 2025.
2. Yang C., Zang W., Ji Y., Li, T., Yang, Y., and Zheng, X. Ribosomal protein L6 (RPL6) is recruited to DNA damage sites in a poly(ADP-ribose) polymerase-dependent manner and regulates the DNA damage response // The Journal of Biological Chemistry, 2019, № 294. С. 2827-2838.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСА P TAU БЕЛКА И ИОНОВ КАЛЬЦИЯ

Ивашков С.С.

Белорусский Государственный Медицинский университет, Минск, stepan.ivashkov.07@inbox.ru

Изучение процессов кальцификации нейронов на квантовом уровне при болезни Альцгеймера позволяет понять механизмы заболевания на фундаментальном уровне. В статье описаны результаты квантово-химических расчетов для комплекса p Tau белка и ионов кальция.

При выполнении работы были использованы следующие базы данных: PDB, PubMed, Materials Project. Для исследования квантовых эффектов в молекулах применялись программы GausView, Gaussian09W.

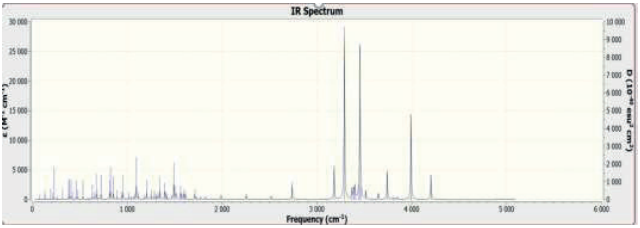


Рисунок 1. Инфрокрасный спектр комплекса p Tau и ионнов кальция

Связывания ионов кальция изменяет пространственную структуру Tau белка. Электронная энергия комплекса составила -1763,68 Хатри, что характеризует ее как систему среднего размера. Дипольный момент равен 17.91Дебай (Дб), что свидетельствует о сильной полярности комплекса. Наличие только положительных колебательных частот (0–422 $см^{-1}$) свидетельствует о том, что молекула находится в состоянии локального минимума, на поверхности потенциальной энергии. Спектр в представленном диапазоне типичен для гибких молекулярных каркасов, имеющие слабые нековалентные взаимодействия.

Таким образом, результаты in silico подтвердили, что ионы кальция влияют на развитие патологии Tau белка, что, согласно литературным данным последних лет, может приводить к развитию болезни Альцгеймера.

Список используемой литературы

1. Reddy PH, Oliver DM Amyloid Beta and Phosphorylated Tau-Induced Defective Autophagy and Mitophagy in Alzheimer's Disease. Cells. 2019 May 22 page 488.
2. Цышевский Р.В., Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций Издательство КНИГУ, Казань, 2012. — 87 с.

ЗЕЛЕНЫЙ ВЕКТОР ВЕТЕРИНАРИИ: В ПОИСКАХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ И ЭФФЕКТИВНЫХ ДЕЗИНФЕКТАНТОВ

***Марченко В.А.*[1], Иващенко Л.И.[2,3], Облогина Е.Ю.[3]**

[1] «Кубанский государственный аграрный университет имени И.Т. Трубилина», Краснодар, vladmarch11@gmail.com

[2] «Кубанский государственный университет», Краснодар, chemical000brains@gmail.com

[3] ООО НИЦ «БОНАКА», Краснодар, elena.oblogina@bonaka.ru

Промышленное животноводство сталкивается с проблемой роста антибиотико-резистентности микрофлоры и формирования устойчивых бактериальных биопленок на фермах. Массовое применение Cl-содержащих веществ и формальдегида привело к токсич-ному загрязнению окружающей среды. В связи с этим в ветеринарной санитарии сформировался устойчивый «зеленый вектор», направленный на поиск биоцидных агентов, сочетающих высокую противомикробную активность с экологической безопасностью [1]. Ключевым трендом стал переход к «зеленой химии» — биоразлагаемым составам, которые распадаются на нетоксичные компоненты [2]. Современные многокомпонентные эко-формулы обладают низким классом опасности и высокой технологичностью (см. таблицу 1). Их внедрение позволяет проводить эффективную профилактическую обработку помещений даже в присутствии животных без риска для их здоровья, выводя биологическую безопасность ветеринарных объектов на качественно новый уровень.

Таблица 1. Сравнительная характеристика экологически безопасных ветеринарных дезинфектантов

Активные вещества	Преимущества и спектр действия	Продукты распада / Эко-след
Пероксидные комплексы	Быстро разрушают биопленки. Уничтожают бактерии, вирусы и грибы.	Вода и кислород (полная биоразлагаемость).
Органические кислоты	Работают в присутствии животных. Регулируют pH, активны против бактерий.	Углекислый газ и вода (естественные метаболиты).
Фитокомпозиции	Безопасны для персонала. Обладают бактериостатическим эффектом.	Природные компоненты (нулевой токсический след).

Список используемой литературы

1. Tong Y. et al. Current progress, opportunities and challenges of developing green disinfectants for the remediation of disinfectant emerging contaminants //Sustainable Chemistry and Pharmacy. — 2024. — Т. 42. — С. 101775.
2. Nametov A. et al. Natural antiseptics in veterinary practice: Evaluation of efficacy and safety // Pathogens. — 2025. — Т. 14. — №. 4. — С. 321.

ОПТИМИЗАЦИЯ БИОСИНТЕЗА ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ *SCHIZOPHYLLUM COMMUNE* ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕЛАССЫ В КАЧЕСТВЕ ИСТОЧНИКА УГЛЕРОДА

***Кугрышева Т.Д.*, Винокуров В.А.**

РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, город, tazhigalina@mail.ru

Schizophyllum commune является перспективным объектом биотехнологии благодаря способности синтезировать широкий спектр биологически активных соединений, среди которых особое значение имеют внеклеточные полисахариды. Среди них наиболее изученным является шизофаллан — β-глюкан с выраженной биологической активностью, представляющий интерес для фармацевтической и пищевой промышленности, а также для разработки функциональных биоматериалов [1].

Эффективность биосинтеза полисахаридов определяется условиями культивирования и составом питательной среды, в частности доступностью источников углерода. В связи с этим актуальным является применение доступных субстратов, в том числе побочных продуктов пищевой и перерабатывающей промышленности. Перспективным источником питательных веществ является меласса, содержащая углеводы, минеральные вещества и другие компоненты, способные обеспечивать рост грибной культуры [2].

В рамках работы проведено культивирование *S. commune* на питательной среде с использованием мелассы в качестве доступного источника углерода. Для оптимизации состава среды исследовано влияние концентрации мелассы на рост грибной культуры и образование внеклеточных полисахаридов. После завершения культивирования культуральную жидкость отделяли от биомассы, а экзополисахариды (ЭПС) выделяли методом осаждения органическим растворителем с последующим высушиванием и определением выхода полученного продукта.

Полученные результаты демонстрируют зависимость образования ЭПС от концентрации мелассы в питательной среде. Подбор оптимальной концентрации субстрата позволяет определить условия, обеспечивающие наиболее эффективный синтез внеклеточных полисахаридов. Использование мелассы в качестве альтернативного источника углерода представляет интерес для разработки более экономичной технологии культивирования *Schizophyllum commune* и получения ценных грибных полисахаридов.

Список используемой литературы

1. Zhang Y., Wang X., Li S. et al. Schizophyllan: A review on its structure, properties, bioactivities and recent developments // Bioactive Carbohydrates and Dietary Fibre. 2013. Vol. 1, No. 1. P. 53–71.
2. Jamshidian H. et al. Characterization and optimization of schizophyllan production from date syrup //International journal of biological macromolecules. — 2016. — Т. 92. — С. 484-493.

ОКИСЛЕНИЕ НАДУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ 2-ЦИАНОТИОАКРИЛАМИДОВ И 2-ТИОКСОПИРИДИНОВ

***Лихоман А.Е.*[1], *Доценко В.В.*[1-3]**

[1]Кубанский государственный университет, Краснодар, E-mail: nastahbrv@gmail.com

[2]Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь

[3]Лаборатория «Химэкс», Луганский государственный университет имени Владимира Даля, Луганск

Известно, что окисление тиоамидов в органическом синтезе одна из самых непредсказуемых реакций и может приводить к широкому спектру продуктов. Строение продуктов окисления существенно зависит от строения исходного субстрата, условий проведения реакции и природы окислителя. Большинство из продуктов окисления обладают биологической активностью. Так, производные 1,2,4-тиадиазолы обладают нейропротекторной, антихолинэстеразной и антиоксидантной активностью [1], а дисульфиды являются комплексообразователями [2].

Так в настоящей работе было изучено действие надуксусной кислоты на производные цианотиоацетамида. Исходные 2-цианотиоакриламиды **1** и 2-тиоксопиридин **2** были введены в реакцию с надуксусной кислотой. Обнаружено, что в ходе реакции происходит образование карбоксамидов **3** и дисульфидов **4** соответственно (см. рисунок 1).

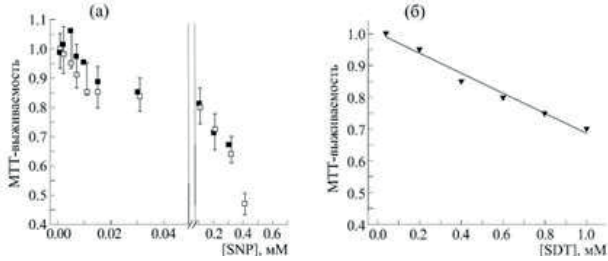


Рисунок 1. Схемы реакций окисления 2-цианотиоакриламидов **1** *и 2-тиоксопиридинов* **2**

Список используемой литературы

1. Proshin A.N., Yakubovich L.N., Serkov I.V. et al. 5-Amino-3-(2-aminopropyl)-1,2,4-thiadiazoles as the basis of hybrid multifunctional compounds // Russian Chemical Bulletin, 2014, vol. 63, no. 5, pp. 1148–1152.
2. Wang J., Zheng S.L., Hu S. et al. New In Situ Cleavage of Both S–S and S–C(sp2) Bonds and Rearrangement Reactions toward the Construction of Copper(I) Cluster-Based Coordination Networks // Inorg. Chem., 2007, vol. 46, no. 3, pp. 795–800.

МОЛЕКУЛЯРНО-БИОФИЗИЧЕСКИЕ ДЕТЕРМИНАНТЫ АРХИТЕКТУРЫ CYP4 И CYP6: МЕХАНИЗМЫ АДАПТАЦИИ, МЕМБРАННОЕ ЗАКРЕПЛЕНИЕ И ЗАРЯДОВОЕ ЗОНИРОВАНИЕ

***Мельников Г.А.*[1,2], *Кыров Д.Н.*[2]**

[1] *Тюменский государственный университет, Тюмень, melnikovgordei@yandex.ru*
[2] *Тюменский государственный университет, Тюмень*

На основе 1D-дескрипторов аминокислотной последовательности изучены свойства, потенциально связанные с мембранным закреплением и биофизикой глобулы. Предложены три авторских параметра: DI (Density Index) — суммарная длина кластеров одноименно заряженных остатков; ICDI (Inter-Cluster Distance Index) — медианное расстояние между кластерами; WKDI (Weighted Kink Distance Index) — потенциал изгибов TM-якоря, учитывающий положение пролина и глицина относительно центра TM-домена (WKDI = Σ(вес × 1/расстояние от центра)). Анализ выполнен на 12 изоформах CYP4 и CYP6 Musca domestica с использованием корреляции Кендалла (τ).

Выявлены устойчивые различия зарядовых профилей: CYP4 характеризуются высоким DI [36–43] и низким ICDI [7–19]; CYP6 — низким DI [16–32] и высоким ICDI [22–66]. Это отражает более плотное расположение длинных кластеров у CYP4 и рассеянность коротких кластеров у CYP6, что может указывать на различия в стратегиях мембранного закрепления. Для всей выборки установлена связь DI с углом наклона TM-спирали (τ = — 0.484, p = 0.04), что согласуется с гипотезой о выталкивании глобулы при высоком DI и коррелирует с более длинным TM-ядром у CYP4. В подвыборке CYP4 (n = 5) DI коррелирует с числом внемембранных остатков (TMHMM outside: τ = 0.889, p = 0.03), что также поддерживает гипотезу о зарядовом смещении глобулы. ICDI со средним радиусом инерции (Rg) первых 60 a.o.: (τ = 0.473, p = 0.03) — рассеянные кластеры — больше латеральное трение — компенсация короткого якоря. WKDI демонстрирует обратную связь с гидрофобным несоответствием (CYP6: τ = –0.82, p = 0.02) и средним Rg первых 60 a.o. (Rg: τ = –0.627, p = 0.008), указывая на компенсаторную роль изгибов TM-якоря.

Предложенные 1D-дескрипторы позволяют выявлять межсемейственные различия зарядового профиля и их связь с биофизическими параметрами. Несмотря на ограниченный размер выборки (n = 12), получены статистически значимые корреляции, отражающие потенциальную значимость дескрипторов. Необходима дальнейшая валидация на расширенном наборе данных.

Список используемой литературы

1. Lamb D. C., Waterman M. R. Unusual properties of the cytochrome P450 superfamily // Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences. — 2013. — Vol. 368, No. 1612. — P. 20120434. — DOI: 10.1098/rstb.2012.0434.

РАЗРАБОТКА СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВИНМОНОНУКЛЕОТИДА В ПЕРФУЗИОННОМ РАСТВОРЕ ПЕЧЕНИ

***Морозов Д.А.*[1,2], *Белова А.Д.*[1], *Кузнецова Е.Г.*[1], *Басок Ю.Б.*[1]**

[1] *ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва, morozov-d-a@mail.ru*

[2] *ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России, Москва*

Ишемически-реперфузионно-консервационное повреждение (ИКРП), возникающее при длительной холодовой консервации печени, повышает риск дисфункции аллографта. Для снижения ИКРП применяется машинная перфузия [1, 2]. Уровень флавинмононуклеотида (ФМН) в полученном в ходе перфузии растворе может рассматриваться как предиктор приживаемости трансплантата. Существующие методы определения ФМН трудоемки или не доступны для рутинной лаборатории. Цель исследования — разработка спектрофлуориметрического метода количественного определения ФМН в перфузионных растворах, применяемых при процедуре машинной перфузии трансплантатов печени.

Материалы и методы. Объектом исследования выступал раствор для проведения машинной перфузии печени на основе Кустодиола. Для приготовления стандартных образцов использовали Рибофлавин-мононуклеотид, разведенный в диапазоне концентраций 0,015-0,5 мкг/мл. Уровень ФМН определяли по интенсивности флуоресценции перфузата при длинах волн возбуждения/эмиссии 485/528 нм.

Результаты. Метод показал высокую точность (стандартное отклонение при исследовании модельных образцов <2%), линейность (коэффициент корреляции >0,99) и сходимость (стандартное отклонение при измерении образцов с известной концентрацией ФМН разными сотрудниками в разное время <3%). Оценка устойчивости метода показала допустимость хранения образцов перфузата до 1 месяца при -18 °C.

Заключение. В данной работе мы показали возможность спектрофлуориметрического количественного определения ФМН в перфузионном растворе, применяемом при проведении машинной перфузии печеночных трансплантатов.

Список используемой литературы

1. Басок Ю.Б. и др. Применение мезенхимальных стромальных клеток при трансплантации солидных органов: вызовы и перспективы (систематический обзор) // *Вестник трансплантологии и искусственных органов*. 2025, 1. 114–134.
2. Schlegel A. et al. Machine perfusion of the liver and bioengineering // *Journal of hepatology.* 2023, 78. 1181–1198.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭСТРОГЕНОВ НА ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА МИКРОБИОТЫ ВЛАГАЛИЩА

Москвина А.А., Деева Т.А.

ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет), Москва, moskvinaanna11@gmail.com

Состояние микробиоты влагалища служит важным индикатором гормонального здоровья женщины и оказывает значительное влияние на ее репродуктивные возможности. Микробиом влагалища влияет на устойчивость к заболеваниям, передающимся половым путем, урогенитальным кандидозам, снижает риск развития патологичесих состояний при вынашивании плода. Особую роль в защите от чужеродных микроорганизмов играют лактобактерии, наиболее распространенные представители вагинальной микробиоты влагалища. Их численность менее подвержена колебаниям в течение менструального цикла. Молочная кислота и пероксид водорода, выделяемые лактобактериями в процессе жизнедеятельности, препятствуют заселению эпителия влагалища чужеродными микроорганизмами. Однако, механизмы влияния половых гормонов на состав микробиоты влагалища до сих пор недостаточно изучены. В работе проведен обзор 5 исследований, посвященных влиянию циклических колебаний уровня эстрадиола на жизнедеятельность, морфологические и биохимические особенности лактобактерий. Поиск литературы выполнялся в базах данных PubMed, Cyberleninka по ключевым запросам: vaginal microbiota, estrogen, Lactobacillus crispatus, biosurfactant, Candida albicans adhesion. Для анализа отбирались работы, опубликованные за последние 15 лет, включая мета-анализы. При этом особое внимание уделено прямому влиянию 17β-эстрадиола на *L. crispatus* колонии CIP104459, на их морфологию, микровязкость мембраны бактериальной клетки, способность выделять ими биосурфактант, блокирующий экспрессию генов, необходимых для прикрепления *Candida albicans* к эпителию влагалища и образования биопленок. Взаимодействие 17β-эстрадиола с мембранами бактерий приводило к снижению анизотропии, уменьшению размеров бактериальной клетки и к усилению выработки бактериями сурфактанта, обладающего антиадгезивными свойствами в отношении грибов рода Candida. Было установлено, что некоторые лактобактерии имеют особый рецептор к эстрадиолу. Так, у экспериментальной группы мышей с делецией гена к α-рецептору эстрогенов было обнаружено повышение вагинальной кислотности, снижение концентрации гликогена в клетках и заселение эпителия оппортунистическими бактериями. Полученные данные указывают на необходимость дальнейшего изучения молекулярных механизмов влияния концентрации эстрогенов на состав микробиоты влагалища. Понимание этих механизмов может иметь важное значение для разработки подходов к профилактике и коррекции дисбиотических состояний женской репродуктивной системы.

α-РОДАНОАЦЕТАМИДЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ТИЕНО[2,3-B]ХИНОЛИНОВЫЙ ФРАГМЕНТ: СИНТЕЗ И ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ

***Новак В.В.,* Киндоп В.К., Доценко В.В.**

Кубанский государственный университет, Краснодар,
varvara_no@mail.ru

Соединения, содержащие тиено[2,3-b]хинолиновый фрагмент обладают широким спектром биологической активности. Они обладают противотуберкулезным, противоопухолевым[1], антибактериальным, фунгицидным и противовоспалительным действием.

Целевые молекулы получали согласно схеме 1. Ацетамиды хлоруксусной кислоты **3** под действием роданида калия были превращены в роданоацетамиды **4**, которые под действием температуры циклизуются с образованием промежуточных 2-иминотиазолинов **5**. Последние, подвергаясь рециклизации, дают конечные продукты-пиридотиенопиримидины **6**.

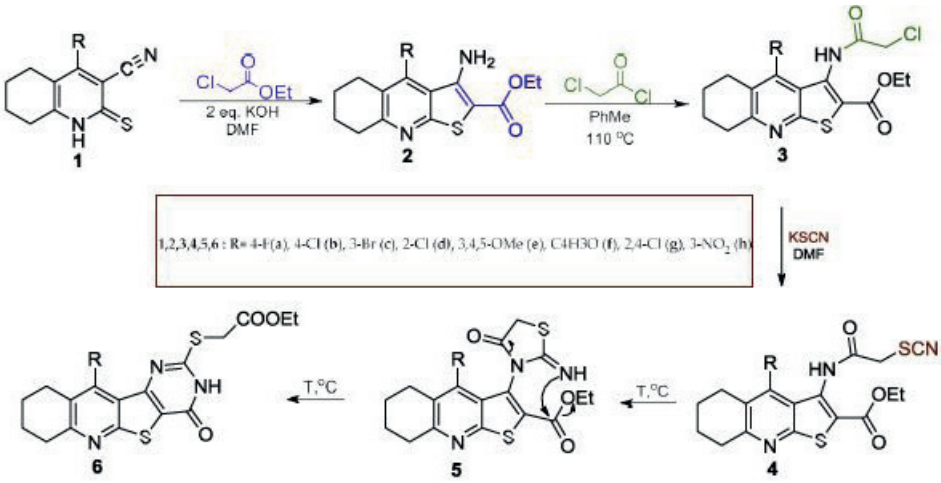


Схема 1. Синтез пиридотиенопиримидинов **6**

Строение полученных соединений подтверждено комплексом спектральных методов (ИК, ЯМР-спектроскопия).

Принимая во внимание фармакологическую активность соединений данного ряда, было целесообразно спрогнозировать профили противоцелевого взаимодействия при помощи сервиса **Way2drug**. Так, целевые соединения с высокой вероятностью могут проявлять антиишемическое действие, а также связываться с рецепторами, связанными с кардиотоническим действием.

АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРИРОДНОГО ХЛОРИНА ETPA ИЗ OPHIURA SARSI

Подлесных С.В.[1,5*], Бембеева Б.О.[1], Припутневич Т.В.[1], Денисов П.А.[1], Красновский А.А.[3,4], Козлов А.С.[3], Бендиткис А.С.[3,4], Силачев Д.Н.[1,2]

[1]НМИЦ акушерства, гинекологии и перинатологии им. академика В. И. Кулакова, Москва
[2]НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
[3]Институт биохимии имени А. Н. Баха, ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва
[4]Московский педагогический государственный университет, Москва
[5]Алтайский государственный университет, Барнаул
stepanpodlesnykh@gmail.com

Антимикробная резистентность остается одной из ключевых угроз общественному здравоохранению. Так в 2019 г. с ней было связано 4,95 млн смертей, из которых 1,27 млн напрямую. Ограниченность мишеней у классических антибиотиков стимулирует поиск неантибиотических подходов. Антимикробная фотодинамическая терапия (aPDT) основана на совместном действии фотосенсибилизатора (ФС), света и молекулярного кислорода с генерацией активных форм кислорода (АФК), повреждающих сразу несколько классов биомолекул, что затрудняет формирование устойчивости.

Цель работы — оценить природный морской хлорин ETPA, выделенный из дальневосточной офиуры *Ophiura sarsi*, как кандидатный ФС для aPDT: фотофизическая характеристика, антибактериальная активность против MRSA и VRE, прямое сравнение с хлорином e6 (Chl e6), оценка свето/темновой селективности на клетках кожи. ETPA выделяли из этанольного экстракта *O. sarsi* последовательной экстракцией, жидкостно-жидкостным разделением и полупрепаративной ВЭЖХ; идентификацию подтверждали сравнением со стандартом. Спектры поглощения и флуоресценции регистрировали на спектрофотометре СФ-56 и флуориметре Perkin Elmer MPF-44B; ΦF определяли относительно родамина 6G.

Генерацию $^1O_2$ оценивали двумя независимыми методами — химическим тушением DPIBF и прямой регистрацией фосфоресценции $^1O_2$ при 1270 нм. Антибактериальную активность изучали на клинических изолятах MRSA и VRE при облучении красным светом (660 нм, 60 мин), рост оценивали по OD600. Цитотоксичность и фототоксичность исследовали MTT-тестом на фибробластах LWnt3A и кератиноцитах HaCaT. ETPA характеризуется типичным хлориновым спектром с выраженной Q-полосой при 661 нм и максимумами поглощения 409, 506, 537, 606 и 661 нм. Уровни ΦF и ΦΔ по данным двух методов указывают на эффективную генерацию

синглетного кислорода. При этом у Chl e6 ФД был несколько выше. При облучении ETPA вызывал концентрационно-зависимое подавление роста MRSA и VRE. Chl e6 демонстрировал сопоставимый дозозависимый профиль.

В отсутствие света ETPA практически не проявлял антибактериальной активности, тогда как Chl e6 при высоких концентрациях измеримо подавлял рост. В клетках LWnt3A и HaCaT оба ФС показали низкую темную цитотоксичность и выраженную фототоксичность.

ETPA сочетает эффективное поглощение в красной области, подтвержденную генерацию $^1O_2$ и выраженную светозависимую антибактериальную активность против MRSA и VRE, сопоставимую с Chl e6, при существенно более низкой светонезависимой активности и благоприятном профиле свето/темновой селективности. Полученные результаты расширяют область применения ETPA за пределы онкологических моделей и обосновывают его дальнейшее изучение как кандидатного ФС для локальной aPDT.

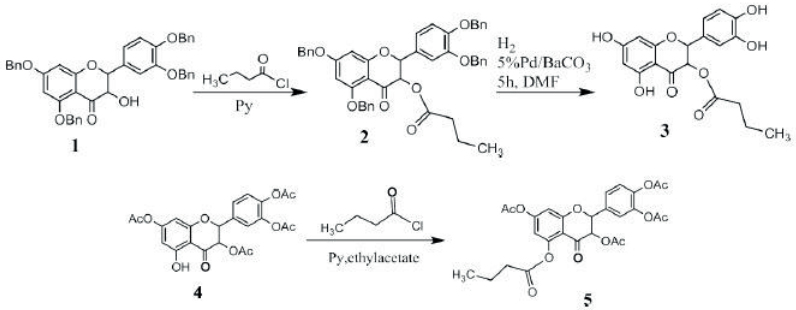
НОВЫЕ СЛОЖНОЭФИРНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ДИГИДРОКВЕРЦЕТИНА

Поздеев А.О.,[1] Коротеев А.М.,[1] Коротеев М.П.[1], Офицеров Е.Н.[2]

[а]Московский педагогический государственный университет, институт биологии и химии Москва, Starmansky@mail.ru

[6] Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва

Дигидрокверцетин (ДГК) является одним из наиболее известных и доступных флавоноидов. Его содержание в древесине лиственницы Сибирской достигает 3 % в пересчете на сухую древесину. Он выделяется из опилок деревообрабатывающей промышленности. Дигидрокверцетин обладает широким спектром биологической активности и является нетоксичным соединением, что повышает интерес к его функционализации и созданию на его основе новых биологически активных производных. В данной работе были впервые получены сложные эфиры ДГК и масляной кислоты различного строения. Масляная кислота, как и ДГК, обладают широким спектром биологической активности, например бутираты контролируют и снижают негативное воздействие ряда вирусов и болезнетворных бактерий [1], стабилизируют и увеличивают иммунологическую функцию [2].



В работе проведено исследование микроциркуляции новых соединений на основе масляной кислоты и полученных ранее сложноэфирных производных дигидрокверцетина.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства просвещения Российской Федерации (тема № 126031718849 "Междисциплинарные научнообразовательные подходы в получении биосовместимых форм природных соединений")

Список использованной литературы

1. Fernández-Rubio C. Poult. Sci., 2009, 88 (5), 943.
2. Manzanilla E.G, Nofrarías M., Anguita M. J. Anim. Sci., 2006. 84 (10), 2743.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА СРЕД ДЛЯ КРАТКОСРОЧНОГО ГИПОТЕРМИЧЕСКОГО ХРАНЕНИЯ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТРОМАЛЬНЫХ КЛЕТОК ПЕРЕД ИНФУЗИЕЙ

Пуха Е.Ю.[1,2], Пономарева А.С.[1], Круглов Д.Н.[1], Басок Ю.Б.[1]

[1] ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва,
[2] ФГАОУ ВО «Первый МГМУ им. И.М. Сеченова» Минздрава России, Москва,
puha.elizaveta@yandex.ru

Цель работы – оценить влияние состава среды и температуры на сохранность мезенхимальных стромальных клеток (МСК) человека при краткосрочном гипотермическом хранении и потенциально не требующую отмывки клеток перед инфузией.

Суспензию МСК 2-8-го пассажа (5×10^5 клеток/мл) хранили до 48ч при 4 или 22°С в 0,9% NaCl, растворах Рингера, Стерофундина и Хенкса (контроль), а также в средах с добавлением $NaHCO_3$ (стабилизация pH до 6,9-7,2), глюкозой (1 г/л) или Актовегином® (2 мг/мл). Через 24 и 48ч определяли жизнеспособность, после 5 суток рекультивирования — адгезию, морфологию и пролиферацию [1, 2].

Наибольшее снижение жизнеспособности МСК отмечали в первые 24ч. Хранение при 4°С и pH 6,9-7,2 способствовало лучшей сохранности клеток. Наиболее эффективными были растворы Рингера и Стерофундина с $NaHCO_3$ в сочетании с глюкозой или Актовегином®. Через 48ч жизнеспособность МСК в этих средах составляла 45-55%; после рекультивирования клетки сохраняли типичную морфологию, адгезию и пролиферативную активность. Показатели жизнеспособности после хранения не всегда соответствовали способности клеток к восстановлению в культуре.

Для краткосрочного хранения МСК предпочтительны условия гипотермии и среды со стабилизированным pH. При оценке транспортных сред необходимо учитывать не только жизнеспособность клеток после хранения, но и их восстановление после рекультивирования.

Список используемой литературы

1. Егорова В.А. и др. Характеристика фенотипа мезенхимальных стволовых клеток из жировой ткани человека методом проточной цитометрии // Технологии живых систем, 2009, № 5. С. 40-46.
2. Севастьянов В.И. и др. Перфузионный биореактор для создания тканеинженерных конструкций // Медицинская техника, 2017, № 3. С. 9-11.

РАЗРАБОТКА ПРОТОКОЛА ДЕЦЕЛЛЮЛЯРИЗАЦИИ СЕЛЕЗЕНКИ КРЫСЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СКАФФОЛДА В ТКАНЕВОЙ ИНЖЕНЕРИИ

***Пуха Е.Ю.*[1,2], Пономарева А.С.[1], Баранова Н.В.[1], Кирсанова Л.А.[1], Григорьев А.М.[1], Басок Ю.Б.[1]**

[1] ФГБУ «НМИЦ ТИО им. ак. В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва, puha.elizaveta@yandex.ru

[2] ФГАОУ ВО «Первый МГМУ им. И.М. Сеченова» Минздрава России, Москва

Децеллюляризованная селезенка — перспективный источник скаффолдов, воспроизводящих свойства внеклеточного матрикса (ВКМ) для создания тканеинженерных конструкций (ТИК) [1].

Цель исследования – разработать эффективный протокол децеллюляризации фрагментов селезенки крысы при сохранении структурной организации и основных компонентов ВКМ.

Были апробированы 8 протоколов децеллюляризации [2, 3] фрагментов селезенки крысы (n=24), включавших циклы замораживание–оттаивание, обработку гипо- и гипертоническими растворами, 0,1% додецилсульфатом натрия, Triton X-100 и лизирующим раствором. Эффективность децеллюляризации оценивали гистологически. Исследовали цитотоксичность скаффолдов и способность поддерживать адгезию и пролиферацию мезенхимальных стромальных клеток жировой ткани (МСК ЖТ) на 1-е и 7-е сутки.

Наиболее эффективную децеллюляризацию при сохранении пористой волокнистой структуры обеспечили протоколы с осмотическим шоком и 0,1% додецилсульфатом натрия в сочетании с циклами замораживание-оттаивание или лизирующим раствором. Полученные скаффолды не оказывали цитотоксического действия и поддерживали адгезию и пролиферацию МСК ЖТ.

Разработанные протоколы позволяют получать скаффолд из децеллюляризованной селезенки крысы, перспективный для создания ТИК.

Список использованной литературы

1. Zanardo T.É.C. et al. Decellularized Splenic Matrix as a Scaffold for Spleen Bioengineering // Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2020, Vol. 8. P. 573461.
2. Sevastianov V.I. et al. A Tissue-Engineered Construct Based on a Decellularized Scaffold and the Islets of Langerhans: A Streptozotocin-Induced Diabetic Model // Life, 2024, Vol. 14, No. 11. P. 1505.
3. Пономарева А.С. и др. Биомиметики внеклеточного матрикса для тканевой инженерии поджелудочной железы // Вестник трансплантологии и искусственных органов, 2025, Т. 27, № 3. С. 146–159.

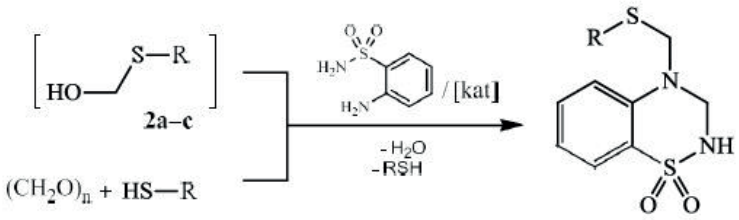
КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРО-2Н-БЕНЗО[Е][1,2,4]ТИАДИАЗИН-1,1-ДИОКСИДА

Ремезова Г.В., Хайруллина Р.Р.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа

3,4-Дигидро-2Н-бензо[e][1,2,4]тиадиазин-1,1-диоксид является строительным блоком ряда фармакологически активных соединений, обладающих широким спектром активности. В частности, диуретической (тиазидные диуретики — гидрохлоротиазид, хлортиазид, гидрофлуметиазид, метиклотиазид и политиазид) и в качестве аллостерических модуляторов AMPA-рецепторов (лечение расстройства внимания у детей, старческой деменции, ранней стадии болезни Альцгеймера).

+Учитывая вышеизложенное, а также с целью построении новых производных 3,4-дигидро-2Н-бензо[e][1,2,4]тиадиазин-1,1-диоксида с 1,3-аминосульфидным фрагментом, в данной работе исследована one-pot реакция 2-аминобензолсульфамида с алифатическими или ароматическими тиолами и параформальдегидом в присутствии солей редкоземельных элементов.



R = Bu^n; Hex^n; Oc^n; Hex^{cyclo}; Pr^i; Bu^t; Bn; Ph

i: **1a**; **2a-c**:[кат] = 1:2:0.1, 8h, 80°C, EtOH–$CHCl_3$ (1:2)

ii: **1a**: R-SH: $(CH_2O)_n$:[кат] = 1:1:2:0.1, 8h, 80°C, EtOH–$CHCl_3$ (1:2)

Нами показаны эффективные подходы к синтезу 4-[(алкил(арил)тио)метил]-3,4-дигидро-2Н-бензо[e][1,2,4]тиадиазин-1,1-диоксидов с выходами 45-80 % двумя путями: —one pot конденсацией 2-аминобензолсульфамида с тиолами и формальдегидом, либо реакцией 2-аминобензолсульфамида с алкил(арил)тиометанолами, полученными in situ в присутствии солей редкоземельных элементов в количестве 10−30 мол%. В отсутствии катализатора целевые соединения не образуются.

Работа выполнена в соответствии с планами научно-исследовательских работ ИНК УФИЦ РАН [FMRS-2025-0041 (2025 — 2027)].

РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ПАРЕНТЕРАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ПЕПТИДНЫХ АНТИБИОТИКОВ — ПОЛИМИКСИНОВ

Соломаха О.А.[1], Степанова М.А.[1], Никифоров А.А.[1], Нащекина Ю.А.[2], Егорова Т.С.[3], Демьянова Е.[3], Коржикова-Влах Е.Г.[1]

[1] Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт высокомолекулярных соединений, г. Санкт-Петербург, solomanya@bk.ru

[2] Институт цитологии Российской академии наук, г. Санкт-Петербург

[3] Государственный научно-исследовательский институт особо чистых биопрепаратов ФМБА России, г. Санкт-Петербург

Широкое и бесконтрольное использование антибактериальных препаратов способствует стремительному росту устойчивости микроорганизмов к традиционно применяемым антибиотикам, что на сегодняшний день является глобальной проблемой для общественного здравоохранения и требует незамедлительного решения. Большой интерес в этом ключе представляет применение пептидных антибиотиков — полимиксинов, проявляющих антибактериальную активность в отношении грамотрицательных штаммов и крайне редкое возникновение к ним резистентности. Однако, системное применение полимиксинов ограничено их природой (низкая устойчивость в кровотоке и ферментативная деградация), что требует использования высоких доз препарата. Это в свою очередь приводит к серьезным побочным эффектам. Таким образом, разработка систем направленной доставки полимиксинов является перспективным вариантом снижения нецелевой токсичности и обеспечения адресной доставки антибиотика в зону бактериального воспаления.

В ходе данной работы был получен ряд содержащих инкапсулированный полимиксин Е наночастиц (НЧ) для парентерального введения на основе модифицированного дефероксамином амфифильного статистического сополимера *L*-лейцина и *L*-глутаминовой кислоты, сшитого pH-чувствительным линкером. Роль дефероксамина заключается в обеспечении улучшения захвата НЧ бактериями, а сшивание линкером, чувствительным к кислой среде, обеспечит целенаправленное высвобождение антибиотика в зоне воспаления, характеризующемся значениями pH ~ 5. Для полученных НЧ были определены их гидродинамический диаметр, ζ-потенциал, содержание и скорость высвобождения инкапсулированного антибиотика в условиях, моделирующих зону воспаления и плазму крови, исследована их стабильность при хранении, а также показано, что полученные НЧ обладают меньшей цитотоксичностью в сравнении со свободным антибиотиком для эмбриональных клеток почек человека (HEK 293) и проявляют антибактериальную активность в отношении *Pseudomonas aeruginosa* вплоть до концентрации НЧ 8 мкг/мл.

ОПТИМИЗАЦИЯ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА HEM1/ГЕМИН

***Швецов В.А.*[1] , *Филатов П.В.*[2], *Попышева Т.М.*[1] , *Бобков Г.А.*[1] , *Чернышова К.Д.*[1], *Зюзин М.В.*[2]**

[1] Факультет Биотехнологий, Университет ИТМО 19002, Санкт-Петербург, E-mail: shvetsov.vitalii.615@yandex.ru

[2] Физико-технический мегафакультет, Университет ИТМО 19002, Санкт-Петербург

Гемин-связывающие ДНКзимы с пероксидазоподобной активностью долгое время были представлены преимущественно G-квадруплексами (G4). Методом SELEX (Systematic Evolution of Ligands by Exponential enrichment) был получен не-G4-аптамер Hem1 с высокой аффинностью к гемину (Kd = 43 нМ) и пероксидазоподобной активностью, которая была изучена только с колориметрическими субстратами, а способность катализировать хемилюминесцентные реакции не исследовалась [1]. Хемилюминесцентная детекция перспективна для биосенсинга: для G4/гемин-содержащей ДНК-наномашины предел обнаружения был в 19,6 раза ниже, чем при колориметрии [2].

Целью работы являлась оценка возможности использования Hem1/гемин для хемилюминесцентного окисления люминола и оптимизация ионного состава буфера и концентрации гемина. Эффективность реакции оценивали по отношению сигнал/фон (S/B).

Хемилюминесцентный отклик системы проявлял выраженную зависимость от концентраций Mg^{2+} и Na^{+}. В отсутствие Mg^{2+} значение S/B оставалось близким к 1, тогда как при концентрации 20 мМ оно возрастало до 39,1 ± 2,0. Для Na^{+} была характерна концентрационно-зависимая динамика: при 50 мМ отношение S/B достигало максимума в 46,8 ± 2,5, а при повышении концентрации до 200 мМ снижалось до 36,6 ± 2,9, сопровождаясь замедлением развития сигнала. Оптимизация концентрации гемина показала, что наилучшее значение S/B (54,6 ± 4,7) достигается при 1 мкМ.

Таким образом, продемонстрирована возможность использования Hem1/гемин для хемилюминесцентного окисления люминола и определены ключевые параметры системы. Полученные условия создают основу для дальнейшей интеграции комплекса в биосенсоры.

Список используемой литературы

1. Gu L. et al. Selective Hemin Binding by a Non-G-quadruplex Aptamer with Higher Affinity and Better Peroxidase-like Activity // Angewandte Chemie International Edition, 2024, 63 (6), e202314450.
2. Filatov P. et al. Selective detection of Staphylococcus aureus in food matrices using a chemiluminescent peroxidase-like DNA nanomachine // Biosensors and Bioelectronics, 2026, 118408.

ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ НИТРОПРУССИДА ПРИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ЗНАЧЕНИЯХ pH ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ НЕ АНИОНАМИ ЦИАНИДА, А КАТИОНОМ НИТРОЗОНИЯ (NO^+)

Трифонова Н.Е.[1,2], Ванин А.Ф.[2], Тронов В.А.[2], Шумаев К.Б.[2], Ткачев Н.А.[2], Микоян В.Д.[2]

[1]Россия, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва. E-mail: trifonova.n1991@gmail.com

[2]Россия, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва

С помощью МТТ-теста на 24 и 48 ч инкубации клеток MCF-7 с нитропруссидом натрия (SNP) (0–500 мкМ) показано, что главным цитотоксическим агентом SNP является воздействие катиона нитрозония (NO^+), а не анионов цианида (CN^-). Для дифференциации вклада CN^- и NO^+ совместно инкубировали SNP с SDT (1:2). При 100 мкМ SNP выживаемость 85%, т.е. свободный CN^- ≤10 мкМ — ниже порога токсичности (10 мкМ) [2]. При 400 мкМ SNP выживаемость 45%. С SDT выживаемость растет, но при 0,5 мМ SNP гибнет ~30% клеток (см рисунок 1). SDT обеспечивает избыток тиосульфата, связывающего CN^-, гибель клеток не может быть вызвана цианидом. ЭПР-спектроскопия позволила идентифицировать природу остаточной токсичности в присутствии дитионита натрия (SDT), который восстанавливал NO^+ в нейтральные молекулы оксида азота (NO), а в растворе при pH 6,5 вторично образовывался динитрозильный комплекс железа (ДНКЖ) с тиосульфатом, в которых одна молекула NO из трех снова приобретала форму NO^+ [1], которые и послужили причиной токсичности.

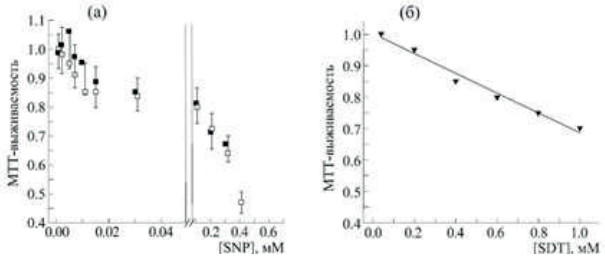


Рисунок 1. Выживаемость клеток MCF-7: (А) — от концентрации SNP через 1 сут (▪) и 2 сут (□); (Б) — через 1 сут после SNP+SDT (1:2). При 0,5 мМ SNP с SDT гибнет ~30% клеток из-за М-ДНКЖ — доноров NO^+. Данные из [1].

Список использованной литературы

1. Ванин А.Ф., Тронов В.А., Трифонова Н.Е. и др. Катион нитрозония как компонент нитропруссида, определяющий его цитотоксичность // Биофизика. 2025. Т. 70, № 1. С. 122–128.
2. Zuhra K., Szabo C. The two faces of cyanide: an environmental toxin and a potential novel mammalian gasotransmitter // FEBS J. 2021. Vol. 289, No. 9. P. 2481–2515.

ПРИМЕНЕНИЕ ТРАНСКРАИАЛЬНОЙ МИКРОПОЛЯРИЗАЦИИ В ДЕТСКОЙ НЕВРОЛОГИИ

Куулар Мангалтепе А.Р.

Российский Биотехнологический Университет (Пущинский филиал)

Транскраниальная микрополяризация-это воздействие слабого электрического тока (до 1 мА) на нейроны, обладающее нейромодулирующим, противовоспалительным (купирует нейровоспаление) противосудорожным, нейрорегенеративным эффектами.

Механизм транскраниальной микрополяризации заключается в том, что за счет использования электродов небольшой площади, локализуемых на скальпе пациента,над соответствующими кортикальными проекциями,происходит избирательное воздействие электрического тока на кору головного мозга.

Показания к проведению транскраниальной микрополяризации:

- Задержки психоречевого развития.
- Задержки речевого развития.
- Эписиндром.
- Расстройства аутистического спектра без судорожной активности.
- Умственная отсталость.
- Тяжелая степень дисграфий,акалькулий.
- Церебральная кома.
- Посттравматические поражения центральной нервной системы.

Противопоказания к проведению транскраниальной микрополяризации:

- Онкологические патологии в активной фазе.
- Острые инфекции центральной нервной и дыхательной систем.
- Гипертермический синдром.
- Непереносимость электрического тока.

Транскраниальная микрополяризация является высокоэффективным и перспективным методом лечения многих патологий центральной и периферической нервной системы в комплексной терапии детских неврологических заболеваний.

Список используемой литературы

1. «Микрополяризация мозга. Вчера. Сегодня. Завтра» А.М. Шелякин, И.Г. Преображенская.

ПРИМЕНЕНИЕ ТРАНСВЕРТЕБРАЛЬНОЙ МИКРОПОЛЯРИЗАЦИИ В КОМПЛЕКСНОЙ ТЕРАПИИ ПАТОЛОГИЙ СПИННОГО МОЗГА

Куулар Мангалтепе А.Р.

Российский Биотехнологический Университет (Пущинский филиал)

Трансвертебральной микрополяризация — это метод воздействия сверх малого постоянного электрического тока через паравертебральное наложение электродов на кожные проекции спинномозговых нервов.

Механизм трансвертебральной микрополяризации заключается в том, что электрический ток, подаваемый паравертебрально в нейроны спинного мозга, генерирует потенциалы действия в нервных клетках, способствуя нейрогенерации, нейромодуляции, угнетению воспалительных реакций нервной ткани.

Показания к проведению трансвертебральной микрополяризации:

- Детский церебральный паралич.
- Сосудистые патологии спинного мозга.
- Травматические поражения спинного мозга и ствола головного мозга.
- Болезнь Паркинсона, резистентная к фармакотерапии.

Противопоказания к проведению трансвертебральной микрополяризации:

- Онкологическая патология в манифестирующей стадии.
- Гипертермический синдром.
- Инфекции дыхательной, центральной и периферической нервной систем в острой фазе.

Перед проведением курса трансвертебральной микрополяризации необходимо собрать анамнез пациента, изучить данные МРТ головного и спинного мозга, исследовать биоэлектрическая активность головного мозга на электроэнцефалограмме.

Трансвертебральная микрополяризация является перспективным и высокотехнологичным методом терапии патологий центральной и периферической нервной системы.

Список используемой литературы

1. «Микрополяризация мозга. Вчера. Сегодня. Завтра» А.М. Шелякин, И.Г.Преображенская.

СЕКЦИЯ
«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»

ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЗМОВ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА ОТ КОНФОРМАЦИИ В СПИРАЛЕОБРАЗНЫХ ОЛИГОМЕРАХ

***Сторожева К.Д.*[1,2], Маркина А.А.[2]**

[1] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, kseniya.storozheva@bisomlab.com*

[2] *ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва*

Молекулярная электроника рассматривает отдельные молекулы как функциональные элементы для миниатюризации электронных устройств [1]. Особый интерес представляют молекулярные структуры, изменяющие свои свойства под внешним воздействием [2], в частности спиралеобразные ароматические олигомеры [3, 4]. Согласно расчетам, такие структуры обладают несколькими устойчивыми конформациями, что является перспективной основой для молекулярных переключателей, сенсоров и элементов памяти [2, 5]. В работе исследуется электронный транспорт через контакт «электрод–молекула–электрод» со спиралеобразным олигомером на основе пиридиновых и пиррольных фрагментов. Цель — установить зависимость транспортных характеристик и механизма переноса заряда от конформации молекулы. Транспорт описан методами разного уровня приближения: теорией функционала плотности и полуэмпирическим методом xTB в сочетании с формализмом неравновесных функций Грина, а также приближенной моделью электронного транспорта.

Рассчитаны транспортные характеристики олигомера для разных конформаций. Сопоставление подходов позволяет выявить влияние конформации и электронной структуры на механизм переноса заряда. Результаты уточняют связь между структурой молекулярной системы и ее транспортными свойствами и полезны для разработки систем с управляемыми электронными характеристиками.

Список используемой литературы

1. Evers F. et al. Advances and challenges in single-molecule electron transport // *Reviews of Modern Physics*. 2020. Vol. 92. 035001.
2. Zou Q. et al. Modulating single-molecule charge transport through external stimulus // *eScience*. 2023. Vol. 3. 100115.
3. Astakhov A. M. et al. Spontaneous Vibrations and Stochastic Resonance of Short Oligomeric Springs // *Nanomaterials*. 2024. Vol. 14. 41
4. Frolkina M. A. et al. Collective Bistability of Pyridine-Furan Nanosprings Coupled by a Graphene Plate // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2025. Vol. 129, No. 18. P. 4491-4500.
5. Aprahamian I. The Future of Molecular Machines // *ACS Central Science*. 2020. Vol. 6, No. 3. P. 347-358.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ МЕЗО-CF_3-BODIPY

***Галикберова М.Р.*[1], *Боченкова А.В.*[1], *Клещина Н.Н.*[1]**

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, milana.galikberova@gmail.com*

Органические флуорофоры на основе борон-дипиррометена (BODIPY) находят широкое применение в биовизуализации и фотонике благодаря высоким коэффициентам экстинкции и узким полосам поглощения. Однако введение электроноакцепторной группы CF3 в мезо-положение часто сопровождается резким падением квантового выхода флуоресценции (Φfl), микроскопический механизм которого оставался дискуссионным. В данной работе методами квантово-химического моделирования исследованы поверхности потенциальной энергии основного (S0) и первого возбужденного (S1) синглетных состояний серии производных мезо-CF3-BODIPY с целью выявления механизма безызлучательного тушения и влияния периферийного замещения.

Оптимизацию геометрии минимумов S1 и точек минимальной энергии конического пересечения (MECI) S1/S0 проводили методом SA(2)-CASSCF(12,11)/cc-pVDZ с учетом динамической электронной корреляции квазивырожденной теорией возмущений XMCQDPT2 в пакете Firefly. Установлено, что введение метильных групп в положения 1 и 7 порождает сильное стерическое отталкивание с мезо-CF3-группой. Это вызывает структурное «предыскажение» остова уже в минимуме S1 (выход мезо-углерода из плоскости N–B–N достигает 0.95–1.36 Å) и снижает барьер Emin–CI до 0.24–0.30 эВ, приводя к быстрому безызлучательному тушению. Напротив, в 3,5-диметил- и 3,5-дихлорпроизводных остов в минимуме S1 сохраняет квазиплоскую конформацию (выход мезо-C 0.06–0.21 Å), а барьер к MECI остается высоким (0.53 эВ), что блокирует внутреннюю конверсию и обеспечивает флуоресценцию.

В точке MECI центральное кольцо принимает конформацию «лодки», сопровождаясь скручиванием остова (20–24°) и пирамидализацией атома азота со сменой гибридизации с sp2 на sp3. Анализ волновой функции показал переход ВЗМО→НСМО с переносом заряда и открыто-оболочечный бирадикальный характер состояния вблизи пересечения. Таким образом, показано, что периферийные заместители регулируют флуоресценцию через комбинацию двух факторов: стерическое предыскажение возбужденного остова и электронную стабилизацию бирадикального состояния в коническом пересечении.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КМ/ММ НЕФЛУОРЕСЦИРУЮЩЕГО БЕЛКА SHADOWR

Мезенцев-Черкес И.В.[1]

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, город Москва,*
mezentsev-cherkesiv@my.msu.ru

Флуоресцентные и нефлуоресцирующие цветные белки семейства GFP — востребованные инструменты биовизуализации, биосенсорики и фототерапии живых систем. При консервативности структуры хромофора они демонстрируют широкое разнообразие фотофизических откликов. ShadowR — нефлуоресцирующий хромопротеин семейства Rtms5 с хромофором DsRed-подобного типа (Gln-Tyr-Gly), полученный на основе белка Ultramarine. Целью работы является квантово-химическое исследование методами КМ/ММ ShadowR.

Полноатомная модель ShadowR построена гомологичным моделированием в SWISS-MODEL [1]. Молекулярная динамика (CHARMM, NAMD3) с охлаждением от 300 до 20 К в водном боксе дала равновесную геометрию хромофора на поверхности S0. КМ/ММ оптимизация и расчет энергии перехода выполнялись в пакетах Tinker и Firefly: выбрано активное пространство (16,15), методом XMCQDPT2 рассчитана энергия перехода S0→S1.

Рассчитанная энергия перехода S0→S1 соответствует длине волны поглощения λ = 556 нм (2.23 эВ) (табл. 1) при экспериментальном значении 585 нм (2.12 эВ).

Таблица 1. Энергия перехода S0→S1 хромофора ShadowR: расчет и эксперимент

	λ, нм (E, эВ)
Расчет	556 (2.23)
Эксперимент [2]	585 (2.12)

Результаты закладывают основу для поиска минимума S1 и конического пересечения S1/S0, определяющих подавление флуоресценции ShadowR.

Список используемой литературы

1. Waterhouse A. et al. SWISS-MODEL: homology modelling of protein structures // *Nucl. Acids Res.* 2018. V. 46. P. W296–W303.
2. Murakoshi H. et al. ShadowR: a novel chromoprotein with reduced non-specific binding // *Sci. Rep.* 2019. V. 9. P. 12072.

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГИДРОКСОСУЛЬФАТА ЦИНКА

Гвоздикова Е.В.

Кемеровский государственный университет, Кемерово, gvozdikova03@mail.ru

Исследования нелинейно-оптических материалов (*nonlinear optical — NLO*) является перспективными, поскольку они служат основой твердотельных лазеров, оптоэлектроники и фотонных технологий. NLO кристаллы широко применяются в фотолитографии сверхвысокого разрешения до фотохимического синтеза и высокоточной микрообработки. В работе впервые методами теории функционала плотности в сочетании с теорией Хартри-Фока в прикладном пакете CRYSTAL[1] исследована структура и химическая связь кристалла $ZnSO_4Zn(OH)_2$. Методами теории возмущений определены двулучепреломление и коэффициенты генерации второй гармоники. Точность самосогласования расчета составила 10^{-9} a.u. (1 a.u.= 27.21 eV).

Кристаллическая структура $ZnSO_4Zn(OH)_2$ имеет нецентросимметричную орторомбическую пространственную группу $P2_12_12_1$ и сложное строение, где одиин атом цинка Zn2 окружен тремя атомами кислорода, тогда как атом Zn1 — пятью атомами, в координации с группой SO_4. Результаты оптимизации параметров решетки и межатомны расстояния приведены в таблице 1 (см. таблицу 1). Показатель двулучепреломление $d_n = 0.0218$ и коэффициенты $d_{ij} = 0.06038$ pm/V.

Таблица 1. Постоянные решетки a, b, c (Å), объем ячейки V (Å³), расстояния между атомами (все в Å), рассчитанные с функционалами PBE, PBE0, B3LYP и измеренные экспериментально в [2] (Exp) для $ZnSO_4Zn(OH)_2$

Method	*a*, Å	*b*, Å	*c*, Å	*V*, Å³	<Zn1-O5>, Å	<Zn2-O2>, Å	<S-O4>, Å	<H-O2>, Å	<H2-O6>, Å
Exp [3]	4.9315	6.2285	14.3425	440.54	1.9183	2.0032	1.4703	–	–
PBE	5.0490	6.2825	14.3883	456.40	1.9443	2.0261	1.5861	1.0180	0.9882
PBE0	4.9890	6.2104	14.3172	443.60	1.9298	2.0078	1.5525	1.0002	0.9757
B3LYP	5.0441	6.3202	14.4798	461.61	1.9377	2.0348	1.5666	0.9978	0.9769

Все методы дают близкие значения для межатомных расстояний (Zn–O, S–O), но PBE0 точнее воспроизводит параметры решетки. Эти результаты позволяют сделать дальнейшие исследование оптических и механических ствойств кристлла.

Список используемой литературы

1. Dovesi R, Erba A, Orlando R, et al. Quantum-mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL //*WIREs Comput Mol Sci*. 2018.
2. Sangita Das, Sk Imran Ali, Non-centrosymmetric $ZnSO_4{\cdot}Zn(OH)_2$: synthesis, crystal structure, and its applications towards photocatalytic methylene blue degradation and solvent-free Knoevenagel condensation reaction //*Inorganic Chemistry Communications*, 2025, 181, 2, 115263.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРУЮЩЕГО КОМПОНЕНТА НА ОСНОВЕ ТРИАЗИНОВОГО КАРКАСА

***Коровина А.В.*[1], Квашнин Д.Г.[1]**

[1] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, korovinanastya99@gmail.com*

В последние десятилетия активно развивается область нанопористых материалов, служащих для разделения и хранения газов, гетерогенного катализа и др. Такое развитие спровоцировало появление и активное изучение новых классов материалов, таких как металлоорганические каркасы, полимерные сетки, каркасы на основе триазина [1].

Поскольку триазиновые каркасы имеют развитую площадь поверхности и пористость, которую можно регулировать при помощи мономеров, взятых за основу полимера, они могут быть эффективными в хранении и разделении газов [2]. Многие из изветсных каркасов нашли применение в разделении нефтехимических газов, таких как ацителен, этилен, метан [3].

На основании этих свойств возможно предположить, что существует комбинация тризиновых каркасов, которая может разделить нефтегазовую смесь полностью.

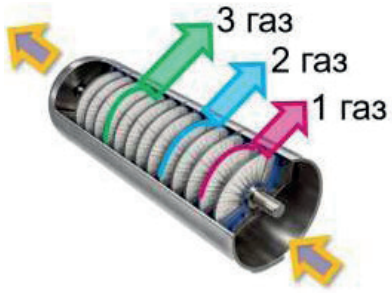


Рисунок 1. Схема фильтрующего компонента на основе триазиновых каркасов

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (25-73-10250).

Список используемой литературы

1. Krishnaraj C. et al. Covalent triazine frameworks–a sustainable perspective //Green Chemistry. — 2020. — Т. 22. — №. 4. — С. 1038-1071
2. Furukawa H., Yaghi O.M. Storage of Hydrogen, Methane, and Carbon Dioxide in Highly Porous Covalent Organic Frameworks for Clean Energy Applications//Journal of the American Chemical Society, 2009, Т. 131, N 25, С. 8875-8883

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НЕИННОЦЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ С ПЕРОКСИД-ПРОИЗВОДНЫМИ ЛИГАНДАМИ

***Проломов И.В.*[1,2], Малашкеевич К.М.[1,2], Алабугин И.В.[3], Медведев М.Г.[1]**

[1] *Институт органической химии и м. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, ilyavpro@gmail.com*

[2] *РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва*

[3] *Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University, Tallahassee*

Неинноцентные лиганды перераспределяют окислительно-восстановительную свойства между металлом и лигандом, придавая комплексам неблагородных металлов реакционную способность, характерную для благородных металлов [1]. Ранее мы показали, что $FeCl_2$ инициирует перегруппировку би- и трициклических аминопероксидов через радикальные интермедиаты неинноцентных комплексов O-лигандов [2]. В настоящей работе мы исследовали комплексы формального внедрения $FeCl_2$ по связи O–O каркасных (амино)пероксидов и установили роль мостикового атома азота в их электронном строении.

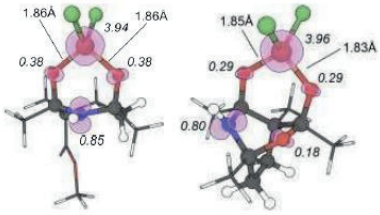


Рисунок 1. Спиновая плотность в би- и трициклическом комплексах железа, ωB97X-D4

Расчеты ωB97X-D4, DLPNO-CCSD(T) и CASSCF(6,6)/NEVPT2 показывают: внутримолекулярный SET N→O в аза-производных переносит радикальный центр с атома кислорода на азот (рисунок 1). N-центрированный квинтет представляет антиферромагнитно связанную пару высокоспинового Fe(III) (S_{Fe} = 5/2) и N-радикала (S_N = 1/2); активное пространство включает пять Fe(3d)-орбиталей и N(p)-орбиталь. В аналогах без мостикового азота неспаренный электрон остается на координированном кислороде, что повышает их окислительную способность. Мостиковый азот служит внутримолекулярным редокс-буфером: стабилизация радикала снижает окислительную способность комплекса.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 22-73-10124-П.

Список используемой литературы

1. Chirik P.J., Wieghardt K. *Science*. 2010. Vol. 327. P. 794–795.
2. Belyakova Y.Yu. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2025. Vol. 147. P. 965–977.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМАРНОЙ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА И КИСЛОРОДА НА НАНОЧАСТИЦАХ D^9- И D^{10}-МЕТАЛЛОВ

Руденко Е.И.[1]

[1] *Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской Академии Наук, Москва, ekaterina.rudenko@chph.ras.ru*

В данной работе было проведено DFT-моделирование адсорбции водорода и кислорода на золотых, медных, никелевых, платиновых и палладиевых наночастицах, нанесенных на графит. Для этого были исследованы поверхности и 13-атомные кластеры этих металлов на подложке графита и без нее для определения ее влияния на адсорбционные свойства металлических наноструктур. У кластеров, нанесенных на графит с различными дефектами, исследовались 2 центра адсорбции: вершина кластера и интерфейс металл-графит, т.е. граница раздела с подложкой.

Для адсорбционных комплексов Au_{13}-графит наблюдалось большее снижение плотности состояний атомов Au при адсорбции H вблизи интерфейса и O вблизи вершины, что коррелирует с результатами эксперимента [1, 2]. В наносистемах Cu_{13}-графит большее снижение плотности состояний при адсорбции вблизи интерфейса заметно только для взаимодействия с кислородом [3]. Для всех трех наносистем Ni_{13}-, Pt_{13}-, Pd_{13}-графит характерно незначительное снижение плотности состояний при адсорбции H и более заметное при адсорбции O [4, 5]. Отличия заключаются в величинах энергий связей с адсорбатами. Так энергия связи Ni_{13}-графит с O много больше, чем с H [4]. Для Pt_{13}-графит характерна большая энергии связи с адатомами на вершине кластеров [4]. Энергии связи Pd_{13}-графит с H и O практически не отличаются по величинам и положениям на всей поверхности наносистемы [5]. Для всех систем характерны большие энергии связей H и O с кластерами на подложке по сравнению со свободными кластерами.

Список используемой литературы

1. Дохликова Н.В., Колченко Н.Н. и др. Влияние подложки на адсорбцию водорода на золотом кластере // *Российские нанотехнологии*, 2016, № 11-12. С. 54-59.
2. Gatin A.K., Grishin M.V. et al Hydrogenation of hopg-supported gold nanoparticles: features of initial stages // *Crystals*, 2019, № 7. P. 350
3. Гатин А.К., Гришин М.В. и др. Адсорбционные свойства пленки, образованной золотыми и медными наночастицами на графите // *Российские нанотехнологии*, 2018, № 9-10. С. 3-13.
4. Дохликова Н.В., Озерин С.А. и др. Моделирование адсорбции водорода и кислорода на наночастицах никеля и платины, расположенных на графитовой подложке с различными дефектами // *Химическая физика*, 2022, № 6. С. 72-79.
5. Руденко Е.И., Дохликова Н.В. и др. Моделирование адсорбции водорода и кислорода на наночастицах палладия, расположенных на графитовой подложке с различными дефектами // *Химическая физика*, 2023, № 7. С. 70-77.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИИ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ НА КОМПОЗИТНЫХ НАНОВОЛОКНАХ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА

***Иванькова Ю.И.*[1], Сорокина Л.Ю.[1]**

[1] Лаборатория цифрового материаловедения, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, i@ivajull.ru

Использование классических шовных материалов в процессе заживления ран сопряжено рисками развития бактерий и образования биопленок. Внедрение антибактериальных компонентов в шовные материалы способствует локальному подавлению росту бактерий, пролонгированному действию препаратов и увеличению скорости регенерации тканей.

Шовные материалы на основе гидрофобного поликапролактона являются биополимерными и биорезорбируемыми пористыми материалами с достаточной механической прочностью для формирования прочного рубца. Модификация поверхности различными функциональными группами способствует повышению гидрофильности и сорбционных свойств полимера.

Методом DFTB теоретически изучена сорбция бацитрацина, куркумина и хлоргексидина на поверхности поликапролактона. В качестве модифицированных поверхностей выбраны PCL после плазменной обработки (PCL-COOH) и PCL-COOH активированный водорастворимым карбодимидом EDC (PCL-COOHEDC). Дополнительно построены модели коаксиального волокна PCL-коллаген и модели с внедренными наночастицами ZnO.

Квантово-химический анализ показал, что модификация поверхности PCL усиливает сорбцию всех препаратов через сеть водородных связей, а активация EDC ведет к химическому связыванию с подложкой.

Наиболее благоприятное взаимодействие между полимером и коллагеном реализуется в линейной модели. Энергия адсорбции хлоргексидина на поверхность чистого коллагена выше, чем на интерфейс PCL@col и сравнима с энергией взаимодействия в системе PCL-COOH.

Взаимодействие поликапролактона с карбоксильными группами с поверхностями (002), (100), (101) наночастицы ZnO демонстрируют четкую зависимость энергии связывания от наличия функциональных групп в структуре полимера. Наиболее активной поверхностью выступает (002) за счет реконструкции поверхности наночастицы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (№ 24-79-10121).

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ГЕНЕРАЦИИ РАЗНОСТНЫХ ЧАСТОТ ТИТАН-САПФИРОВОГО ЛАЗЕРА В КРИСТАЛЛЕ $BAGA_2GES_6$

Федорова Е.П., Ионин М.В., Киняевский И.О., Климачев Ю.М.

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва,
e.fedorova@lebedev.ru

Теоретически промоделированы спектры генерации разностных частот (ГРЧ) фемтосекундного титан-сапфирового лазера в нелинейном кристалле $BaGa_2GeS_6$ (толщина 0.7 мм) для сопоставления с экспериментальными результатами (Рисунок 1), полученными ранее [1]. Расчет был проведен для трех значений углов синхронизма θ = 34.7°, 36°, 37.3°.

Предложенная модель удовлетворительно описывает экспериментальные результаты: наилучшее согласие между расчетными и экспериментальными данными достигается при использовании в расчетах значений угла θ на 1-2° больше, чем в экспериментах, и при несколько меньших значениях эффективной толщины кристалла L по сравнению с геометрической. Рассмотрены причины этого расхождения.

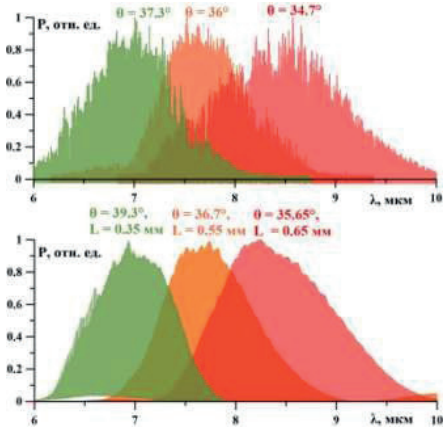


Рисунок 1. Экспериментальные, взятые из работы [1] (сверху), и расчетные (снизу) спектры ГРЧ титан-сапфирового лазера в кристалле BGGS.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-79-10068-П.

Список используемой литературы

1. Киняевский И.О., Ионин М.В. и др. Генерация широкополосных фемтосекундных импульсов среднего ИК диапазона путем генерации разностной частоты импульсов титан-сапфирового лазера в кристалле $BaGa_2GeS_6$ // *Письма в ЖЭТФ*, 2025, Т. 122, №. 10, С. 644-649.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛ ИНДОМЕТАЦИНА В РАСТВОРИТЕЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПОЛЯРНОСТИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЯМР

***Ковалев А.Е.*[1], *Белов К.В.*[1], *Ходов И.А.*[1,2]**

[1] *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, г. Иваново, aek@isc-ras.ru*

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

Индометацин (ИНД) — нестероидный противовоспалительный препарат, эффективно действующий против ревматических заболеваний и обладающий рядом побочных эффектов, связанных с особенностями механизмов ингибирования циклооксигеназы (ЦОГ-1 и ЦОГ-2). Кроме того, син- и анти-конформации объекта исследования проявляют селективное действие по отношению к указанным ферментам. По биофармацевтической системе классификации ИНД относится ко II классу, т.е. характеризуется хорошей мембранной проницаемостью, но плохой растворимостью в воде. Известно, что ИНД способен существовать в девяти формах с конформационно-определяемым полиморфизмом, которые обладают разными показателями кинетики растворимости в водных средах, что определяет выраженность терапевтического действия.

Упомянутые особенности определяют актуальность исследования конформационной подвижности молекул ИНД в различных средах, что может стать ключом к пониманию путей и особенностей процессов нуклеации полиморфных форм. Перспективным методом для определения пространственной структуры и соотношения долей групп конформеров малых молекул в различных растворителях является спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), применяемая как в химии и физике, так и в биологии и медицине.

В ходе выполнения работы, был проведен анализ структуры молекул ИНД при помощи 1D (^{1}H и ^{13}C) и 2D (^{1}H–^{13}C HSQC, ^{1}H–^{13}C HMBC и ^{1}H–^{1}H NOESY) спектров ЯМР в среде DMSO-d_6 и $CDCl_3$. Представлены и проанализированы характеристики спектров ЯМР и сопоставлены с расчетными данными структур конформеров, полученных из квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT). Получена информация о характеристических межъядерных расстояниях, определяющих конформационные изменения ИНД в DMSO-d_6 и $CDCl_3$, а также установлено соотношение долей групп син-(72.2/45.4 %) и анти- (27.8/54.6 %) конформеров. Полученные результаты могут быть применены в подборе среды растворителя с целью получения твердых форм ИНД, селективно ингибирующего ЦОГ-2, что позволит повысить выраженность терапевтического действия.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕПЛОСТОЙКИХ ПОЛИЭФИРИМИДОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

***Макагонов И.А.*[1], *Чаплина Е.С.*[1]**

[1] *Национальный исследовательский университет «МГТУ им. Н.Э. Баумана», Москва, makagonov56789@gmail.com*

В последние годы методы компьютерного моделирования активно применяются при разработке высокотемпературных полимеров, позволяя сократить объем экспериментальных исследований и ускорить подбор материалов с заданными свойствами.

Целью работы являлась оценка применимости методов молекулярной динамики для расчета теплофизических и механических свойств полиэфиримидов, а также анализ влияния температуры и химического строения на точность моделирования.

Объектами исследования являлись полиэфиримиды «Ultem» и «Extem». Молекулярные модели создавались с использованием библиотеки RadonPy и силового поля GAFF2, расчеты выполнялись в пакете LAMMPS.

Температуру стеклования и коэффициент линейного термического расширения определяли по зависимости удельного объема от температуры с применением алгоритма поиска оптимального линейного участка, реализованного на Python [1]. Механические свойства рассчитывали методом одноосного деформирования при 300 K [2]. Дополнительно определялись модуль сдвига и коэффициент Пуассона. Коэффициент теплопроводности вычисляли методом Мюллера–Платэ путем формирования стационарного теплового потока.

Расчеты механических характеристик показали хорошее соответствие экспериментальным данным при комнатной температуре: погрешность определения модуля упругости составила не более 2%.

Полученные результаты подтверждают эффективность методов молекулярной динамики для прогнозирования свойств теплостойких полимеров и могут быть использованы при цифровом проектировании новых материалов.

Список используемой литературы

1. Белова О.Н. Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики // *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*, 2021, №4. С.14-21.
2. Fatriansyah, J. F. Prediction of Glass Transition Temperature of Polymers Using Simple Machine Learning. // *Polymers*, 2024, Vol. 16, No. 17, P. 2464.

ИССЛЕДОВАНИЕ БИМОДАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ ИНТЕРСТИЦИАЛЬНОГО ВОДОРОДА В АЛМАЗЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

***Зеленина А.И.*[1,2], Маслов П.А.[1], Кудряшов С.И.[2], Орехов Н.Д.[1]**

[1] *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, zelenina.ai@phystech.edu*

[2] *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

Наноструктурированный алмаз обладает разнообразными физическими свойствами, в том числе прикладными. Водород — второй по распространенности примесный атом в алмазе. Он играет ключевую роль в формировании и агрегации центров, пассивируя их, что влияет на оптические свойства, важные для квантовых технологий и сенсорики. Отслеживать динамику водорода в алмазе экспериментальными техниками достаточно затруднительно.

В настоящей работе исследуется диффузия нейтрального межузельного одиночного атома водорода в алмазе. Впервые проведено наносекундное моделирование методом молекулярной динамики с машинно-обучаемым потенциалом формата NEP (neuroevolution potential). Расчеты проведены в пакете LAMMPS в температурном диапазоне 1500-3000 K с точностью, характерной для расчетов методами ab initio. Для верификации результатов подготовлены две версии потенциала NEP, которые обучены на различных обменно-корреляционных функционалах (PBE и HSE06).

Анализ траекторий водорода показал бимодальный характер диффузии. Основной путь представляет собой последовательные перескоки между BC-положениями (в центре C-C связи) межузельного атома, барьер миграции составляет 2.2 эВ. Второй, быстрый канал, реализуется через цепочку метастабильных тетраэдрических конфигураций (T-узлов), имеет барьер 0.6 эВ. Вероятность релаксации атома водорода в BC-положение выше, чем в следующий T-узел, но быстрый канал, в котором диффузия атома водорода на несколько порядков выше, не блокируется полностью. Таким образом, бимодальный механизм диффузии объясняет расхождение до пяти порядков величины в экспериментальных данных, полученных с помощью глубинного профилирования и тушения флуоресценции.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект №25-73-20143).

Список используемой литературы

1. Goss J.P. et al. Theory of hydrogen in diamond // *Phys. Rev. B*, 2002, 65. 115207.
2. Ashfold M.N.R. et al. Nitrogen in diamond // *Chem. Rev.*, 2020, 120(12). 7545-5794.
3. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.*, 1995, 117(1). 1-19.
4. Fan Z. et al. Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport // *Phys. Rev. B*, 2021, 104(10). 104309.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ MN, FE, NB, MO В КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

***Исаев Я.И.*[1], Ковалев А.Е.[1], Макаров Д.М.[1], Ходов И.А.[1,2]**

[1]Институт химии растворов имени Г.А. Крестова РАН, Иваново, isaev.yaroslav.ivanovo@gmail.com

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

Одной из проблем современной физической химии является идентификация структуры комплексных соединений переходных металлов (Mn, Fe, Nb, Mo). Спектроскопия ЯМР — эффективный подход для решения этой задачи, так как химический сдвиг чувствителен к локальному окружению атомов. Однако применение ЯМР для ядер переходных металлов ограничено: сигналы ^{55}Mn становятся слишком широкими для крупных молекул, а ^{57}Fe обладает низкой чувствительностью. Машинное обучение предлагает решение, прогнозируя химические сдвиги на порядки быстрее расчетов методом теории функционала плотности при сопоставимой точности.

Цель данного исследования — разработка моделей для предсказания значений химического сдвига ^{55}Mn, ^{57}Fe, ^{93}Nb, ^{95}Mo в составе комплексных соединений с помощью методов МО на основе базы данных, содержащей информацию об эксперименте в жидкой фазе (1956 измерений для 1799 уникальных соединений).

Прогнозирование значений химического сдвига ЯМР проводилось с использованием CatBoost на дескрипторных признаках (RDKit, SOAP, геометрические характеристики), а также нейросетевых архитектур (Chemprop, Transformer-CNF, MolEncoder, TabPFN).Оценка качества моделей проводилась с использованием 5-кратной перекрестной проверки по метрике RMSE.

Наиболее точные результаты предсказания продемонстрировали модели, построенные с помощью метода TabPFN и пакета дескрипторов RDKit. RMSE для ^{55}Mn, ^{57}Fe, ^{93}Nb, ^{95}Mo составили 300, 650, 260, 330 м.д. соответственно. Для ^{93}Nb учет локального окружения через SOAP, геометрию и RDKit позволил снизить ошибку и добиться результатов, превосходящих по точности другие комбинации признаков. Показатель RMSE составил 250 м.д., для сравнения, модель только с RDKit показала ошибку в 280 м.д.

Разработанный подход предлагает инструмент для интерпретации экспериментальных спектров ЯМР комплексов, содержащих переходные металлов, что будет полезно при установлении и характеристике структуры различных комплексных соединений на основе изучаемых металлов.

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ XMCQDPT2-ТОЧНОСТИ ДЛЯ МАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФОТОДИССОЦИАЦИИ $CH_2NH_2^+$

***Дудаков И.В.*[1,2], *Королев В.В.*[1,2], *Боченкова А.В.*[1]**

[1]*МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, dudakoviv@my.msu.ru*

[2]*МГУ имени М.В. Ломоносова, Институт искусственного интеллекта, Москва*

Точное описание неадиабатических переходов через конические пересечения поверхностей потенциальной энергии является ключевой задачей фотохимии. Нейросетевые межатомные потенциалы (MLIP) способны существенно ускорить неадиабатическую молекулярную динамику возбужденных состояний, однако обучение таких моделей ограничено высокой вычислительной стоимостью многореференсных методов квантовой химии, необходимых для корректного описания конических пересечений. В настоящей работе предложена стратегия построения MLIP-потенциалов, достигающих точности XMCQDPT2/SA(3)-CASSCF(12,12) теории, обеспечивающих корректное описание топографии конических пересечений и всех каналов диссоциации, а также гладкие поверхности вблизи точек вырождения.

Ключевой элемент методологии — обучение с переносом: модель, предобученная на обширном наборе CASSCF-данных (~100 000 конфигураций), была затем дообучена на компактном наборе XMCQDPT2 из 1466 геометрий, сформированном с привлечением жадного алгоритма из траекторий динамики, и дополненном точками вблизи минимумов трех конических пересечений иона $CH_2NH_2^+$. Среди восьми исследованных стратегий — single-state (SS), multi-output (MO) и multi-state (MS) архитектур с различной инициализацией — обучение с переносом обеспечило наибольшее снижение ошибок: средняя абсолютная ошибка по энергиям (силам) уменьшилась на 21–29% (20–30%) относительно случайной инициализации.

Разработанные SS-TL-потенциалы с высокой точностью локализуют три ключевых конических пересечения иона метаниминия: геометрии воспроизводятся с RMSD < 0.1 Å, включая недавно обнаруженное сечение $\zeta\pi^*/S_0$, ответственное за прямое элиминирование H_2. Ускорение расчета траектории относительно прямых вычислений XMCQDPT2 составило ~8000 раз, что впервые позволило провести масштабное NAMD-моделирование $CH_2NH_2^+$ на уровне XMCQDPT2 с полным активным пространством (12e, 12o), одновременно описывающим все конкурирующие каналы фотодиссоциации этого катиона.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ УСКОРЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

***Куклин Ф.А.*[1], *Иванов В.С.*[2]**

[1] *НИЯУ МИФИ, Москва, iam@fkuklin.ru*
[2] *ФИЦ ХФ РАН, Москва*

Использование глобальных и детальных кинетических механизмов значительно увеличивает точность математического моделирования реагирующих течений, но требует больше вычислительных мощностей, а машинное время, затрачиваемое на кинетические вычисления, может превышать время решения уравнений газовой динамики. Для ускорения кинетических вычислений используются различные методы, например, MZM, DAC, TDAC и др. Большинство таких алгоритмов направлены на снижение количества кинетических вычислений или табулирование уже готового набора решений, при этом сохраняется общий подход к решению кинетических уравнений, основанный на решении системы ОДУ. Для конкретного химического процесса расчет кинетики сводится к интегрированию одних и тех же уравнений, с отличием только в начальных концентрациях и температуре. Развитие алгоритмов искусственного интеллекта позволяет использовать другой подход к решению кинетических уравнений с применением нейронных сетей и методов машинного обучения. Обучив модель регрессии на наборе данных можно получить решатель, который будет работать быстрее существующих численных методов и будет использовать меньше памяти, чем интерполирование по табличным данным.

В данной работе предложен подход к созданию алгоритма кинетических вычислений с использованием методов искусственного интеллекта, включающий метод формирования размеченной базы данных для обучения нейронных сетей, алгоритм обучения нейронных сетей с физическими ограничениями и жесткими требованиями сохранения количества вещества в системе и др. В результате разработана нейросетевая модель для кинетических вычислений процесса окисления водорода по глобальному механизму, содержащему 10 веществ и 29 реакций. Результаты тестов показали, что построенная нейронная модель обеспечивает интегрирование траектории со среднеквадратичной ошибкой 0,83% по концентрации компонент и 0,03% по температуре. Для конечной точки интегрирования ошибка составила 0,85% по концентрации и 0,04% по температуре. Ускорение кинетических вычислений составило 14,1 раз при работе на CPU и 270,1 раз при работе на GPU по сравнению с решением ОДУ на CPU.

Список используемой литературы

1. Schwer, D. A., P. Lu, and W. H. Green. 2003. An adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows. Combust. Flame 133:451-65.

ОЦЕНКА ОБЪЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ УГЛЕВОДОРОДОВ МОДЕЛЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

***Самсонов М.А.*[1,2], *Писарев В.В.*[2]**

[1] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, samsonov.ma@phystech.edu*

[2] *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва*

Вязкостные свойства углеводородов имеют важное прикладное значение для нефтедобычи, разработки новых смазочных материалов. Это делает актуальным создание вычислительных моделей, способных с удовлетворительной точностью и малыми затратами дать оценку вязкости углеводородов при практически значимых давлениях и температурах. Модели на основе молекулярной динамики (МД) достаточно точны, но требуют значительных вычислительных ресурсов. В этой работе на основе МД-расчетов для набора линейных, разветвленных, циклических и ароматических углеводородов построена модель машинного обучения для предсказания объемной вязкости в широком диапазоне условий. Проводится сравнение с доступными экспериментальными данными [1, 2]. На данных МД получена зависимость времени затухания автокорреляционной функции флуктуации давления (АКФФД) от длины цепи для линейных углеводородов (см. рисунок 1). Она описывается кубической параболой. Это говорит в пользу переносимости на объемную вязкость широко применяемой модели сдвиговой вязкости смеси с показателем 1/3, позволяющей делать предсказания также для многокомпонентных смесей.

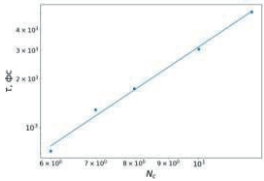


Рисунок 1. Зависимость времени затухания АКФФД от длины цепи линейного углеводорода

Разработанная модель позволяет получить оценку объемной вязкости углеводорода с точностью, близкой к МД-расчету, затрачивая на порядок меньше вычислительных ресурсов.

Список используемой литературы

1. Claes L., Chatwell R.S. et al. Measurement procedure for acoustic absorption and bulk viscosity of liquids // *Measurement*, 2021, 184. 109919.
2. Dukhin A.A, Goetz P.J. Bulk viscosity and compressibility measurement using acoustic spectroscopy // *J. Chem. Phys.*, 2009, 130. 124519.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЛИПИДОМА ПЕЧЕНИ У ЗДОРОВЫХ МЫШЕЙ И МЫШЕЙ С ГЕПАТОЦЕЛЛЮЛЯРНОЙ КАРЦИНОМОЙ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Семенова Д.К. [1], ***Парочкина Е.В.*** [1], ***Бормотов Д.С.*** [1], ***Заворотнюк Д.С.*** [1], ***Буйко Е.Е.*** [2], ***Уфандеев А.А.*** [2], ***Иванов В.В.*** [2], ***Удут Е.В.*** [2], ***Пеков С.И.*** [1], ***Попов И.А.*** [1]

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

[2] *Томский государственный медицинский университет*

Масс-спектрометрическое профилирование методом прямой ионизации перспективно для быстрого анализа молекулярного состава тканей непосредственно в ходе хирургических вмешательств. Для разработки диагностических моделей могут использоваться коллекции аутопсийного материала, однако посмертные изменения способны влиять на его липидный профиль. Поэтому для корректной классификации здоровых и опухолевых тканей необходимо учитывать признаки, связанные с посмертной деградацией.

Целью работы являлось исследование изменений липидного профиля печени здоровых мышей и мышей с гепатоцеллюлярной карциномой в раннем посмертном периоде и выделение признаков, связанных с изменением профиля в зависимости от времени после эвтаназии. Для этого была собрана коллекция биоматериала печени здоровых мышей и мышей с гепатоцеллюлярной карциномой, в раннем посмертном периоде (0-72ч) и полученные липидные профили при помощи ESI-Orbitrap масс-спектрометрии. В дальнейшем профили анализировались при помощи методов машинного обучения для выделения признаков, наиболее стабильных с увеличением посмертного интервала. После этого по более стабильным группам соединений были построены классификаторы, отличающие здоровые и опухолевые ткани в любой момент посмертного интервала с большей точностью, чем аналогичные классификаторы, построенные на всех соединениях без учета изменения профиля при посмертной деградации.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 23-69-10035.

МЕТОД АВТОМАТИЧЕСКОГО РАСЧЕТА СКОРОСТИ ФРОНТА РЕАКЦИИ ПО ДАННЫМ ВИДЕОСЪЕМКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

***Санников В.С.*[1], *Иванов В.С.*[2]**

[1] *НИЯУ МИФИ, Москва, vsevolodsannikov12@mail.ru*
[2] *ФИЦ ХФ РАН, Москва*

Скоростная видеосъемка позволяет исследовать определять скорости фронта реакции и другие особенности процессов горения и детонации. Определение локальных скоростей фронтов реакции как правило требует последовательной ручной обработки большого числа кадров, при этом как правило определяются лишь скорости фронта в интересующих исследователя направлениях, а полная картина распространения фронтов реакции не исследуется из-за трудоемкости обработки изображений. Цель работы: разработка программы с использованием алгоритмов компьютерного зрения для обработки экспериментальных видеозаписей, определения точных координат фронта горения и последующего расчета локальных скоростей распространения фронта. Для выделения области горения на видеозаписи [1] применяются методы цифровой обработки изображений: повышение локального контраста, пороговая сегментация и морфологическая фильтрация [2], таким образом определяется контур фронта. Для определения перемещения фронта используется сопоставление последовательных контуров по относительной длине дуги. Для каждой точки вычисляются накопленная длина дуги и полная длина контура; положение точки задаётся нормированной координатой $\xi_i = s_i / L$, $0 \le \xi_i \le 1$, а на следующем контуре определяется положение с тем же значением нормированной координаты. Такой способ позволяет сопоставлять геометрически соответствующие участки границы при изменении числа точек и плотности дискретизации контура.

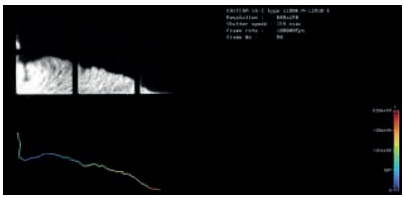


Рисунок 1. Результат обработки видеозаписи.

Список используемой литературы

1. Ivanov V.S., Shamshin I.O., Frolov S.M. Computational study of deflagration-to-detonation transition in a semi-confined slit combustor // *Energies*, 2023, Vol. 16. 7028
2. Bradski G., Kaehler A. Learning *OpenCV: Computer Vision with the OpenCV Library* // O'Reilly Media. 2008. 580

АНАЛИЗ ТЕРАГЕРЦОВЫХ СПЕКТРОВ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ С ОЦЕНКОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

***Кожевников Ф.А.*[1], *Синько А.С.*[1], *Конникова М.Р.*[1], *Ангелуц А.А.*[1,2]**

[1] *Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, phil04@yandex.ru*
[2] *Институт динамики систем и теории управления, Иркутск*

Терагерцовая импульсная спектроскопия различает газы по линиям поглощения. Перенос моделей с расчетных спектров на реальные измерения требует учета искажений установки и оценки надежности прогноза.

Для обучения создан генератор синтетических спектров на основе спектроскопических данных HITRAN [1] и системы «Спектроскопия атмосферных газов» [2]. Генератор учитывает водяной пар, дрейф базовой ялинии, шум, вариации частотной сетки и ограничение динамического диапазона. Дрейф моделируется методом главных компонент по фоновым измерениям.

Гибридная модель TSAR сочетает одномерные сверточные и Transformer-блоки. Для каждого газа она оценивает концентрацию и ее неопределенность в логарифмическом пространстве. При обучении учитывается наблюдаемость линий: их маскировка шумом, водой или другими компонентами увеличивает неопределенность.

На независимой синтетической выборке средняя абсолютная ошибка составила 0,302 dex (отклонение примерно в 2,0 раза), а для уверенно наблюдаемых компонентов — 0,199 dex (в 1,58 раза). Истинные концентрации попадали в интервалы $\mu \pm \zeta$ и $\mu \pm 2\zeta$ соответственно в 80,3 и 98,3 % случаев.

Модель без дообучения применена к экспериментальной серии смеси NH_3 и H_2S, в том числе при высокой влажности. Она воспроизвела различную динамику компонентов; среди 174 спектров не зарегистрировано устойчивых ложных детекций отсутствующих газов выше 30 ppm.

Список использованной литературы

1. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J. et al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. Vol. 277. Art. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
2. Михайленко С.Н., Бабиков Ю.Л., Головко В.Ф. Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18. № 9. С. 765–776.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВНУТРИГЛАЗНОГО ДАВЛЕНИЯ И СЕНСОРНЫХ НАРУШЕНИЙ В ЗРИТЕЛЬНОМ АНАЛИЗЕ ПРИ ГЛАУКОМЕ

Медведева А.И.

Российский экономический университет имени Г.В.Плеханова, Москва, Medvedeva.AI@rea.ru

Внутриглазное давление — величина капризная и нестабильная. Оно изменяется в такт нашим эмоциям, меняется при физическом усилии, реагирует на прием таблеток и даже на то, лежим мы или стоим. Поэтому разовые замеры у окулиста — лишь мгновенный снимок, который часто обманчив. Сегодня офтальмологи все чаще смотрят не на средние цифры, а на «опасные пики» — те краткосрочные всплески, которые бьют по зрительному нерву сильнее всего. Для этого используют интегральный показатель, где давление умножается на время его вредного воздействия. Формула проста: берется вся площадь графика, где реальное давление перекрывает допустимый порог (*Рном*), и суммируется за сутки или несколько дней. Это та самая «зона риска», которая говорит врачу о реальной угрозе гораздо больше, чем сухой среднесуточный норматив. В работе предполагается функция $I(p(t)\ T) := \int_0^T max(p(t) - Pном, 0)dt$. Что касается визуализации: моделирование поля зрения в Wolfram Mathematica выдает полярную карту с цветными маркерами, где зеленая зона (выше 25 дБ) — это норма, желтая (15–25 дБ) — относительная скотома, а красная и черная (0–15 дБ) — грубые выпадения, где децибелы, напомню, это обратная шкала: чем цифра меньше, тем хуже видит фоторецептор (необходимо для будущей анатомической генерации изображений) (рисунок 1).

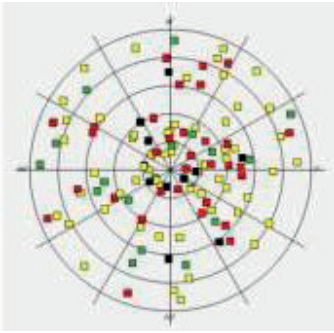


Рисунок 1. Генерация изображения поля зрения в один из дискретных моментов времени (без учета анатомических особенностей, стимулы распределены случайно)

Список использованной литературы

1. Куроедов, А. В. Профиль пациентов с первичной открытоугольной глаукомой в Российской Федерации / А. В. Куроедов, А. Б. Мовсисян, Е. А. Егоров [и др.]. — Текст: непосредственный // Национальный журнал глаукома. — 2021. — Т. 20, № 1. — С. 3–15.
2. Huang, X. Artificial intelligence in glaucoma: opportunities, challenges, and future directions / X. Huang, M. R. Islam, S. Akter [et al.]. — Text: unmediated // BioMedical Engineering OnLine. — 2023. — Vol. 22, No. 1. — P. 1–48.
3. Schuster, A. K. The Diagnosis and Treatment of Glaucoma / A. K. Schuster, C. Erb, E. M. Hoffmann [et al.]. — Text: unmediated // Deutsches Ärzteblatt International. — 2020. — Vol. 117, No. 13. — P. 225–234.

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОННО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕСКРИПТОРЫ СВЯЗИ P–O КАК МЕРА РКА УХОДЯЩЕЙ ГРУППЫ АРИЛФОСФАТОВ

***Холманских Д.Д.*[1,2], *Поляков М.Д.*[1], *Хренова М.Г.*[1,3]**

[1] *Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, maksim.poliakov@chemistry.msu.ru*

[2] *ИБХФ им. Н.М. Эммануэля РАН, Москва, daniil.kholmanskikh@chemistry.msu.ru*

[3] *ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, khrenovamg@my.msu.ru*

Гидролиз эфиров фосфорной кислоты лежит в основе энергетического обмена и передачи сигнала в клетке. Скорость расщепления эфиров определяется уходящей группой и линейно зависит от pKa соответствующего фенола [1]. Прямое измерение pKa трудоемко, а для нестабильных соединений невыполнимо, поэтому необходима ее расчетная оценка исходя из строения эфира. В работе найдены зависимости между pKa уходящей группы и усредненными по траекториям молекулярных динамик геометрическими и электронно-топологическими дескрипторами связи P–O.

Для 16 моноэфиров арилфосфорной кислоты $ArOPO_3^{2-}$ проведена QM/MM молекулярная динамика с явным растворителем (NAMD/TeraChem [2]). Квантовая подсистема включала эфир целиком, уровень расчета PBE0-D3/6-31G**; вода описана силовым полем TIP3P, ансамбль NPT, траектории длинной 70 пс. Каждый десятый кадр был проанализирован методом QTAIM (Multiwfn [3]): в критической точке связи P–O(арил) находили электронную плотность ρ, ее лапласиан $\nabla^2\rho$ и собственные значения гессиана, локальные плотности кинетической G, потенциальной V и полной H энергии, а также производные индексы G/ρ и |V|/G.

Среднее расстояние P–O меняется в пределах 1.720–1.782 Å и линейно связано с pKa: pKa = 176 − 96·d(P–O), r = –0.955, R^2 = 0.911, RMSE = 0.52. Поэлементная кросс-валидация дает Q^2 = 0.864. Электронно-топологические дескрипторы описывают ту же зависимость с близким качеством: Q^2 = 0.81 для G/ρ, 0.79 для $\nabla^2\rho$, 0.73 для ρ и 0.65 для |V|/G; эллиптичность связи и положение критической точки на связевом пути с pKa не коррелируют.

Список используемой литературы

1. Kirby A.J., Varvoglis A.G. The reactivity of phosphate esters. Monoester hydrolysis // *J. Am. Chem. Soc.*, 1967, 89. P. 415–423.
2. Melo M.C.R., Bernardi R.C. и др. NAMD goes quantum: an integrative suite for hybrid simulations // *Nature Methods*, 2018, 15. P. 351–354.
3. Lu T., Chen F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer // *J. Comput. Chem.*, 2012, 33. P. 580–592.

АНАЛИЗ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ ЦИС-РЕГУЛЯТОРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ CMV И SV40 И ОЦЕНКА ПРИМЕНИМОСТИ ГЕНОМНОЙ ЯЗЫКОВОЙ МОДЕЛИ GENA-LM ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ НУКЛЕОТИДНЫХ ЗАМЕН

***Алтынбаев В.Д.*[1], Панченко Д.Д.[1], Нурисламов А.Р.[1]**

[1]*Научно-технологический университет «Сириус», Научный центр генетики и наук о жизни, Сочи, whynotyuno@gmail.com*

Промоторы и энхансеры цитомегаловируса человека (CMV) и вируса SV40 широко используются для контроля экспрессии трансгенов в молекулярной биологии, биотехнологии и генной терапии. Однако природная вариабельность этих регуляторных элементов и ее возможное влияние на транскрипционную активность изучены не полностью. Экспериментальная оценка большого числа вариантов — трудоемкий процесс, поэтому для предварительного отбора последовательностей могут быть использованы методы биоинформатики и модели машинного обучения, предсказывающие регуляторную активность ДНК-фрагмента на основе его нуклеотидной последовательности.

Цель работы — охарактеризовать вариабельность и степень консервативности цис-регуляторных элементов CMV и SV40 среди различных природных штаммов и оценить применимость геномных моделей для прогнозирования эффекта выявляемых мутаций.

Полногеномные последовательности штаммов CMV и SV40 будут получены из базы данных NCBI Nucleotide. После фильтрации последовательностей из геномов будут выделены гомологичные регуляторные области. Множественное выравнивание, анализ нуклеотидной вариабельности и филогенетических связей будут выполнены с использованием MEGA и библиотек Python. Оценка влияния выявленных нуклеотидных замен на транскрипционную активность будет выполнена с использованием предобученной геномной модели GENA-LM.

В ходе работы планируется построить карту вариабельности исследуемых регуляторных областей CMV и SV40 среди природных изолятов. Сопоставление предсказаний GENA-LM для референсных последовательностей и их природных вариантов позволит оценить применимость модели для предварительного ранжирования последовательностей и отбора наиболее перспективных из них для последующей экспериментальной проверки в клеточных системах.

САМОСБОРКА В ПОЛИМЕРНЫХ ЩЕТКАХ, СОСТОЯЩИХ ИЗ АМФИФИЛЬНЫХ ГРЕБНЕОБРАЗНЫХ СОПОЛИМЕРОВ

***Зарькова Е.М.*[1,2], *Ларин Д.Е.*[2]**

[1] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, zarkova.em16@physics.msu.ru*

[2] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва*

Полимерные щетки на основе гребнеобразных сополимеров представляют особый интерес благодаря способности менять свою структуру под внешним воздействием [1]. Была построена теоретическая модель самосборки в плоском слое таких макромолекул с гидрофобным остовом и регулярно расположенными полярными группами. В рамках теории среднего поля и сильной сегрегации была установлена зависимость морфологии покрытия от плотности пришивки $\sigma\sim$, второго вириального коэффициента $B\sim P$, доли пришивки боковых гидрофильных групп к основной цепи r. Варьирование этих параметров позволяет обратимо переключать систему между четырьмя типами морфологий: однородной щеткой, цилиндрическими агрегатами, ламелями и пористой структурой (см. рисунок 1).

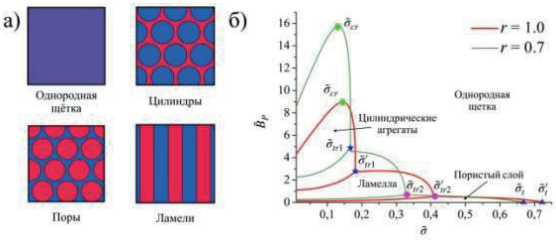


Рисунок 1. а) Формируемые структуры, б) диаграмма состояний в координатах «$B\sim P$ – $\sigma\sim$»

При увеличении второго вириального коэффициента BP, описывающего отталкивание полярных групп, имеет место серия переходов: пористый слой → ламели → цилиндрические агрегаты → однородная щетка. Также в области хорошей растворимости с ростом $\sigma\sim$ наблюдается возвратный переход от однородного слоя к цилиндрам и обратно.

Список используемой литературы

1. Зарькова Е.М., Ларин Д.Е. Самосборка в полимерных щетках, состоящих из амфифильных гребнеобразных сополимеров: диаграмма состояний // *Вестник Московского Университета. Серия 3. Физика. Астрономия. (принята в печать)*

СОПОСТАВЛЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА ТПВ-ПРОФИЛЕЙ

Полунин К.С., Иким М.И., Демина В.А., Курмангалеев К.С.

ФИЦ ХФ РАН, Москва

Газовые сенсоры на основе полупроводниковых оксидов металлов широко используются для обнаружения токсичных и взрывоопасных газов благодаря высокой чувствительности, простоте конструкции и возможности работы в широком диапазоне концентраций. Ключевой характеристикой таких устройств является сенсорный отклик, величина и температурная зависимость которого определяются составом и структурой чувствительного материала. Существующая процедура сравнения сенсорных материалов предполагает проведение полного процесса изготовления устройства и серии изотермических испытаний при различных температурах. Такой подход требует значительных временных и ресурсных затрат, что делает его неоптимальным для сравнительной оценки большого числа материалов.

В работе предложен метод полуколичественного сравнения материалов чувствительных элементов газовых сенсоров, основанный на результатах эксперимента по температурно-программированному восстановлению (ТПВ) порошка исследуемого материала [1]. Метод включает разложение экспериментального ТПВ-профиля на гауссовы компоненты и определение параметров, характеризующих каждую из них. В работе показано, как изменение каждого параметра влияет на температурную зависимость сенсорного отклика. Таким образом, параметры, получаемые из единственного ТПВ-эксперимента для каждого образца, могут быть использованы для предварительной оценки сенсорных свойств материала без изготовления сенсорного устройства и проведения серии испытаний. Это позволяет сократить временные и ресурсные затраты на сравнительную оценку материалов.

Математический аппарат и техника предлагаемого подхода не ограничиваются задачами сенсорики. Они могут быть применены и в других областях, если температурная зависимость одного из параметров, характеризующих качество или функциональные свойства материала, определяется процессом, который, в свою очередь, может быть исследован в температурно-программируемом режиме. Это позволяет рассматривать предлагаемый подход как инструмент сравнительной оценки различных материалов по результатам температурно-программируемых экспериментов.

Список используемой литературы

1. Polunin K. S., Ikim M. I. et al. H_2-TPR Application for Sensitivity Analysis of In_2O_3-Based Nanostructure Layers. // *Micromachines*, 2026, Vol. 17, Issue 8. p. 939.

ДИФФУЗИЯ В ТОНКИХ ТРУБКАХ: ОГРАНИЧЕНИЯ МОДЕЛИ ФИКА–ЯКОБСА

Федосеев Т.В.[1,2], ***Трайтак С.Д.***[1]

[1] *Федеральный исследовательский центр химической физики РАН, Москва*
[2] *Московский физико-технический институт, Долгопрудный,*
fedoseev.tv@phystech.edu

В работе рассматривается стационарная диффузия точечных броуновских частиц в круговой цилиндрической трубке радиуса R и длины L. На боковой поверхности и левом торце поддерживается постоянная концентрация, а правый торец является полностью поглощающим. В безразмерных переменных соответствующая краевая задача определяется геометрическим параметром ε=R/L. При ε<<1 задача является сингулярно возмущенной [1] и решается методом пограничных функций. Согласно критерию Вишика–Люстерника [2] для спектральной задачи с невозмущенным оператором можно построить явное асимптотическое решение. Вдали от правого торца трубки нормированная локальная концентрация стремится к единице, а быстрое ее изменение локализуется в диффузионном погранслое толщины O(ε) у поглощающего торца. Асимптотическое решение в главном порядке по ε совпадает с точным.

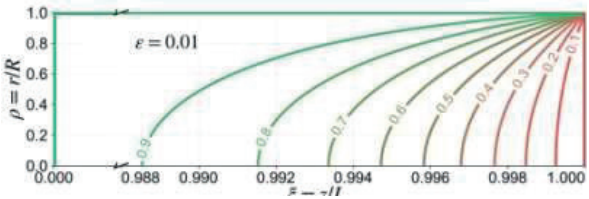


Рисунок 1. Изолинии нормированной локальной концентрации при ε = 0,01.

Данная задача была также решена методом редуцирования Фика–Якобса [3], что выявило серьезные трудности в его применении: после усреднения по поперечному сечению трубки в уравнение для средней концентрации входит неизвестный радиальный поток на стенке. Для замыкания редуцированной модели нужна дополнительная гипотеза о распределении концентрации по сечению, тогда как метод пограничных функций непосредственно воспроизводит двумерное решение во всей области, включая и диффузионный пограничный слой.

Список использованной литературы

1. Traytak S.D. Asymptotic solution of the diffusion equation in slender impermeable tubes of revolution. I. The leading-term approximation // *J. Chem. Phys.* 2014. Vol. 140. 224102.
2. Vishik M.I., Lyusternik L.A. The solution of some perturbation problems for matrices and selfadjoint or non-selfadjoint differential equations. I // *Russ. Math. Surv.* 1960. Vol. 15. P. 1–73.
3. Dagdug L., Peña J., Pompa-García I. *Diffusion under Confinement. A Journey through Counterintuition*. Springer Nature, 2024.

РАЗНООБРАЗИЕ МОРФОЛОГИЙ ЖИДКОЙ ФАЗЫ В ТРЕУГОЛЬНЫХ НАНОПОРАХ ПРИ ПОЛНОМ НЕСМАЧИВАНИИ

***Трофименко Е.Т.*[1], Вандышев Г.К[1], Копаничук И.В.[1]**

[1] *Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), Долгопрудный, trofimenko.et@phystech.edu*

Поведение жидкостей в порах ограниченной геометрии широко распространено в задачах, связанных с геологией. При этом поведение жидкости в ограниченной поре сильно отличается от поведения в объеме [1]. Отличие затрагивает формы жидкости, углы смачивания, профили плотности и другие характеристики [2].

В работе исследуются возможные формы полностью несмачивающей жидкости ($\theta = 180^\circ$) в треугольной поре. Геометрическими методами получены аналитические выражения для одномерных профилей плотности и свободной энергии, на основе которых построена диаграмма стабильности (см. рисунок 1). Наиболее энергетически выгодными оказались четыре морфологии: сферическая капля; цилиндрическая нить вдоль оси поры, не соприкасающаяся со стенками; вытянутая форма, контактирующая со всеми тремя стенками и образующая мениски в углах треугольного сечения; а также капсулообразная форма со сферическими концами. Полученные профили плотности были проверены на синтетических данных, а диаграмма стабильности и аналитические результаты хорошо согласуются с молекулярно-динамическим моделированием системы графит–вода–бутан в GROMACS.

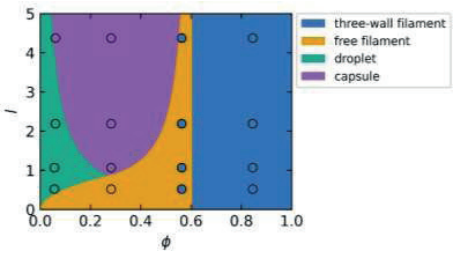


Рисунок 1. Диаграмма стабильности форм для разных значений φ и l при θ = 180°

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 26-73-10086).

Список используемой литературы

1. Aluru N. R., Aydin F., Bazant M. Z. et al. Fluids and electrolytes under confinement in single-digit nanopores // *Chemical Reviews*, 2023, 123. 2737–2831.
2. Vandyshev G., Kopanichuk I. et al. The interface shape and contact angle determination for liquid-liquid systems in cylindrical nanopores // *Capillarity*, 2026, 19(3). 86–96.

КВАНТОВО-ПОЛЕВОЙ ПОДХОД К КИНЕТИКЕ МНОГОСТАДИЙНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ: СОЗДАНИЕ ПОЛНОСТЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕОРИИ ВСТРЕЧ (CMET)

***Ли Р.В.*[1], Игошин О.А. [2], Криссинель Е.Б.[3], Французов П.А.[1]**

[1] Институт химической кинетики и горения им В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, roman.lithium@gmail.com

[2] Department of Bioengineering, Department of BioSciences. Department of Chemistry and Center for Theoretical Biological Physics, Rice University, Houston, USA

[3] Research Complex at Harwell, Scientific Computing, Science and Technology Facilities Council, Didcot, OX11 0FA, United Kingdom

Реакционно-диффузионные процессы лежат в основе явлений от фотохимии до клеточной сигнализации. Классический закон действующих масс не учитывает пространственные корреляции частиц, возникающие при геминальной рекомбинации и в диффузионно-ограниченном режиме. Существующие теории (IET, MET) имеют ограниченную применимость и не дают корректных асимптотик, например $t^{-3/2}$ для $A + B \leftrightarrow C + D$, а также не воспроизводят корректную кинетику на малых временах.

Цель работы заключается в создании универсальной теории кинетики многостадийных реакционно-диффузионных систем.

На основе формализма вторичного квантования и диаграммной техники выведены новые кинетические уравнения — полностью модифицированная теория встреч (CMET). Эта теория учитывает полный набор корреляций, воспроизводит точные степенные асимптотики и согласуется с ранее разработанными теориями в рамках их применимости.

CMET дает строгий аппарат для моделирования кинетики в химической физике, биофизике, системной биологии и материаловедении (например, рекомбинация в перовскитах). Программа Tegro делает теорию доступной для исследователей, заменяя ресурсоемкие симуляции многих частиц.

Список используемой литературы

1. Roman V. Li, Oleg A. Igoshin, Evgeny B. Krissinel, and Pavel A. Frantsuzov. Quantum field theory approach for multistage chemical kinetics in liquids // Phys. Rev. E, 2026, 114. 034111.

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕДИЦИОННЫХ ДАННЫХ ПО ПРОДУКЦИОННЫМ ПАРАМЕТРАМ И ФАКТОРАМ СРЕДЫ КАРСКОГО МОРЯ

***Щербинина Е.А.*[1, 2], *Демидов А.Б.*[2]**

[1] *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, shcherbinina.ea@phystech.edu*

[2] *Институт океанологии им. П.П. Ширшова РАН, Москва*

В данном исследовании проведена статистическая обработка базы данных по продукционным параметрам фитопланктона (ИПП, $Хл_{фс}$), собранных с 1993 по 2024 гг. в Карском море. Задачи работы включают: систематизацию и очистку данных, статистический анализ и интерпретацию результатов [1].

Статистические расчеты состояли из корреляционного и регрессионного анализов, а также анализа методом PCA [2].

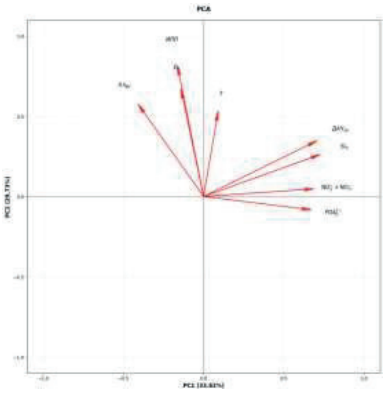


Рисунок 1. Визуализация метода главных компонент

PCA (рис. 1) демонстрирует наличие двух главных компонент, описывающих 33,62% и 29,73% общей дисперсии соответственно. Результаты PCA говорят о существенном влиянии ФАР на ИПП и $Хл_{фс}$, так как первая является важнейшим показателем сезонности, определяющим динамику ИПП в Карском море.

Список используемой литературы

1. Демидов, А. Б. Межгодовая изменчивость ледового покрова и первичной продукции карского моря / А. Б. Демидов, С. В. Шеберстов, В. И.
2. Гагарин. — Текст : непосредственный // Океанология. — 2018. — № 4. — С. 578-592.
3. Demidov, A.B.; Belevich, T.A.; Sheberstov, S.V. Optimal Assimilation Number of Phytoplankton in the Siberian Seas: Spatiotemporal Variability, Environmental Control and Estimation using a Region-Specific Model. J. Mar. Sci. Eng. 2023, 11, 522. https://doi.org/10.3390/jmse11030522

ЧИСЛЕННОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОРИСТОСТИ ПЛОСКОЙ ГОРЕЛКИ НА СВОЙСТВА И СТРУКТУРУ ПЛАМЕНИ

***Губарев Е.Д.*[1], *Серещенко Е.В.*[1], *Губернов В.В.*[1]**

[1] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, gubarev.egorgubarev@yandex.ru

В экспериментах для изучения горения газообразных топливных смесей часто применяется плоская пористая горелка [1]. Принято считать, что такая горелка является стандартной установкой для стабилизации плоского пламени. Однако пористая структура поверхности горелки создает неоднородность в скорости подачи топливной смеси [2]. Такая неоднородность может приводить к искажению формы фронтпа пламени и влиять на его свойства.

В работе выполнено численное исследования свойств и структуры пламени на микро-масштабе пор. Горение моделируется в два этапа. На первом этапе решается уравнение Навье-Стокса и определяется поле скорости газообразной топливной смеси. На втором этапе поле скоростей используется для решения нестационарной диффузионно-тепловой задачи. Для проверки полученных результатов проведен лабораторный эксперимент.

В результате установлено, что использовние горелки с низкой пористостью или большим размером пор приводит к формированию искривленного пламени. Искривление влияет на измеряемые характеристики пламени. В частности, оно приводит к сдвигу точки потери устойчивости пламени к возникновению диффузионно-тепловых колебаний.

Исследована зависимость искривления пламени от состава топливной смеси и от скорости подачи на горелку. Определен критерий, при котором пламя на плоской пористой горелке остается одномерным. Соблюдение этого критерия позволяет с большей точностью определять свойства пламени в эксперименте.

Список используемой литературы

1. Egolfopoulos F. N. et al. Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry //Progress in Energy and Combustion Science. — 2014. — Т. 43. — С. 36-67.
2. Hindasageri V. et al. An experimental and numerical investigation of heat transfer distribution of perforated plate burner flames impinging on a flat plate //International Journal of Thermal Sciences. — 2015. — Т. 94. — С. 156-169.

ЗОННАЯ СТРУКТУРА ИОДИДА ЦЕЗИЯ

***Кожаткин И.Д.*[1,*], Щербинин А.В.[1], Васильев А.Н.[2]**

[1] Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, ivankozhatkin@gmail.com

[2] Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва

Иодид цезия – один из традиционных материалов для создания неорганических сцинтилляторов, и его электронная структура неоднократно изучалась как теоретическими, так и экспериментальными методами. Важную роль в понимании электронных и транспортных свойств этого материала играет состав и симметрия его электронных зон, а также учет релятивистских взаимодействий в тяжелых атомах Cs и I. В данной работе представлены результаты зонных расчетов иодида цезия в рамках обобщенно-градиентного функционала Perdew, Burke, Ernzerhof (PBE) [1] в базисе плоских волн с использованием программного комплекса Quantum ESPRESSO [2] и нескольких вариантов релятивистского остовного приближения [3–5]. Рассчитаны дисперсии уровней валентной зоны и зоны проводимости, а также проекции блоховских состояний на ортогонализованные атомные волновые функции и парциальная плотность состояний (PDOS) в зависимости от используемого остовного приближения. Обсуждается влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру иодида цезия, а также смешивание состояний *p*-Cs и *p*-I в валентной зоне и вклады состояний *d*-Cs в зону проводимости.

Список используемой литературы

1. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77 (18). P. 3865–3868.
2. P. Giannozzi, O. Andreussi et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, 29. P. 465901(1–30).
3. A. Dal Corso. Pseudopotentials periodic table from H to Pu // *Computational Materials Science*, 2014, 95. P. 337–350.
4. M.J. van Setten, M. Giantomassi et al. The PseudoDojo: Training and grading a 85 element optimized norm-conserving pseudopotential table // *Computer Physics Communications*, 2018, 226. P. 39–54.
5. N. Troullier, J.L. Martins. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // *Phys. Rev. B*, 1991, 43 (3). P. 1993–2006.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ДАННЫХ ПО ДВУХФОТОННОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ РЯДА ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ

***Никитин К.Ю.*[1,*], Щербинин А.В.[1]**

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, nikitinky@my.msu.ru*

Двухфотонная спектроскопия находит многообразные применения, в частности, в флуоресцентной микроскопии, трехмерной микрофабрикации, фотодинамической терапии и других областях [1]. По этой причине исследованию двухфотонных процессов посвящено значительное число работ, как экспериментальных, так и расчетных.

В то же время, прямое сравнение экспериментальных сечений двухфотонного поглощения с данными, получаемыми на основе квантово-химических расчетов, приводится весьма нечасто [2, 3]. Отмечается, что при подобном сравнении важно принимать во внимание технические особенности проведения двухфотонного эксперимента [4]. Этому кругу вопросов, в свою очередь, посвящена отдельная обширная литература [5].

В данной работе предпринята попытка систематически проанализировать некоторые имеющиеся в литературе расчетные и экспериментальные данные по двухфотонному поглощению ряда органических хромофоров.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300176-3.

Список используемой литературы

1. Pawlicki M., Collins H.A. et al. Two-Photon Absorption and the Design of Two-Photon Dyes // *Angewandte Chemie International Edition*, 2009, 48(18). 3244–3266.
2. Zhang Y., Jiang M. et al. Solvent Effect and Two-Photon Optical Properties of Triphenylamine-Based Donor–Acceptor Fluorophores // *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119. 27630–27638.
3. Aslopovsky V.R., Scherbinin A.V. et al. Impact of the Protein Environment on Two-Photon Absorption Cross-Sections of the GFP Chromophore Anion Resolved at the XMCQDPT2 Level of Theory // *Int. J.Mol. Sci*., 2023, 24. 11266 (1–14).
4. Beerepoot M.T.P., Friese D.H., List N.H. et al. Benchmarking two-photon absorption cross sections: performance of CC2 and CAM-B3LYP // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17(29). 19306–19314.
5. Rumi M., Perry J.W. Two-photon absorption: an overview of measurements and principles // *Advances in Optics and Photonics*, 2010, 2(4). 451–518.

ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛИНОВИДНЫХ МЕЗОГЕНОВ НА САМООРГАНИЗАЦИЮ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

***Дмитрович А.Д.*.[1,2], Буглаков А.И.[2]**

[1] Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, dmitrovich.ad22@physics.msu.ru

[2] Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

[3] ИНЭОС РАН, Москва

Супрамолекулярные гребнеобразные полимеры на основе жидкокристаллических мезогенов, динамически связанных с полимерной цепью, представляют интерес для создания биомиметических мембран и систем адресной доставки. В отличие от ковалентных аналогов, мезогены способны мигрировать вдоль цепи, что позволяет настраивать структуру за счет пространственного распределения связывающих мономеров. Однако влияние последовательности мономеров на самоорганизацию комплексов остается открытым [1]. Методами крупнозернистого моделирования исследованы расплавы смесей гомополимеров и статистических сополимеров 4-винилпиридина со стиролом с клиновидными мезогенами 2,3,4-трис(додецилокси)бензолсульфоновой кислоты, образующими обратимые комплексы через водородные связи. Использован метод диссипативной молекулярной динамики (DPD) с параметрами [2], рассчитанными из параметров растворимости Хансена по методу ван Кревелена.

Показано, что распределение связывающих мономеров связывания вдоль цепи определяет самоорганизацию комплексов. Наблюдается формирование полимерных доменов и комплексов цепей с мезогенами, соотношение которых зависит от концентрации полимера и доли пришивок. В гомополимере мезогены образуют протяженные блоки, приводящие к формированию более крупных доменов, тогда как в статистическом сополимере они распределены равномерно. Блочное распределение характеризуется большим расстоянием между цепями, а равномерное — его уменьшением, что свидетельствует об интердигитации слоев. Результаты были сопоставлены с экспериментальными данными МУРР и АСМ.

Авторы выражают благодарность Марясевской А.В., Анохину Д.В. и Иванову Д.А. за предоставление дифрактограмм и АСМ-изображений соответствующих полимерных комплексов для сравнения.

Список используемой литературы

1. Maryasevskaya A.V. et al. Journal of Colloid and Interface Science, 2024, 678, 458-469.
2. Groot R.D., Warren P.B. Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation // J. Chem. Phys. — 1997. — Vol. 107, No. 11. — P. 4423–4435.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСА ВКЛЮЧЕНИЯ β-ЦИКЛОДЕКСТРИН-ХЕЛИДОНОВАЯ КИСЛОТА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПРИ 298–340 К

***Терехина Е.Н.*[1], *Антипова М.Л.*[2], *Петренко В.Е.*[2]**

[1]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, lena.aleksandrovskaya.lena@mail.ru*

[2]*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново*

Хелидоновая кислота (ХК) или 4-оксо-4Н-пирон-2,6-дикарбоновое соединение, выделяемое из экстракта растения Saussurea controversa, известное своей многообещающей биологической и фармакологической активностью. ХК широким спектром потенциальных терапевтических эффектов: онкостатическим, мягким обезболивающим, антимикробным, седативным, противовоспалительным, гиполипидемическим и иммуномодулирующим [1]. Исследования ХК в качестве перспективного кандидата для создания лекарственных средств показали, что ее существенным недостатком, затрудняющим применение в качестве фармакологических продуктов или фитопрепаратов, является токсичность и низкая растворимость в воде. Один из способов решения данной проблемы — это создание супрамолекулярных комплексов типа — гость-хозяин, где хозяином выступает циклодекстрин (ЦД) или другое вещество, а гостем — ХК.

В данной работе исследовалось влияние температуры на комплекс включения ХК/β-ЦД (см. рисунок 1).

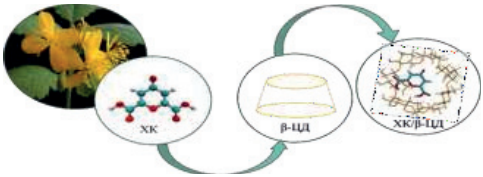


Рисунок 1. Схема образования комплекса включения хелидоновая кислота/β-циклодекстрин

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование комплекса ХК/β-ЦД в водном растворе проводилось в программном пакете GROMACS 2019.6 в диапазоне температур 298К — 340К. Полученная МД траектория комплекса позволила рассчитать динамические и структурные характеристики комплекса (среднеквадратичное отклонение атомов, функции радиального распределения, времена и количество водородных связей).

Список используемой литературы

1. Мирошниченко Л.А., Полякова Т.Ю., Авдеева Е.Ю. и др. Хелидоновая кислота и ее деривaты: общий спектр биологической активности и остеогенные свойства // Разработка и регистрация лекарственных средств. — 2022. — Т. 11. — С. 60–71.

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОСТАТКОВ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

***Кристовский Н.В.*[1], Армеев Г.А.[1], Шайтан К.В.[1]**

[1] *Биологический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва,*
krist179@mail.ru

Метод молекулярной динамики (МД) позволяет моделировать движение атомов и молекул, воспроизводя структурные и динамические свойства биомолекул на основе параметров силовых полей.

Существует множество семейств силовых полей (AMBER, CHARMM, GROMOS), каждое из которых описывает ограниченный набор атомов, молекул, остатков полимерных цепей и отдельных посттрансляционных модификаций (ПТМ). Для нестандартных модификаций остатков требуется отдельная параметризация.

В работе представлена программная библиотека «ResParTools», автоматизирующая параметризацию модифицированных остатков в рамках силового поля AMBER ff14SB для пакета GROMACS: конвейер строит топологию остатка, присваивает атомные имена по номенклатуре GROMACS и рассчитывает парциальные заряды методом RESP (PsiRESP, HF/6-31G*) либо графовой нейронной сетью EspalomaCharge с точностью на уровне AM1-BCC. Ключевой особенностью протокола является формирование файлов топологии остатка (RTP, HDB), что позволяет бесшовно моделировать их в составе белков. Полученные файлы корректно считываются GROMACS в составе полимерной цепи белка или нуклеиновой кислоты, тогда как специализированного инструментария для решения этой задачи ранее не существовало.

С использованием разработанного конвейера параметризовано 11 вариантов ПТМ лизина. Показано, что заряды, предсказанные EspalomaCharge, согласуются с референсными значениями RESP, а рассчитанные на их основе траектории молекулярной динамики (15 траекторий по 200 нс) воспроизводят ожидаемые эффекты ПТМ на подвижность гистонового хвоста H3, подтверждая применимость разработанного протокола для масштабируемой параметризации ПТМ в задачах молекулярной динамики.

Список используемой литературы

1. Maier J.A., Martinez C., Kasavajhala K. и др. ff14SB: Improving the accuracy of protein side chain and backbone parameters from ff99SB // Journal of Chemical Theory and Computation, 2015, №11(8). С. 3696–3713.
2. Wang Y., Pulido I., Takaba K. и др. EspalomaCharge: Machine Learning-Enabled Ultrafast Partial Charge Assignment // The Journal of Physical Chemistry A, 2024, №128(20). С. 4160–4167.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭФФЕКТОВ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ Te@УНТ ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

***Петрова С.С.*[1], *Квашнин Д.Г.*[1]**

[1] *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, c.belim@yandex.ru*

В последние годы активно исследуются УНТ, заполненные кристаллами со стержневой геометрией, такими как сера и селен, которые при инкапсуляции в нанотрубки формируют спиральные структуры [1]. В рамках данного исследования рассматривается теллур — элемент со схожим стержневым строением, квантово-химические исследования которого только начали проводиться. В ходе работы были проведены моделирование и оценка стабильности структур, состоящих из одностенных углеродных нанотрубок разных диаметров (8 — 11 Å) и индексов хиральности (8.5, 11.0) с размещенными внутри стержнями теллура.

Расчеты проводились с использованием метода DFT в программном комплексе SIESTA. В ходе работы проведена оптимизация гибридной структуры и отдельных компонентов (УНТ и стержней Te), для которых были рассчитаны зависимости энергии от волнового вектора.

Для гибридной структуры Te@УНТ (8,5) электронные состояния от стержня теллура расположены на самом стержне и на поверхности нанотрубки вблизи атомов теллура. В гибридных структурах с полупроводниковыми нанотрубками наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны при внедрении стержня теллура, за счет поднятия зон теллура, которое происходит из-за сжатия стержня внутри УНТ на 3,19% из-за несоответствия параметров решетки ОУНТ и Te.

При расчете процесса заполнения гибридной структуры Te@УНТ и чистой нанотрубки водой, в системе с чистой УНТ взаимодействия между водой и нанотрубкой не обнаружено. В системе с гибридной структурой, происходит образование C-O связей на внешней стороне УНТ, вблизи атомы Te.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-73-10250, https://rscf.ru/project/25-73-10250/)

Список используемой литературы

1. Mikhailov I., Domnin A., Evarestov R. Quantum chemical study of the influence of torsional deformation on the properties of chiral WXY (X, Y = S, Se) Janus-nanotubes // arXiv: 2411.00185, 2024.

КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ПЛАЗМИДЫ PCOMB3XSS-S100B

***Сыроватская Я.В.*[1], *Нурбеков М.К.*[2]**

[1] *Первый Московский Государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова, Москва, yana.syr@bk.ru*

[2] *Научно-исследовательский институт общей патологии и патофизиологии, Москва*

Белок S100B относится к семейству EF-hand кальций-связывающих белков и участвует в регуляции клеточного цикла, дифференцировки и внутриклеточной сигнализации. Его дисфункция ассоциирована с нейродегенеративными заболеваниями и онкопатологиями, что делает получение рекомбинантной формы S100B актуальной задачей для биомедицинских исследований. Ранее клонирование кДНК S100B уже проводилось в системах экспрессии E. coli [1], однако вектор pComb3XSS обладает рядом преимуществ: наличие пептидного лидера pelB для направления белка в периплазматическое пространство, гексагистидиновый тег для аффинной очистки и сайты для последующего фагового дисплея.

Целью работы было биоинформатическое моделирование клонирования кДНК гена S100B в вектор pComb3XSS для последующей экспрессии целевого белка в E. coli.

Моделирование проводили в платформе Benchling. В качестве вектора использовали pComb3XSS, в качестве вставки — кДНК гена S100B. Подбор уникальных сайтов рестрикции, моделирование рестрикции, лигирования и верификацию сборки проводили in silico. Корректность сборки оценивали по сохранению рамки считывания и целостности функциональных элементов вектора (промотора, сайта связывания рибосомы, гена антибиотикорезистентности). В ходе работы была спроектирована рекомбинантная плазмида pComb3XSS-S100B. Выбраны уникальные сайты рестрикции SacI и XceI, проведена визуализация этапов рестрикции и лигирования.

Биоинформатический анализ подтвердил корректность сборки: сохранение рамки считывания, целостность ключевых функциональных элементов и отсутствие нежелательных сайтов рестрикции в целевой вставке. Показана эффективность биоинформатического подхода для планирования экспериментов по молекулярному клонированию. In silico верификация позволяет минимизировать материальные и временные затраты и закладывает основу для создания функционально активной рекомбинантной системы экспрессии белка S100B, что открывает возможности для его дальнейшего изучения в биомедицинских исследованиях.

Список используемой литературы

1. Нурбеков М.К., Терехина О.Л. и др. Клонирование кДНК S100B в E. coli под контролем индуцибельного промотора, и ее гетерологичная экспрессия // *Патогенез*, 2018, № 4. 148–152.

МОДЕЛЬ ГЕТЕРОАГРЕГАТОВ ТРОМБОЦИТОВ С ОПУХОЛЕВЫМИ КЛЕТКАМИ MCF-7

***Васильев Г.А.*[1], Корнейчук А.Д.[2,3], Яковенко Л.В.[4]**

[1]Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук (ИБХФ РАН), Москва, vasilev.ga18@physics.msu.ru

[2]Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии Российской академии наук (ЦТП ФХФ РАН), Москва

[3]Национальный медицинский исследовательский центр детской гематологии, онкологии и иммунологии имени Дмитрия Рогачева, Москва

[4]Физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва

Для кровяных клеточных фрагментов тромбоцитов, которые *in vivo* участвуют в остановке кровотечения, изветсен экспериментально наблюдаемый феномен, при котором в ответ на добавление опухолевых клеток в существенно более низких концентрациях, чем тромбоцитов, наблюдается образование гетероагреатов тромбоцитов и опухолевых клеток. При этом тромбоциты маскируют опухолевые клетки от ответа иммуной системы, что способствует распространению метастаз по организму. Поэтому становится актуальным определение механизмов агрегации тромбоцитов в присутствии опухолевых клеток, т.к. это имеет особую важность для определения подходящих методов терапии соотвествующих онкологических заболеваний. Цель работы заключается в определении возможных механизмов агрегации тромбоцитов в присутствии опухолевых клеток.

Построение математической модели агрегации тромбоцитов в присутствии одного из ключевых активаторов (тромбина) на основе системы дифференциальных уравнений с численным решением на основе компьютерных вычислительных мощностей. Модель постепенно усложнена путем введения в систему опухолевых клеток, гетероагрегатов тромбоцитов и тромбина (в явном виде). Для оценки параметров модели применялись экспериментальны данные light transmission aggregometry (LTA).

Определены зависимости параметров базовой модели (имеющих смысл вероятности реакций) от концентрации активатора (тромбина). Для продвинутой версии модели (с опухолевыми клетками) также определены параметры генерации тромбина на самих опухолевых клетках.

Установлен в рамках моделирования механизм агрегации тромбоцитов в присутствии опухолевых клеток (включающий в себя генерацию тромбина на опухолевых клетках). В дальнейшем предполагается применение полученных зависимостей параметров от концентрации тромбина в модели клеточных автоматов для определения биофизических параметров агрегации.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОНФОРМЕРОВ CSD С ПОМОЩЬЮ ЯМР И МД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Миннуллина Г.А., Ефимов С.В., Клочков В.В.

Казанский федеральный университет, г. Казань, g.minnullina2010@yandex.ru

Циклический ундекапептид циклоспорин D (CsD) — природный аналог CsA, известного благодаря использованию в иммуносупрессивной терапии для предотвращения отторжения пересаженных органов и тканей [1]. Разные варианты CsA могут обладать в различной степени иммунодепрессивными, а также другими ценными фармакологическими свойствами [2]. Известно, что одним из факторов, определяющих биологическую активность пептидов, является их пространственная структура, которая, в свою очередь, может меняться в зависимости от взаимодействия с молекулярным окружением.

В данной работе с помощью методов ЯМР спектроскопии был изучен CsD в ацетонитриле (CD_3CN, концентрация пептида — 1,3 мМ) и в смеси ацетонитрил-вода. Были выполнены расчеты методом молекулярной динамики (МД) при высоких температурах от 550 до 700 К в воде для наблюдения цис-транс изомеризации пептидных связей и расчет при комнатной температуре. В спектрах ЯМР в ацетонитриле наблюдался один доминирующий конформер CsD, после добавлении воды в пропорции 1:10 количество сигналов увеличилось, что говорит об увеличении числа равновесных конформаций. Выполнено полное соотнесение сигналов ^{1}H и ^{13}C, за исключением сигналов карбонильных атомов углерода, для CsD, растворенного в ацетонитриле, и для основного конформера пептида в смеси ацетонитрил-вода; для минорного конформера выполнено частичное соотнесение. Разность химических сдвигов одноименных атомов углерода в двух соотнесенных конформерах достигала 3 м.д., что свидетельствует о существенном различии их структур. Анализ спектров NOESY, зарегистрированных до и после добавления воды, позволили получить качественные данные о некоторых межпротонных расстояниях в CsD: в минорном конформере исчез пик между сигналами протонов Mle9 Ha и Mle10 Ha, и появился пик Mva11 Ha — Bmt1 Ha. С помощью моделирования МД при температуре 550 К обнаружено, что цис-транс изомеризация пептидной связи происходит в двух участках — между аминокислотами Mle9 и Mle10, Mva11 и Bmt1, что согласуется с данными, полученными из спектров NOESY.

Список использованной литературы

1. Hamawy M., Knechtle S. An Overview of the Actions of Cyclosporine and FK506 // *Transplantation Reviews*, 2003, V. 17, No. 4. P. 165-171.
2. Sadeg N., Pham-Huy C. и др. In Vitro and In Vivo Comparative Studies on Immunosuppressive Properties of Cyclosporines A, C, D and Metabolites M1, M17 and M21 // *Immunopharmacology and Immunotoxicology*, 1993, No. 15. P. 163-177.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПРЕДРЕАКЦИОННОГО КОМПЛЕКСА 6-ФОСФО-А-ГЛЮКОЗИДАЗЫ GLVA МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Хохлов А.А.[1], Булавко Е.С.[2], Иванков Д.Н.[2]

[1]Московский физико-технический институт, Долгопрудный
[2]Сколковский институт науки и технологий, Москва

Ферменты семейства гликозидгидролаз 4 (GH4) в отличие от большинства углевод-активных ферментов, использующих классический кислотно-основный механизм Кошланда, реализуют необычный редокс-нейтральный механизм, который позволяет им в пределах одного сайта расщеплять как α-, так и β-гликозидные связи, а также тиогликозиды. Понимание структурных основ этой каталитической универсальности предоставляет ценные данные для рациональной белковой инженерии и создания биокатализаторов. Для раскрытия деталей NAD^+- и Mn^{2+}-зависимого окислительно-элиминирующего (E1cb) каталитического механизма 6-фосфо-α-глюкозидазы GlvA (GH4) проведено комплексное МД моделирование ее активного центра. На первом этапе выполнена KM/MM-оптимизация геометрии предреакционного комплекса методом DFT (B3LYP/6-31G*, def2-SVP для Mn^{2+}) в пакете NWChem. Для описания координационной сферы Mn^{2+} в классической МД параметризована связанная модель металлоцентра: на основе частот, полученных в ORCA (B3LYP-D3BJ/6-31G*/def2-SVP) рассчитаны силовые константы методом Семинарио, а топология металлокомплекса сгенерирована в easyPARM. Симуляции проводились методом классической МД (AMBER ff19SB, GLYCAM_06j-1 для углеводного субстрата и силовое поле металлоцентра). Установлено, что структурированная молекула воды, координированная триадой Thr110–Glu111–Tyr265, критически необходима для стабильности михаэлисовского комплекса и может выступать медиатором протонного эстафетного переноса на остаток Glu111 при C2/C3-депротонировании кольца[1]. Метадинамика по торсионным степеням свободы субстрата выявила стабильную конформацию мальтозного фрагмента, структурно подготовленную для взаимодействия с каталитической кислотой Asp172.

Авторы выражают благодарность за использование высокопроизводительного вычислительного кластера Сколтеха «Жорес» для получения результатов.

Список используемой литературы

1. W. Huang, J. Llano, J.W. Gauld. Redox Mechanism of Glycosidic Bond Hydrolysis Catalyzed by 6-Phospho-α-glucosidase: A DFT Study // *J. Phys. Chem. B*. 2010. Т. 114. С. 11196–11206.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТИ ПРИ ПОМОЩИ ТРАНСФОРМЕРА И ГРАФОВОЙ СЕТИ ВНИМАНИЯ

Барулина М.А., Цитронов В.А.

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, tsitronovvv@yandex.ru

Цель данной работы состоит в оценке трансформера и графовой сети внимания (GAT) по экспериментальным данным выборки. Моделям необходимо определить не только величину энантиомера, но и его направление, которое играет важную роль в асимметрическом катализе. После очистки было получено 689 реакций для трансформера и графовой сети внимания. Трансформер обрабатывал признаки катализатора, альдегида, силана, растворителя и температуры в четырех слоях самовнимания с восемью головами. В GAT модели реакции задавали вершинами, связи отражали сходство условий, а три слоя внимания содержали по четыре головы. Для оценки моделей использовалась групповая кросс валидация, при которой реакции с одинаковым составом компонентов не разделялись между обучающей и тестовой выборками. Каждая архитектура оценивалась на пяти разбиениях данных с пятью независимыми запусками на каждом разбиении и различной случайной инициализацией параметров модели. Оценка качества архитектуры основывалась на результатах обучения 25 экземпляров модели.

Таблица 1. Результаты на внешних выборках

Показатель	Трансформер	Графовая сеть внимания
Число реакций во внешней выборке	70	
Средняя абсолютная ошибка, %	26,10	27,35
Среднеквадратичная ошибка, %	42,79	40,23
Коэффициент детерминации R^2	0,635	0,633
Верно определенный знак, %	85,5	86,2

Исходя из таблицы, можно сказать, что трансформер лучше справляется с расчетом энантиомера, а GAT модель выигрывает по направлению. Поскольку внешние выборки фиксированы одинаковым начальным состоянием — это позволяет сравнить модели практически в одинаковых условиях. Результаты подтверждают применимость обоих подходов к ограниченным экспериментальным данным. В дальнейшем модели предстоит проверить не только на независимой группе реакций, с большим объемом внешней выборки, но и на реальном эксперименте для закрепления полученных результатов.

Список используемой литературы

1. Jaume-Santero F. et al. Transformer Performance for Chemical Reactions. Analysis of Different Predictive and Evaluation Scenarios // J. Chem. Inf. Model. 2023. Vol. 63. P. 1914–1924. DOI 10.1021/acs.jcim.2c01407.
2. Aguilar-Bejarano E. et al. Homogeneous Catalyst Graph Neural Network. A Human-Interpretable Tool for Ligand Optimization in Asymmetric Catalysis // iScience. 2025. Vol. 28. 111881. DOI 10.1016/j.isci.2025.111881.

ОТКЛОНЕНИЕ ДРЕЙФА ЧАСТИЦ ОТ КЛАССИЧЕСКОГО СТОКСОВА ДРЕЙФА НА НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛНАХ

Боровиков Н.С. [1], ***Малков Д.А.*** [1], ***Параскун А.Г.*** [1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, n.borovikov@g.nsu.ru*

[2] *Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск*

Перенос взвешенных и плавающих частиц поверхностными гравитационными волнами описывается стоксовым дрейфом. Однако для нелинейных волн и для частиц, отличных от нейтрально плавучих жидких меток, наблюдаемый дрейф систематически отклоняется от классического предсказания. Настоящая работа количественно характеризует это отклонение. Актуальность работы обусловлена тем, что отклонение наблюдаемого дрейфа от классического предсказания напрямую влияет на прогнозы распространения загрязнений, биогеохимических потоков, тепла и примесей в верхнем слое океана. Воможность определить отклонение позволит точно прогонзировать скопление различных частиц в океане и прибрежной зоне.

В работе использован двумерный спектральный метод высокого порядка (HOS) для потенциального течения, дополненный лагранжевыми частицами по уравнению Макси–Райли (присоединенная масса, сила градиента давления, сопротивление, плавучесть). Поскольку потенциальное течение невязкое и безвихревое, вычисляемый дрейф свободен от паразитного численного стриминга, что делает метод чистым эталоном, в том числе для мешфри-расчетов (SPH). Пассивные метки воспроизводят аналитический стоксов дрейф конечной глубины с максимальной погрешностью 4.8%; дрейф самосходится по порядку разложения (0.03% при M=3 относительно M=4); при единичном отношении плотностей инерционная модель восстанавливает трасерный результат, что подтверждает согласованность схемы. В работе показано, что нелинейность волны добавляет сверхквадратичное усиление до ~9% при крутизне волны *ak* = 0.18. Совокупность результатов сведена в карту режимов отклонения u_d/u_s по плоскости (β, ak) со значениями 0.64–1.60 (рисунок 1).

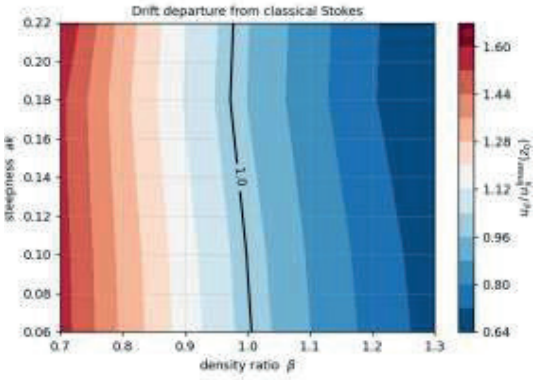


Рисунок 1. Карта отклонения дрейфа u_d/u_s от классического стоксовского по плоскости (β, ak). Черная линия — единичный контур.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА ГЛИКОЛИДА ИЗ МЕТИЛГЛИКОЛЯТА

Губанков А.А., Новиков В.Т.

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий, Томский политехнический университет, Томск, aleksandargubankov@yandex.ru

Гликолид — мономер для синтеза биоразлагаемых полимеров и сополимеров. Его получение обычно требует вакуума и высокой температуры. Альтернативой мог бы стать прямой газофазный синтез из метилгликолята (МГ). Цель работы — построение модели этого процесса в программе Aspen Plus V14 и оценка влияния рецикла непрореагировавшего МГ. За основу взяты изученные экспериментальные данные процесса [1; 2]. Модель учитывает образование гликолида из МГ, разложение гликолида на CH_2O и CO, а также три последовательные реакции олигомеризации МГ до ди-, три- и тетрамера. В качестве термодинамического пакета для задания бинарных свойств выбран NRTL-RK, недостающие термодинамические данные были рассчитаны с использованием Aspen Plus. Схема процесса приведена ниже (см. рисунок 1). МГ и N_2 смешиваются с рециклом и поступают в испаритель, затем в реакторный блок. Далее продукт очищается, первый сепаратор отделяет жидкий гликолид-сырец при 100 °C, второй выделяет и возвращает МГ при температуре 25 °C обратно в рецикл.

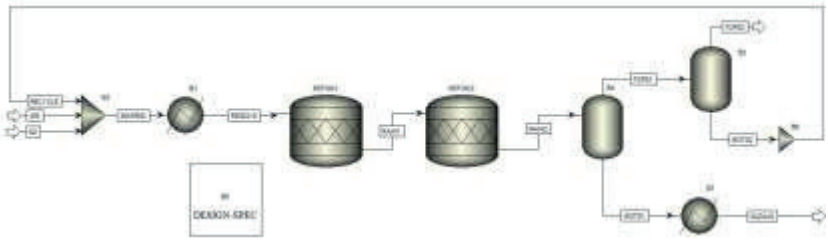


Рисунок 1. Технологическая схема процесса

За счет рецикла непрореагировавшего МГ его содержание в гликолиде-сырце снизилось с 8,5 до 0,4 %, а общий выход гликолида по схеме с рециклом достиг 68 % против 39 % за один проход [2]. Модель показывает реализуемость процесса на практике и может быть использована для его оптимизации.

Список используемой литературы

1. Zhang D. et al. Thermodynamics insights into the gas-phase synthesis of glycolide from methyl glycolate // Chinese Journal of Chemical Engineering. 2025. Vol. 81. P. 171–181.
2. Zhang D. et al. Mechanistic insights into Ti/SiO2-catalyzed gas-phase synthesis of glycolide from methyl glycolate // AIChE Journal. 2026. Vol. 72. e70280.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ВОЛНОВЫМ ДРЕЙФОМ И ПОВЕРХНОСТНЫЙ ЗАХВАТ ПЛАВУЧИХ ЧАСТИЦ

Малков Д.А. [1], ***Боровиков Н.С.*** [1], ***Параскун А.Г.*** [1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, d.malkov1@g.nsu.ru*

[2] *Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск*

При наличии в волновом поле плавающих частиц разной плотности (сорта) каждая испытывает на себе дрейф различной динамики, и со временем сорта расходятся в пространстве — происходит сегрегация (рис.1). Умение предсказывать это разделение важно и для природных процессов (распределение плавучего материала и микропластика), и для лабораторных установок, где с помощью волны пытаются управлять составом взвеси. Настоящая работа устанавливает, при каких условиях возникновение такого разделения возможно, и связывает модельную картину с параметрами реального эксперимента.

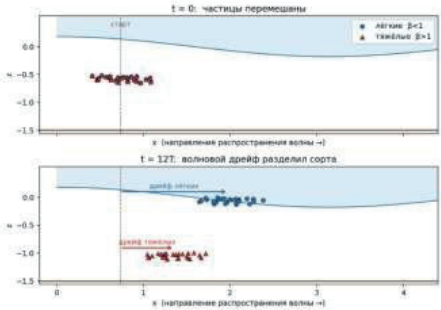


Рисунок 1. Явление сегрегации плавучих частиц в волновом поле

В основе работы заложена потенциальная модель волнового дрейфа: нелинейное волновое поле считается спектральным методом высокого порядка, а движение частиц — по уравнению Макси–Райли с учетом плавучести и инерции. Сегрегация в ней описывается как относительный дрейф двух сортов частиц. Показано, что скорость разделения тем выше, чем круче волна: усиление нелинейности напрямую ускоряет расхождение популяций. Это позволило определить критерий сегрегации — по контрасту плотностей и крутизне волны можно заранее сказать, разделятся ли сорта за разумное время. Работа также рассматривает ограничения данного метода. Потенциальная модель позволяет с высокой точностью задать несущий поверхностный дрейф и его зависимость от нелинейности волны. Но конечный размер частицы, ее частичное всплытие над поверхностью и контакт с линией раздела выходят за рамки точечной теории и требуют расчетов с разрешением частицы — например, методом SPH.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ИОНОВ MN(III) В БИЯДЕРНЫХ ОКСО-КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСАХ: СУПЕРОБМЕННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И АТОМНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ

***Миронов В.А.*[1], *Курамшин Б.К.*[1], *Штырлин В.Г.*[1]**

[1] *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, vmironov0509@gmail.com*

Исследование магнитных свойств комплексов марганца активно развивается с момента получения первых молекулярных магнитов[1]. В литературе предприняты попытки выявить эмпирические корреляции между структурными параметрами оксокластеров марганца и их магнитными свойствами[2], однако квантово-химические расчеты на сегодняшний день носят не универсальный характер[3].

В данной работе были проведены серии расчетов констант магнитных взаимодействий *J* разными методами квантовой химии (BS-DFT, CASDFT, CASSCF/NEVPT2) в семействе биядерных комплексов Mn(III), содержащих фрагмент Mn-O-Mn и два карбоксилатных мостика $[Mn_2(\mu_2\text{-}O)(\mu_2\text{-}RCOO)_2L_n]^z$, с целью разработки универсального подхода для моделирования подобных систем. Было изучено отдельное влияние суперобменных взаимодействий фрагментов Mn-O-Mn и Mn-OCO-Mn, а также рассмотрены механизмы атомной релаксации. Результаты исследования приведены в Таблице 1.

Таблица 1. Результаты моделирования констант магнитного обмена для исследуемых комплексов 1-4.

Комплекс	Основное состояние	Jтеор, $см^{-1}$	Jэксп, $см^{-1}$
1	Нонет	1,46	1,48
2	Синглет	–6,21	–6,8
3	Синглет	–1,12	–0,68
4	Синглет	–0,93	–0,50

Список используемой литературы

1. Sessoli R. et al. High-spin molecules: $[Mn_{12}O_{12}(O_2CR)_{16}(H_2O)_4]$// *J. Am. Chem. Soc,* 1993, 115. 1804.
2. Lee K. H. K. et al. Semiempirical Magnetostructural Correlation for High-Nuclearity MnIII-Oxo Complexes: Accommodation of Different Relative Jahn–Teller Axis Orientations// *Inorg. Chem.,* 2023, 62. 20005.
3. Pantazis, D. A. et al. Theoretical magnetochemistry of dinuclear manganese complexes: broken symmetry density functional theory investigation on the influence of bridging motifs on structure and magnetism//*Dalton Trans.,* 2010, 39 (20). 4959.

БЕСКОНТАКТНЫЙ МОНИТОРИНГ СВЧ-ОТОГРЕВА С ПОМОЩЬЮ ИК-ТЕРМОМЕТРИИ

Смыгалина П.П., Абдулхамидов Ш.Ш.

[1] Национальный исследовательский Томский Государственный университет, Томск, polina.smygalina@stud.tsu.ru

Диагностика обморожений требует оценки глубины повреждения тканей холодом, в том числе по глубинной температуре конечности. Контактные термощупы инвазивны и не позволяют вести непрерывный мониторинг при СВЧ-отогреве. ИК-термометрия бесконтактна, однако измеряет лишь поверхностную температуру, по которой можно спрогнозировать глубинный профиль [1]. Предложен комбинированный метод мониторинга: бесконтактное измерение температуры поверхности ИК-датчиком и теоретическое восстановление глубинной температуры решением уравнения теплопроводности с СВЧ-источником. Эксперимент проводился на фантоме ноги с гелевым заполнением, имитирующим мышечную ткань. Выполнено пять сеансов СВЧ-нагрева по 5 минут (мощность генератора 15 Вт) [2]. Поверхностная температура измерялась ИК-датчиком непрерывно; внутренняя — погружным термометром после каждого сеанса. На рисунке 1 представлены экспериментально измеренные и рассчетные значения поверхностной и глубинной температур фантома ноги. После 20 минут СВЧ-нагрева расчетная поверхностная температура совпадает с измеренной с погрешностью не более 0,2°C; глубинная — не более 0,33 °C. На начальном этапе (0–10 минут) ошибка до 2 °C.

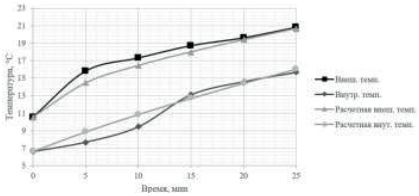


Рисунок 1. Временной профиль внешней и глубинной температур фантома

Существование корреляции позволяет использовать поверхностную термометрию как косвенный контроль глубинного нагрева при СВЧ-терапии и в перспективе исключить инвазивные датчики, но для диагностики обморожений метод пока не применим — для реальной конечности требуется более строгий подход с участием информированных добровольцев.

Список используемой литературы

1. Ахмедов Р.С. Современные подходы к оценке степеней тяжести больных с обморожениями. Медицинские новости. — 2025. — №5. — С. 71–72.
2. Nechaev A.N. et al. Monitoring of the process of microwave heating of frostbite by the IR sensor in the beyond-limit waveguide // Proceedings of SPIE. Tomsk, 2020. P. 115820.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОГЛОЩЕННЫХ ДОЗ ДЛЯ ЗАДАЧ РАДИОЛОГИИ

***Соловьев А.Н.*[1,2], Кизилова Я.В.[1,2], Чернуха А.Е.[1], Бровин А.И.[1], Иванов С.А.[1,2], Печенин А.А.[1], Казаков Е.И.[1], Сабуров В.О.[1], Корякин С.Н.[1]**

[1] Медицинский радиологический научный центр им. А.Ф. Цыба — филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Обнинск, salonf@mrrc.obninsk.ru

[2] Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Обнинск

Активное развитие информационных технологий является, по сути, основополагающим двигателем развития инновационных техник и решений, играющих роль в различных сферах жизни человека. В настоящее время создана и апробирована полноценная программно-аппаратная экосистема, позволяющая решать самый разнообразных спектр задач прикладного назначения (см. Рис. 1). Проект открыт к сотрудничеству со специалистами в данной области.

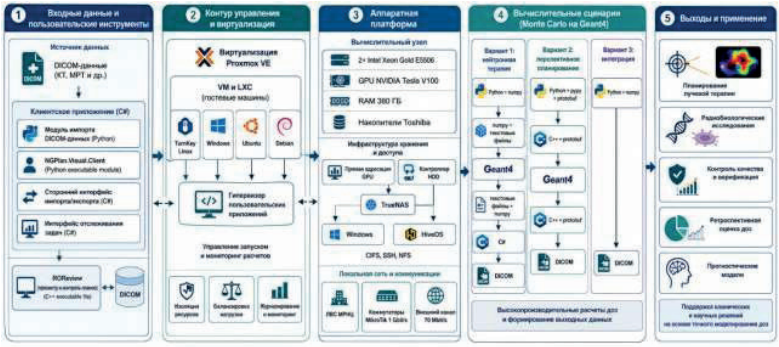


Рисунок 1. Принципиальная структурная схема комплекса

Таким образом, создана наукоемкая платформа, отвечающая большим вызовам медицинского применения радиологических технологий.

Список используемой литературы

1. Соловьев А.Н., Кизилова Я.В., Казаков Е.И., Корякин С.Н. Комплекс программно-вычислительных средств моделирования терапевтических величин поглощенных доз в задачах лучевой терапии // *Russian Technological Journal*, 2025, 13(4). С. 7-24.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕЩЕНИЯ МГНОВЕННОГО ЦЕНТРА ВРАЩЕНИЯ КОЛЕННОГО СУСТАВА ПРИ ФОРМУЛИРОВАНИИ ТРЕБОВАНИЙ К КОМПЕНСИРУЮЩЕМУ МЕХАНИЗМУ ЭКЗОСКЕЛЕТА

***Лонг Трьет Гьянг ХУЫНЬ*[1]**

[1] Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва, giang.huynhlongtriet@stu.edu.vn

Экзоскелеты коленного сустава служат для восстановления двигательной функции нижних конечностей, но ось вращения их шарнира не совпадает с осью биологического сустава. По данным обзора [1], смещение осей порядка 10 мм создает на интерфейсе «устройство–конечность» паразитные силы до 100 Н, травмирующие мягкие ткани. Причина биомеханическая: сочетание качения и скольжения мыщелков бедренной кости смещает мгновенный центр вращения (МЦВ) сустава по мере сгибания [2]. Жесткое звено экзоскелета образует с конечностью замкнутый контур с избыточными связями, поэтому паразитные силы возникают при любой начальной настройке. Использована плоская сагиттальная четырехзвенная модель перекрестных связок [2]: связки приняты нерастяжимыми звеньями, ротация в горизонтальной плоскости не учитывается, размеры звеньев приняты по [источник]. Из уравнений замкнутого контура получено выражение для длины адаптивного звена L(θ) — расстояния между МЦВ сустава и механическим центром экзоскелета O_2 (рисунок 1); положение O_2 задается как параметр компоновки. Расчет выполнен для углов сгибания θ от 0 до 90°.

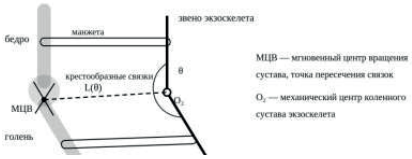


Рисунок 1. Схема определения длины адаптивного звена L(θ)

Расчет показывает, что L(θ) не постоянна в рабочем диапазоне сгибания. Отсюда следует, что кинематически совместимое устройство должно содержать дополнительную поступательную степень свободы; при ее направлении вдоль линии, соединяющей O_2 и МЦВ, требуемый рабочий ход определяется размахом функции L(θ). При отсутствии такой степени свободы разность длин компенсируется деформацией мягких тканей и податливостью манжет, что и создает паразитную нагрузку.

Список использованной литературы

1. Näf M. B., Junius K., Rossini M. и др. Misalignment compensation for full human-exoskeleton kinematic compatibility // Applied Mechanics Reviews, 2018, Т. 70, № 5. 050802.
2. Goodfellow J., O'Connor J. The mechanics of the knee and prosthesis design // The Journal of Bone and Joint Surgery, 1978, Т. 60-B, № 3. С. 358–369.

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТАЦИИ И ПРОТОННОГО ТРАНСПОРТА В ДОПИРОВАННЫХ ЦЕРИЕМ И ИТТРИЕМ ФЕРРИТАХ БАРИЯ

***Гробовой И.С.*, Сунцов А.Ю.**

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург,
i.grobovoy@mail.com

Сложные оксиды с тройной проводимостью рассматриваются в качестве катодных материалов для топливных элементов с керамической протонпроподящей мембраной (ПП-ТОТЭ). Одним из таких соединений является феррит бария $BaFeO_{3-\delta}$, однако его кубическая структура неустойчива при рабочих температурах. Частичное замещение железа церием и/или иттрием стабилизирует кубическую фазу [1] и может влиять на гидратацию, что определяет концентрацию протонов и, соответственно, функциональные свойства.

В рамках теории функционала плотности (DFT) исследована гидратация и миграция протонов в $BaFe_{1-x-y}Ce_xY_yO_{3-\delta}$ для (x,y) = (0,0); (0.11,0); (0,0.11) и (0.11,0.11). Стартовые структурные параметры взяты из дифракционных данных [1]. Энтальпии гидратации (ΔH_{hydr}) вычислены через полные энергии суперъячеек с протонным дефектом, кислородной вакансией, бездефектной ячейки и молекулы воды. Рассмотрены различные варианты катионного окружения: Fe–OH–Fe, Fe–OH–Ce, Fe–OH–Y и Ce–OH–Y. Установлено, что допирование термодинамически благоприятствует гидратации: энтальпия в конфигурациях Fe–OH–Ce и Fe–OH–Y ниже, чем в незамещенном $BaFeO_{3-\delta}$. Выявлено, что при структурной релаксации протон значительно смещается относительно исходного положения, образуя водородную связь со вторым ближайшим атомом кислорода. Величина ΔH_{hydr} коррелирует с длиной этой связи, что указывает на роль локальной геометрии. Методом NEB рассчитаны барьеры миграции протонов. Показано, что перескоки вдоль ребер кислород-координирующих полиэдров энергетически выгоднее прямого перехода через междоузлие.

Полученные результаты свидетельствуют, что допированные церием и иттрием ферриты бария являются перспективными материалами для ПП-ТОТЭ. Выявленная связь между термодинамикой гидратации и локальными искажениями кристаллической решетки может быть использована при химическом дизайне протонпроводящих оксидов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00917).

Список используемой литературы

1. Khodimchuk, A.V., et al. Oxygen exchange kinetics of $BaFeO_{3-\delta}$ modified with Ce and/or Y: oxygen isotope exchange and pressure relaxation // Applied Surface Science. 2026. №. 717. С. 164823.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ


ФИЦ ХФ РАН

СОДЕРЖАНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ.....6

Ягофаров М.И., Соломонов Б.Н.
ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ГИББСА (ΔG = ΔH — TΔS) ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ 6

Молчанов В.С., Хао У., Филиппова О.Е.
ЭВОЛЮЦИЯ САМОСОБИРАЮЩИХСЯ СЕТЧАТЫХ СТРУКТУР И ПЕРФОРИРОВАННЫХ ВЕЗИКУЛ В ВОДНОЙ СРЕДЕ 7

Холявка М.Г.
ОТ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРОГНОЗА К ЭФФЕКТИВНОМУ БИОКАТАЛИЗАТОРУ. ИММОБИЛИЗАЦИЯ ФЕРМЕНТОВ: ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ 8

Хренова М.Г.
МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ФИЗИЧЕСКИ ОБОСНОВАННЫЕ МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ПРОЦЕССОВ В БИОМАКРОМОЛЕКУЛАХ 9

Павлов А.А.
ХЕМОИНФОРМАТИКА:
ТЕКУЩИЕ ВЫЗОВЫ И ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ 10

СЕКЦИЯ «МАТЕРИАЛЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ» 11

Тюбаева П.М., Ольхов А.А., Попов А.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ЖЕСТКОЙ И МОБИЛЬНОЙ АМОРФНОЙ ФРАКЦИЙ В ФОРМИРОВАНИИ СВОЙСТВ ПОЛУКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛИГИДРОКСИАЛКАНОАТОВ.....11

Миргазиева Э.Р., Зиганшин М.А.
КИНЕТИЧЕСКИЙ АСПЕКТ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ ЛИНЕЙНЫХ ДИПЕПТИДОВ: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ДИПЕПТИДА НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ 12

Кравчинский Д.М., Карцева М.Е.,
Бычкова К.С., Плужникова М.Е., Ларкина Е.А.
ПЛАЗМОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА/ХЛОРИН Е6: МОРФОЛОГИЯ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 13

Делич М., Ванчугова Л.В., Горшкова М.Ю., Кусков А.Н.
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ПОЛИСАХАРИДА
НА СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ИХ ОСНОВЕ 14

Бадюков В.А., Левшуков А.А., Гульник М.И., Костюк С.В.
ФОТОКОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ
АКРИЛАТНЫХ МОНОМЕРОВ, ИНИЦИИРУЕМАЯ КОМПЛЕКСАМИ
С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА 15

Романов Н.К, Дроздов А.С.
ПОЛУЧЕНИЕ МАГНИТНОГО НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ
ВЫСОКОДИСПЕРСНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ — ЭКОЛОГИЧНОГО
СОРБЕНТА КОБАЛЬТА ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД 16

Гильмиева Д.Р., Захарова Д.В., Гаянов Р.И., Визгалов В.А., Морозова С.М.
РАЗРАБОТКА КЛЕЕВЫХ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ СШИТОЙ
ИЛИ ЛИНЕЙНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ
ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ
С ТВЕРДЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ NASICON LATP 18

Атаманова А.А., Дмитряков П.В., Седуш Н.Г.
ВЛИЯНИЕ СУБСАЛИЦИЛАТА ВИСМУТА НА КИНЕТИКУ
ПОЛИМЕРИЗАЦИИ С РАСКРЫТИЕМ ЦИКЛА D,L-ЛАКТИДА
И СВОЙСТВА ПОЛИ(D,L-ЛАКТИДА) 19

Бадикова А.Г., Жучкова В.И., Ефимова А.А.,
Фомин Е.О., Синицын А.П., Ярославов А.А.
КОМПЛЕКСЫ ЧАСТИЦ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С КАТИОННЫМИ ПОЛИМЕРАМИ 20

Пешкина Е.А., Князев Н.В., Ступников А.А.,
Дмитряков П.В., Малахов С.Н., Крупнин А.Е., Кузнецов Н.М.
ПОЛУЧЕНИЕ РЕНТГЕНОКОНТРАСТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ
ТЕРМОПЛАСТИЧНОГО ПОЛИУРЕТАНА И НАНОЧАСТИЦ $BASO_4$ 21

Тунгусов Д.С., Торопцева А.В., Иванов А.М., Золотцев В.А., Бычкова А.В.
ПРИМЕНЕНИЕ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ
ОЦЕНКИ ГИДРОФОБНЫХ ЛИГАНДОВ В СОСТАВЕ ГИБРИДНЫХ
ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСИСТЕМ 22

Ермакова К.Е., Гулина Л.Б.
СИНТЕЗ МИКРОСВИТКОВ AG-CEO_2 С УЧАСТИЕМ РЕАКЦИЙ
КОНТРОЛИРУЕМОГО ГИДРОЛИЗА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА
ФАЗ ВОДНЫЙ РАСТВОР СОЛЕЙ-ВОЗДУХ И ИССЛЕДОВАНИЕ
ИХ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ 23

Кытина Е.В.
ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ И ОТЖИГА
НА СПИНОВЫЕ ЦЕНТРЫ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ
АНОДНОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ 24

Сторожук А.П., Молчанов В.С., Филиппова О.Е.
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ АЛЬГИНАТА
НАТРИЯ С ВНЕДРЕННОЙ СЕТКОЙ НАНОТРУБОК ГАЛЛУАЗИТА 25

Сафронова В.А., Моногаров К.А., Пивкина А.Н.
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ
НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНВИНИЛАЦЕТАТА
И ПЕРХЛОРАТА АММОНИЯ 26

Пущин О.Д, Путис С.М.
РАЗРАБОТКА НОВЫХ ГАЗОГЕНЕРИРУЮЩИХ
МАЛОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИЙ 27

Аристархов Л.К., Моногаров К.А.,
Назарова А.А., Сафронова В.А., Пивкина А.Н.
АЛЮМИНИЗИРОВАННЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИЦИИ
НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНВИНИЛАЦЕТАТА ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ 28

Гирина С.А., Шаповалова О.В., Иншаков Е.А.,
Рабчинский М.К., Шиянова К.А.
ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ
УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНАГРЕВА 29

Ромазева К.А., Пугачева Е.В., Борщ В.Н.
РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОГО
КАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА
FECONICU МЕТОДОМ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА 30

Петелина Е.А., Рамонова А.А., Багров Д.В.
ОЦЕНКА ОСТАТОЧНОГО ЗАРЯДА ЭЛЕКТРОФОРМОВАННЫХ
НЕЙЛОНОВЫХ МЕМБРАН МЕТОДОМ АДСОРБЦИИ
ЗАРЯЖЕННЫХ КРАСИТЕЛЕЙ 31

Шешковас А.Ж., Веселовская Ж.В.,
Люлюкин М.Н., Селищев Д.С., Козлов Д.В.
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ
СОРБЕНТОВ CO_2 НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА
С ПРИМЕНЕНИЕМ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ДОБАВОК 32

Рохманка Т.Н., Грушевенко Е.А.,
Атласов В.Р., Голубев Г.С., Дементьев К.И.
НОВЫЕ ГАЗОРАЗДЕЛИТЕЛЬНЫЕ ПОЛИСИЛОКСАНОВЫЕ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ПОЛИЭТИЛЕНА 33

Бибик К.В., Супрун Е.В.
ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТ КОБАЛЬТА: ЭЛЕКТРОСИНТЕЗ — РАЗМЕР КРИСТАЛЛОВ — ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗ ОКИСЛЕНИЯ КОРОТКИХ ПЕПТИДОВ 34

Азаров К.В., Богдан Т.В., Мащенко Н.В., Богородский С.Э., Богдан В.И.
УЛЬТРАЗВУКОВАЯ АКТИВАЦИЯ $CASN(OH)_6$ 35

Быстревский И.Д., Храпова Е.К., Уголков В.Л., Альмяшева О.В.
ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК КОБАЛЬТА НА СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ГИДРОСИЛИКАТА НИКЕЛЯ ПРИ НАГРЕВАНИИ 36

Лукьянов П.С., Богдан Т.В., Мащенко Н.В., Равчеев Ф. М., Богдан В.И.
ФИЗИКОХИМИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАННАТОВ КАДМИЯ СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ СООСАЖДЕНИЯ 37

Щукина А.А., Шитов В.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОЧАСТИЦ $YB,ER:YSR_3(PO_4)$, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ 38

Аксентьева Е.Г., Цыганкова Д.И.,
Синельщикова О.Ю., Деркачева Е.С.
ВЛИЯНИЕ СРЕДНЕГО РАЗМЕРА ЩЕЛОЧНОГО КАТИОНА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $K_{2-X}RB_XZN_3(P_2O_7)_2$ 39

Гатина Э.Н., Осминина А.А., Жидоморова К.А.
ТИТАНСОДЕРЖАЩИЕ ГИДРОСИЛИКАТНЫЕ НАНОТРУБКИ: СИНТЕЗ, ЗАПОЛНЕНИЕ И ФОТОКАТАЛИЗ 40

Прокопович К.В., Бурмистров И.Н.
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА 41

Стамер К.С., Казарян П.С., Зефиров В.В.3 Галлямов М.О.
СКОЛЬЗКИЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И ПОЛИМЕТИЛГИДРОСИЛОКСАНА С ЗАЩИТОЙ ОТ БИОПЛЕНОК ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ 42

Цыганкова Д.И., Синельщикова О.Ю., Тумаркин А.В., Тюрнина Н.Г., Тюрнина З.Г.
ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ $BaTiO_3$
ОТ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА 44

Аглиулин К.В., Степанов А.В., Заякин И.А., Яровенко В.Н.,
Краюшкин М.М., Третьяков Е.В., Насырова Д.И., Айт А.О.
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 3-АЦИЛ-2-ТИЕНИЛХРОМОНОВ
С ПАРАМАГНИТНЫМИ ГРУППАМИ 45

Игнатьева П.К., Гатин А.К., Гришин М.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ЕДИНИЧНЫХ
НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ ПРОПИТКИ И ЛЭД 46

Болдакина И.А., Хомякова П.С., Неструева Т.И.,
Васильев Е.С., Бутковская Н.И., Морозов И.И.
КИНЕТИКА РЕАКЦИИ АТОМАРНОГО ФТОРА С ЭТИЛБЕНЗОЛОМ 47

Хакимов Т.А., Лесников В.К.
N-АМИНО МОДИФИЦИРОВАННЫЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ
ПОЛИАМИНЫ: ПУТИ СИНТЕЗА И СВОЙСТВА 48

Белов К.В., Мололина А.А., Ожогин И.В., Пугачев А.Д., Кая С., Ходов И.А.
КИНЕТИКА ИЗОМЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ БРОМЗАМЕЩЕННЫХ
ПРОИЗВОДНЫХ СПИРОПИРАНОВ: ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДОМ ЯМР 49

Тимакова С.И., Арабова З.М.
ФОРМИРОВАНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ ИОНОВ ЛЕТУЧИХ
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В МЕТОДЕ ИОНИЗАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ
ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМОЙ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ 51

Андрюшков С.А., Никитин А.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТОМЕХАНИЧЕСКОГО
ВОЗДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ НА РАЗРУШЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ
СВЯЗЕЙ В КОМПЛЕКСЕ БИОТИН-СТРЕПТАВИДИН 52

Нерсесян Э.С., Клименко И.В., Лобанов А.В.
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ АНСАМБЛИ ПРОИЗВОДНЫХ
ТЕТРАПИРРОЛА И B-ЦИКЛОДЕКСТРИНА 53

Волосников М.И., Сопова Н.С., Боченков В.Е.
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНИЦИИРОВАНИЯ
ПЛАЗМОН-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ
АКРИЛАМИДА НА ЗОЛОТЫХ ПЕРФОРИРОВАННЫХ НАНОПЛЕНКАХ. 54

Лисюкова А.А., Зимина А.М., Третьяков Е.В.
ЙОД-ЗАМЕЩЕННЫЕ ВАНАДИЛПОРФИРИНЫ
КАК ОСНОВА НОВЫХ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ 55

Куницына Е.И., Моргунов Р.Б.
МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО МАГНИТА В ОКРУЖЕНИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК 56

Шевердина К.М., Головешкин А.С., Голубь А.С.
МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ НАНОЗИМ С ПЕРОКСИДАЗОПОДОБНОЙ И ФОТОТЕРМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ НА ОСНОВЕ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА И ГИДРОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА 57

Фомин К.О., Тупицын И.М., Маврешко Е.И., Фроня А.А., Завестовская И.Н.
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЛАЗЕРНО-СИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ ВИСМУТА 58

Сопова Н.С., Боченков В.Е.
УСТАНОВЛЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПЛАЗМОН-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛАМИДА НА ЗОЛОТЫХ НАНОСТЕРЖНЯХ 59

Судаков В.С.
МАГНИТНАЯ НАНОЖИДКОСТЬ FE_3O_4 В ПАССИВНОЙ СИСТЕМЕ ОХЛАЖДЕНИЯ, ОСНОВАННОЙ НА ТЕРМООСМОТИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ 60

Клачек М.А., Хорецкий М.С., Мартьянов Н.А., Никишев П.А.
МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИ-В-ПИНЕНА МЕТОДОМ ФОТОИНИЦИИРУЕМОГО ГИДРОТИОЛИРОВАНИЯ 61

Котов Н.О., Мельников И.Н., Пивкина А.Н.
КИНЕТИКА ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ, 4-ДИАМИНОФУРАЗАНА ПО ДАННЫМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ 62

Тит Е.С., Василенко И.В., Гапоник Л.В., Костюк С.В., Никишев П.А.
СИНТЕЗ ЦВИТТЕР-ИОННЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ С СУЛЬФОБЕТАИНОВЫМИ ГРУППАМИ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ, ГЕКСАМЕТИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И ГЕКСАМЕТИЛЕНДИАМИНА 63

Есаев М.А., Киселева А.А, Шиман Д.И., Костюк С.В.
ИНКАПСУЛЯЦИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА МЕТОДОМ ДИСПЕРСИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ 64

Ланкина Ю.И., Ксендзов Е.А., Никишев П.А., Костюк С.В., Кирилэ Т.Ю., Филиппов А.П.
ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ГРАФТ-СОПОЛИМЕРЫ ПОЛУЧЕННЫЕ ИЗ МАКРОМОНОМЕРОВ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ 65

Дараган И.В.; Голышева А.Н.; Колыхалов Д.А.
ЗЕЛЕНЫЙ СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ФУРАНОВЫХ ПОЛИМЕРОВ И ИХ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ 66

Киселева А.А., Есаев М.А., Шиман Д.И., Костюк С.В.
МОДИФИКАЦИЯ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ МИКРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА) КАТЕХОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ МЕТОДОМ КАРБОДИИМИДНОЙ РЕАКЦИИ 67

Матвиенко В.Д., Никифоров А.А., Коржикова-Влах Е.Г.
СИНТЕЗ И ПОСТПОЛИМЕРИЗАЦИОННАЯ МОДИФИКАЦИЯ ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ СОПОЛИМЕРОВ D,L-ЛАКТИДА 68

Смыковская Р.С., Юрков В. Г., Кузнецова О.П., Роговина С.З.
ИССЛЕДОВАНИЕ БИОДЕСТРУКЦИИ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И НАТУРАЛЬНОГО КАУЧУКА 69

Ершов А.А., Тарасов А.Е., Грищук А.А., Подвальная Ю.В., Вечкутова А.В., Бадамшина Э.Р.
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТЕПЕНИ РАЗВЕТВЛЕНИЯ ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА, ПОЛУЧЕННОГО АНИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ 70

Лунева О.В., Сивцов Е.В., Ибрагимова В.О., Багрий И.В., Нащекина Ю.А., Осетров К.О. , Коржикова-Влах Е.Г.
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИ (N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА) И ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ 71

Гасымов М.М., Ерина Н.А., Роговина С.З., Кузнецова О.П.
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВУЛКАНИЗАЦИИ ЭЛАСТОМЕРНОЙ ФАЗЫ НА МОРФОЛОГИЮ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИЛАКТИДА С НАТУРАЛЬНЫМ КАУЧУКОМ 72

Паршина А.Э., Коржикова-Влах Е.Г.
ПОЛУЧЕНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ И СШИТЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСИЭТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ 73

Горина У. И.; Захарова Д.В.; Морозова С. М.
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ НА ИОННУЮ ПРОВОДИМОСТЬ СШИТЫХ ТВЕРДЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИУРЕТАНОВОЙ СИСТЕМЫ 74

Иванов П.Л., Попырина Т.Н., Демина Т.С.
ВЛИЯНИЕ МЕТОДА СУШКИ НА МОРФОЛОГИЮ
И СВОЙСТВА ГЕЛЕЙ ИЗ АЛЬГИНАТА 75

Юдина Л.Д., Богдан Н.С., Бабанова Т.А.
СИНТЕЗ АМФИФИЛЬНОГО БЛОК-СОПОЛИМЕРА
P(IB-B-NIPAM) МЕТОДОМ RAFT-ПОЛИМЕРИЗАЦИИ 76

Тышкевич А.А., Чернышева Ю.А., Тимофеева Л.М.
ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОЛОГИИ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ
ПРОТОНИРОВАННЫХ ДИАЛЛИЛАММОНИЕВЫХ МОНОМЕРОВ ДЛЯ
ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ С НЕБОЛЬШОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССОЙ 77

Огай В.А., Репина А.А., Сиротин М. А., Иноземцева А.И.
ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕЗИРОВАННОЙ СОЛИ NATOP
ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ 78

Лобинский А.А., Кодинцев И.А., Канева М.В.,
Левшакова А.С., Хайруллина Е.М.
ФОРМИРОВАНИЕ, МОРФОЛОГИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР CUO, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ
ИОННОГО НАСЛАИВАНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ НИКЕЛЕВОЙ ПЕНЫ 79

Шиянова К.А., Торкунов М.К., Рывкина Н.Г., Гулин А.А., Мельников В.П.
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ
КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОМАТЕРИАЛАМИ 80

Назарова А.А., Моногаров К.А., Пивкина А.Н.
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ
МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО НАПЛАВЛЕНИЯ 81

Лясников К.О., Чернышова О.В.
СИНТЕЗ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКОГО
ИЗОПРОПОКСИДА ТИТАНА-НЕОДИМА 82

Глущенков А.В., Киселев А.В., Гусев А.В.,
Маилян К.А., Косицын С.А., Суров Д.И.
СВОБОДНЫЕ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ
ПОЛИ-ХЛОР-ПАРА-КСИЛИЛЕНА КАК ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ
МАТЕРИАЛ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ СВЧ-ПОЛЕЙ 83

Наземутдинова В.Р., Моронцев А.А., Ильин С.О.,
Ильина С.О., Возняк А.И., Бермешев М.В.
БАЗОВОЕ МАСЛО НА ОСНОВЕ ГИДРИРОВАННЫХ
ОЛИГОМЕРОВ 5-Н-АЛКИЛ-2-НОРБОРНЕНОВ 84

Гончарова К.Е., Кузнецов В.В., Хавпачев М.А., Акопова Т.А.
МОДИФИЦИРОВАНИЕ ХИТОЗАНА ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТОЙ
МЕТОДОМ БЕЗРАСТВОРНОЙ РЕАКЦИОННОЙ ЭКСТРУЗИИ 85

Преображенский И.И., Золотцев А.В.,
Овчаров А.В., Лукьянов П.А., Шавкин С.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЛУЖЕНИЯ ВТСП-ЛЕНТ ЭВТЕКТИЧЕСКИМ
СПЛАВОМ PB-SN С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАЛОАКТИВНЫХ ФЛЮСОВ 86

Русев Н.А., Голик А.Б., Татов А.В., Серов А.М., Андиралов А.Ю.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ НАНОРАЗМЕРНОГО
СЕЛЕНА, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ЦИТРУСОВЫМ ПЕКТИНОМ,
ПРИ РАЗНЫХ ПОКАЗАТЕЛЯХ ИОННОЙ СИЛЫ СРЕДЫ 87

Степанянц В.Р., Моронцев А.А., Бермешев М.В.
ДЕПРЕССОРНАЯ ПРИСАДКА ДЛЯ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА
НА ОСНОВЕ ГИДРИРОВАННЫХ СОПОЛИМЕРОВ ЦИКЛООКТЕНА
И АЦЕТОКСИЦИКЛООКТЕНА 89

Малинина И.А., Кургузкина М.Е., Беспрозванных Н.В., Деркачева Е.С.
СИНТЕЗ СЛОЖНЫХ ОКСИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
СО СТРУКТУРОЙ ЭВКСЕНИТА РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ 90

Манжиков М.А., Новиков К.С.
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ИСХОДНОЙ БИОМАССЫ
НА ТЕРМИЧЕСКОЕ РАСТВОРЕНИЕ ПРОДУКТОВ
ГИДРОТЕРМАЛЬНОЙ КАРБОНИЗАЦИИ И ТОРРЕФИКАЦИИ 91

Боровой Г.С., Левшуков А.А., Костюк С.В.
СИНТЕЗ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕМ МЕХАНИЗМА
С КАТИОННОЙ НА РАДИКАЛЬНУЮ RAFT ПОЛИМЕРИЗАЦИЮ 92

Бочаров Н.М., Блинов А.В., Попова А.Ю., Тюппеева С.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА
ВИСМУТА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ АЛЬГИНАТОМ НАТРИЯ 93

Терехина У.А., Горшенков М.В., Нечаев К.С.
СТАБИЛИЗАЦИЯ ФЕРРОМАГНИТНОЙ Т-ФАЗЫ
СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА MNAL
ПУТЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ МЕДЬЮ 94

Романов Н.К., Дроздов А.С.
ПОЛУЧЕНИЕ МАГНИТНОГО НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ
ВЫСОКОДИСПЕРСНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ — ЭКОЛОГИЧНОГО
СОРБЕНТА КОБАЛЬТА ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД 95

Жудрик А.Д., Березянко И.А., Василенко И.В., Костюк С.В.
НАНЕСЕННЫЕ НА СИЛИКАГЕЛЬ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ
В КАЧЕСТВЕ РЕГЕНЕРИРУЕМЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ
ДЛЯ СИНТЕЗА РЕАКЦИОННОСПОСОБНОГО ПОЛИИЗОБУТИЛЕНА 96

Букичев Ю.С., Джардималиева Г.И.
ПОЛИИМИДНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ, АРМИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦАМИ
TIO ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ 97

Шершнева И.Н., Букичев Ю.С., Джардималиева Г.И.
ВЛИЯНИЕ ЧИСТОТЫ МОНОМЕРА И КОНЦЕНТРАЦИИ
КАТАЛИЗАТОРА ПЕРЕЭТЕРИФИКАЦИИ НА СВОЙСТВА
ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ ВИТРИМЕРНОГО ТИПА 98

Орел Е.А., Дзеранов А.А., Букичев Ю. С., Джардималиева Г.И.
ГОМО- И ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ CU/NI МОКП
С 2-АМИНОБЕНЗОЛ-,4-ДИКАРБОКСИЛАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ:
ВЛИЯНИЕ НИКЕЛЯ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА 99

Соборнова В.В., Белов К.В., Дышин А.А.,
Толстой П.М., Муллоярова В.В., Киселев М.Г., Ходов И.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И СОРБЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ АЭРОГЕЛЕЙ НКЦ, ИМПРЕГНИРОВАННЫХ
ФАМАТАМИ, МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА 100

Ульянов И.В., Рыбкин А.Ю., Козлов А.В., Курмаз С.В.
НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ ФТАЛОЦИАНИНА МАРГАНЦА
НА ОСНОВЕ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ (СО)ПОЛИМЕРОВ
N-ИЗОПРОПИЛАКРИЛАМИДА РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ 101

Киселев А.В., Глущенков А.В., Гусев А.В.,
Косицын С.А., Суров Д.И., Набоко А.С.
ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ МАГНИТНОГО МАТЕРИАЛА
НА ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛИ-ХЛОР-ПАРА-КСИЛИЛЕНОВОГО
ПОКРЫТИЯ ПРИ CVD-ИНКАПСУЛИРОВАНИИ 102

Блинов А.В., Попова А.Ю., Бочаров Н.М., Горчаков Э.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ
ОКСИДА МАРГАНЦА, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО
ГЕМИЦЕЛЛЮЛОЗОЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПОКАЗАТЕЛЯХ РН СРЕДЫ 103

Калугина Д.С., Матвеев А.Т., Штанский Д.В.
МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ
ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ $KNbO_3$ 104

Проценко Е.Л., Репина А.А., Иноземцева А.И.
ВЛИЯНИЕ ДОБАВЛЕНИЯ ЭФИРА 15-КРАУН-5
НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОЛИТОВ
НА ОСНОВЕ БИС(ОКСАЛАТО)БОРАТА НАТРИЯ
ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ.....105

Загороднова А.С., Соловьев М.В., Васильев В.П.,
Кравченко О.В., Шиховцев А.В., Добровольский Ю.А.
СИНТЕЗ И ТЕРМИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ
КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ БОРГИДРИДА
ЛИТИЯ С МОЧЕВИНОЙ 106

Грибалева Е.Д., Гурьянов К.Е., Лесных А.А., Елисеев А.А.
МЕМБРАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ОКСИДА
ГРАФЕНА С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ШИРИНОЙ НАНОЩЕЛИ.....107

Теплова А.А., Беломестных И.А., Лесных А.А., Елисеев А.А.
ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ МЕМБРАННЫХ МАТЕРИАЛОВ
НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ ТИТАНА 108

Логинов Е.Д., Муратов Д.Г., Телегина Л.Н. Сименел А.А.
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ 1-(КАРБОКСИМЕТИЛ)-1'-
(1-ГИДРОКСИЭТИЛ)ФЕРРОЦЕНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ.....109

Соловьева Н.А., Беломестных И.А., Елисеев А.А.,
ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОМПОЗИЦИОННЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОЛЫХ
ПОЛИПРОПИЛЕНОВЫХ ВОЛОКОН.....110

Дмитриев М.В., Зубачева Е.К.
РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ СОКРИСТАЛЛОВ
ЭНЕРГОЕМКИХ И ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
С ПОМОЩЬЮ СУБЛИМАЦИИ 111

Ануфриева Г.Б., Корсакова А.В., Терешко А.Е.
СТАБИЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ ПОЛИВИНИЛОВЫМ
СПИРТОМ В РАМКАХ СИНТЕЗА МЕТОДОМ СООСАЖДЕНИЯ.....112

Амбарцумян А.Д., Махин М.Н.
НЕГАТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ АМИННОГО КАТАЛИЗА
ПРИ СИНТЕЗЕ ЭПОКСИАКРИЛАТНЫХ СМОЛ.....113

Ан Д.А., Богданова Д.Н., Львов В.А., Захарова В.А., Айдемир Т.
ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И СВОЙСТВ БИОАКТИВНЫХ
ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА ДЛЯ IN SITU ПЕЧАТИ 114

Балацкий Д.В., Будникова Ю.Б., Арефьева О.Д., Пономарева М.С.
ОЦЕНКА ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ МЕТАЛЛОВ ИЗ ПЛЕНОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ TI/TIO_2-SIO_2-$ZNFE_2O_4$ ПОСЛЕ ФОТОДЕГРАДАЦИИ ИНДИГОКАРМИНА 115

Букулова Л.М.
РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ РЕСУРСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕПЛОВЫДЕЛЯЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ КОНТУРОВ С СКД ТЕПЛОНОСИТЕЛЕМ 116

Варгасова С.В., Саражинский Д.С., Терешко А.Е.
ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПАВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ ФОСФАТА ЦИНКА 117

Гапич В.Ю., Деккер П.И., Кузнецова П.Д., Муханова Е.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ЛЕГИРОВАННОГО ЛАНТАНОИДАМИ ШЕЕЛИТА В РЕЗУЛЬТАТЕ АКУСТОФЛЮИДНОГО СИНТЕЗА 118

Герцен М.М.
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛОВ КАК СОРБЕНТОВ НЕФТИ И НЕФТЕПРОДУКТОВ 119

Гробовой И.С., Сунцов А.Ю., Кожевников В.Л.
ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫЕ ОКСИДЫ КАК ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ НАКОПИТЕЛИ ЭНЕРГИИ: ОТ КОНЦЕПЦИИ К СРАВНИТЕЛЬНОМУ АНАЛИЗУ 2D И 3D ФАЗ 120

Гудкин А.В., Крыгина Д.М., Гостева А.А., Окатова О.В., Сивцов Е.В.
ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ ТЕТРАЗОЛЬНОГО РЯДА 121

Деккер П.И., Гапич В.Ю., Кузнецова П.Д., Муханова Е.А.
ВЛИЯНИЕ ЛАНТАНОИДОВ НА РЕНТГЕНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ АКУСТОФЛЮИДНО-ПОЛУЧЕННОГО ВОЛЬФРАМАТА КАЛЬЦИЯ 122

Исхаков А.Р., Травкина О.С.
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ И ТЕМПЛАТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦЕОЛИТА ZSM-5 123

Колесникова А.В., Апрятина К.В.
РАЗРАБОТКА НАНОНОСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИСАХАРИДОВ ДЛЯ ДОСТАВКИ ГИДРОФОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ 124

Кузина Т.Д., Губский Д.М., Сидор Р.И., Воронько Н.Г.
МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИЙ
РЫБНЫЙ ЖЕЛАТИН–АГАР: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИСАХАРИДА 125

Кунда Дж., Ахмадуллин Р.М., Закиров Р.К.,
Ахмадуллина Ф.Ю., Литвинова И.Н.
ПРИМЕНЕНИЕ РЕГЕНЕРИРОВАННОГО БРОМИДА
НАТРИЯ В СИНТЕЗЕ АЛКИЛБРОМИДОВ 126

Курилов Д.А.
БИОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ
ИММОБИЛИЗОВАННОЙ МЕТАНМОНООКСИГЕНАЗЫ
ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО УЛАВЛИВАНИЯ
МЕТАНА В ГАЗОВЫХ ПОТОКАХ 127

Лай Х.Л., Ахмадуллин Р.М., Ахмадуллина Ф.Ю., Закиров Р.К., Хоанг Х.И.
ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ УДАЛЕНИЯ ТИОСУЛЬФАТА
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ 128

Леонов А.А., Гнеденков А.С., Номеровский А.Д.,
Марченко В.С., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.
КОНТРОЛЬ ДЕГРАДАЦИИ МАГНИЕВОГО СПЛАВА МА8
В ХЛОРИДСОДЕРЖАЩЕЙ СРЕДЕ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ
ОРГАНИЧЕСКИХ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ 129

Марченко В.С., Гнеденков А.С., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.
ГИБРИДНЫЕ ПОКРЫТИЯ С 8-ОКСИХИНОЛИНОМ
ДЛЯ АКТИВНОЙ АНТИКОРРОЗИОННОЙ ЗАЩИТЫ
МАГНИЕВОГО СПЛАВА МА8 130

Михальченко В.А.
ИЗОТОПНО-МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ЛАЗЕРНО-ДИФРАКЦИОННЫЙ
МЕТОД ОЦЕНКИ КИНЕТИКИ РАСТВОРЕНИЯ АКТИВНЫХ
ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ (АФС) И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ 131

Назаров А.Р., Костылева С.А., Травкина О.С., Кутепов Б.И.
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ
НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦЕОЛИТА Y 132

Номеровский А.Д., Гнеденков А.С.,
Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В.
РАЗРАБОТКА И ОПТИМИЗАЦИЯ СПОСОБА ФОРМИРОВАНИЯ
ГИБРИДНЫХ ПОКРЫТИЙ, СОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫЕ ДВОЙНЫЕ
ГИДРОКСИДЫ, НА СПЛАВЕ МА8 133

Пешков Я.А., Барков К.А., Гайворонская Е.И.,
Ситников А.В., Ивков С.А.
МНОГОСЛОЙНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ FE_XSI_{1-X}/AL_2O_3
ДЛЯ СПИНТРОНИКИ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ.....134

Полицимако И.А., Кудашев С.В., Желтобрюхов В.Ф.
ПОЛИУРЕТАНОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПОНИЖЕННОЙ ГОРЮЧЕСТИ,
СОДЕРЖАЩИЕ ФТОРИРОВАННЫЕ АМИНЫ 135

Седегова Т.Ю., Клинков В.А.
ЗАВИСИМОСТЬ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗНЫХ
КОМПОЗИТОВ С $CSPBBR_3$ ОТ ВРЕМЕНИ ПРЕБЫВАНИЯ В ВОДЕ 136

Синяшин К.О., Кушназарова Р.А., Захарова Л.Я.
ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ
АМИНОМЕТИЛФОСФОНОВЫХ ПАВ: САМООРГАНИЗАЦИЯ,
АНТИМИКРОБНАЯ И АНТИКОРРОЗИОННАЯ АКТИВНОСТЬ 137

Сушко Е.С., Кичеева А.Г., Дзеранов А.А.,
Кыдралиева К.А., Кудряшева Н.С.
РОЛЬ ПОВЕРХНОСТНЫХ МОДИФИКАТОРОВ В ТОКСИЧНОСТИ
И ОКИСЛИТЕЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ НАНОЧАСТИЦ
НА ОСНОВЕ ОКСИДА КРЕМНИЯ И ЖЕЛЕЗА.....138

Титов Е.Н., Смальченко Д.Е., Лебедева О.Е.
ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИНТЕЗ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ КРЕМНЕЗЕМОВ
КАК РЕГЕНЕРИРУЕМЫХ СОРБЕНТОВ КАТИОННЫХ КРАСИТЕЛЕЙ.....139

Федосеев Т.В., Богородский С.Э., Богдан Т.В., Богдан В.И.
ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ КАК ИНДИКАТОР
ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ,4-ДИОКСАНА В ПРОТОЧНОМ
ИЗОБАРИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ.....140

Глушкова А.С., Репина А.А., Иноземцева А.И.
НАТРИЙ-ИОННЫЕ АККУМУЛЯТОРЫ С ДВОЙНОЙ
СОЛЬЮ $NAPF_6$/NAOTF В ЭФИРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ
ДЛЯ РАБОТЫ В ШИРОКОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ДИАПАЗОНЕ 141

**СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ БИОЛОГИЯ:
ОТ ХИМИИ И ФИЗИКИ К МЕДИЦИНЕ».....142**

Белик П.А., Мисюрев А.А., Маннинен А.С., Бузыкин А.Г.
АНАЛИЗ МОРФОЛОГИИ МИОБЛАСТОВ С2С12 НА МЕТАЛЛООКСИДНЫХ
ПОВЕРХНОСТЯХ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ.....142

Шульга Е.А., Усов Б.В., Балабанова Л.А., Пентехина Ю.К.
БИОСИНТЕТИЧЕСКИЕ ГЕННЫЕ КЛАСТЕРЫ АНТИМИКРОБНЫХ ПЕПТИДОВ МОРСКОЙ БАКТЕРИИ AQUIMARINA MUELLERI V1SW51 143

Проскуряков Т.А., Гончаров А.О., Свирина Е.А., Шендер В.О.
МОДИФИКАЦИЯ АНАЛИЗА ИНТЕГРАЛЬНОЙ РАСТВОРИМОСТИ ПРОТЕОМА ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ МИШЕНЕЙ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ 144

Гусева Е.А., Мосолова А.А., Белова А.Д., Немец Е.А., Басок Ю.Б.
БИОМИМЕТИКИ ВНЕКЛЕТОЧНОГО МАТРИКСА НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЖЕЛАТИНА: РАЗРАБОТКА И ОЦЕНКА СВОЙСТВ 145

Антипова А.А., Клычникова Е.В., Пеков С.И.
РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ПОИСКА БИОМАРКЕРОВ НЕЙРОТРАВМЫ НА ПЛАТФОРМЕ МАЭСТРО-AMC 146

Сединова В.Н., Небогатиков В.О., Правдивцева Е.С., Орлова Е.А., Чапров К.Д.
ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЙРОПРОТЕКТОРНОЙ АКТИВНОСТИ ПРЕПАРАТА CNEURO-201 ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ТАУ-ПРОТЕИНОПАТИИ 147

Клименко Я.В., Павлюченко И.И., Похотько А.Г., Голанцев А.С., Налбандян Д.А., Васильева М.А.
ОСОБЕННОСТИ БИОХИМИЧЕСКИХ И БИОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОРГАНИЗМА У ЛИЦ, СТРАДАЮЩИХ ПОЛЛИНОЗОМ 148

Алексеева А.И., Андреев Е.А.
НЕИНВАЗИВНЫЙ МОНИТОРИНГ СОСТОЯНИЯ ПАЦИЕНТОВ С МУКОВИСЦИДОЗОМ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОАНАЛИЗА КОНДЕНСАТА ВЫДЫХАЕМОГО АЭРОЗОЛЯ 150

Усатов Н.С., Багдасарян А.А., Киселева В.В., Вишнякова П.А.
СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА БИОСОВМЕСТИМОСТИ РЕЗОРБИРУЕМЫХ СКАФФОЛДОВ НА ОСНОВЕ PLGA И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ В УСЛОВИЯХ IN VITRO 151

Горобец М.Г., Кузнецова А.И., Костанова Е.А., Бирюкова М.И., Котиков В.В., Шалупов А.И., Бычкова А.В.
ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА НА КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛЬБУМИНА МЕТОДОМ БРЭДФОРДА 152

Новикова В.О., Руина К.С., Матвеева Л.М.,
Чичева М.М., Покидова О.В., Санина Н.А.
РАНОЗАЖИВЛЯЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ МАЗИ
С ТИОСУЛЬФАТНЫМ ТЕТРАНИТРОЗИЛЬНЫМ
КОМПЛЕКСОМ ЖЕЛЕЗА.....153

Можаева В.А., Уткин Ю.Н.
АНАЛИЗ СМЕСЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ЗМЕИНЫЕ ЯДЫ,
МЕТОДОМ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.....154

Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Зеленихин П.В., Стойков И.И.
ДИЗАЙН И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ
КОМБИНИРОВАННЫХ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ СИСТЕМ
НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ.....155

Гаврюшина М.С., Гудкова В.Р.,
Ширшин Е.А., Урусова Л.С., Пачуашвили Н.В.
ФИЗИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ НАТИВНОГО
И ВЫДЕЛЕННОГО КОЛЛОИДА ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЫ.....156

Соколова Е.М., Психа Б.Л., Нешев Н.И.
КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОКСИДАТИВНОГО
ГЕМОЛИЗА ЭРИТРОЦИТОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РАДИКАЛЬНЫХ
ИНИЦИАТОРОВ И АНТИРАДИКАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ
ПЕРОКСИДНОГО ОКИСЛЕНИЯ ЛИПИДОВ.....157

Кривошей А.В., Мухаметова Л.И., Вржещ П.В., Еремин С.А.
НПВП КАК ИНГИБИТОРЫ ПРОСТАГЛАНДИН-Н-СИНТАЗЫ:
ОСНОВНЫЕ МЕТОДЫ ДЕТЕКЦИИ И КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.....158

Соколов С.С., Егорова К.С., Калганова Н.В., Черепанов И.А.
4-А-ГАЛОГЕНАЦИЛСИДНОНЫ: СИНТЕЗ
И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ.....159

Аристов А.Е., Астафьев А.А.
ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ
ТОНКИХ ПЛЕНОК БЕЛКА ЛИЗОЦИМА.....160

Афанасьев Я.В., Горбунова И. А., Никонова Е.Е.,
Можеров А.М., Кузнецова Д.С., Щеславский В.И.,
Ширманова М.В., Ширшин Е.А., Тимашев П.С.
ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРХБЫСТРОГО ДЕТЕКТОРА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕЦИФИЧНОСТИ ВРЕМЯ-РАЗРЕШЕННОГО
ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БИОИМИДЖИНГА.....161

Квасов Е.В., Горбунова И.А., Белтюков Я.М., Сасин М.Е., Якимов Б.П., Перминова И.В., Тимашев П.С., Ширшин Е.А.
ПОЛЯРИЗАЦИОННО-РАЗРЕШЕННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ.....162

Никитин А.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РЕАЛИЗАЦИИ МАГНИТОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОДХОДА В НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ.....163

Шарапенков Э.Г., Мамонова О.В., Карцев Д.Д., Прилепский А.Ю.
НАПРАВЛЕННАЯ САМОСБОРКА СФЕРОИДОВ МЕТОДОМ МИКРОПАТТЕРНИНГА: ГИБРИДНАЯ СИСТЕМА GPOSS-PDMS / DMAEMA-EDMA.....164

Подлесных С.В., Шаповал А.И.
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ПЛАТФОРМА АНАЛИЗА БЕЛОК-БЕЛКОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ИММУНОДИАГНОСТИЧЕСКИХ И ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ.....165

Ляпин Д.С., Кустов А.В., Березин Д.Б., Калягин А.А., Шухто О.В., Юров М.Ю.
ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ХЛОРИНА E_6 С ε-ПОЛИЛИЗИНОМ НА ГЕНЕРАЦИЮ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА И ФОТОИНАКТИВАЦИЮ ПАТОГЕННЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ.....167

Руина К.С., Новикова В.О., Покидова О.В., Санина Н.А.
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТИОЛСУЛЬФАТНОГО НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ДИАЗОЛАМИ И ИМИДАЗОЛ-СОДЕРЖАЩИМИ БИОМОЛЕКУЛАМИ.....168

Грузнова О.А., Грузнов Д.В., Лобанов А.В.
СОЗДАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО КОМПЛЕКСА ХЛОРОФИЛЛ-СОДЕРЖАЩЕГО ЭКСТРАКТА КРАПИВЫ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ.....169

Соломаха О.А., Никифоров А.А., Гофман И.В., Коржикова-Влах Е.Г.
ОСТЕОПЛАСТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(Е-КАПРОЛАКТОНА) И ЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ.....170

Багаева И.О., Кулагина А.В., Синицына Е.С., Коржикова-Влах Е.Г.
АМФИФИЛЬНЫЕ КАТИОННЫЕ СОПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ), ПОЛИ(Е-КАПРОЛАКТОНА) И ПОЛИАМИНОКИСЛОТ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ СИСТЕМ КОМБИНИРОВАННОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ.....171

Джужа А.Ю., Левит М.Л., Коржикова-Влах Е.Г.
АМФИФИЛЬНЫЕ ПРИВИТЫЕ СОПОЛИМЕРЫ
ДЛЯ ДОСТАВКИ ПАКЛИТАКСЕЛА И МИРНК 172

Кардош А.В., Нифонтова Г.О., Загороднев Е.В., Бикмулина П.Ю.,
Березянко И.А., Костюк С.В., Шпичка А.И., Тимашев П.С.
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ РЕГУЛЯЦИЯ ЗАХВАТА МИКРО-/НАНОГЕЛЕЙ
НА ОСНОВЕ ПНИПАМ КЕРАТИНОЦИТАМИ ЧЕЛОВЕКА 173

Гладун Е.А., Козырев Н.А., Саватейкин Я.М.,
Ле-Дейген И.М., Клячко Н.Л., Кочиш И.И.
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
РАСТИТЕЛЬНОГО РУТИНА С ИОНАМИ МАГНИЯ (II) 174

Штейнберг Т.С., Астахова Т.Ю., Грищенко М.В.,
Ковалева Н.В., Болтнева Н.П., Рудакова Е.В.,
Пронкин П.Г., Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Махаева Г.Ф.
ВЛИЯНИЕ N-ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ АМИРИДИНА
НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ЕГО КОНЪЮГАТОВ 175

Терехова А.А., Амозова В.И., Ступина Т.С.,
Мумятова В.А., Мищенко Д.В., Санина Н.А., Балакина А.А.
РОЛЬ ЛИГАНДНОЙ АРХИТЕКТУРЫ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ
ЖЕЛЕЗА В РЕГУЛЯЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ
ПРОГРАММИРУЕМОЙ ГИБЕЛИ КЛЕТОК HEPG2 176

Зубкова А.Е., Юдкин Д.В.
ГЕНЕТИЧЕСКИЕ МОДИФИКАЦИИ СВИНЕЙ, НАПРАВЛЕННЫЕ
НА СНИЖЕНИЕ ИММУННОГО ОТТОРЖЕНИЯ ОРГАНОВ
ПОСЛЕ КСЕНОТРАНСПЛАНТАЦИИ 177

Мазина П.С., Заварыкина Т.М., Руженцева Д.А.,
Зленко К.А., Ходырев Д.С., Дудкина Е.С., Жанин И.С.,
Гольцов А.Ю., Кометова В.В., Колядина И.В., Хохлова С.В.
ОЦЕНКА ДИНАМИКИ КОНЦЕНТРАЦИИ ЦИРКУЛИРУЮЩЕЙ ОПУХОЛЕВОЙ
ДНК У БОЛЬНЫХ ТРОЙНЫМ НЕГАТИВНЫМ РАКОМ МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ
НА ФОНЕ НЕОАДЪЮВАНТНОЙ ХИМИОТЕРАПИИ (СЕРИЯ СЛУЧАЕВ) 178

Мазина П.С., Путляев Е.В., Эпова Е.Ю., Дудкина Е.С., Руженцева Д.А.,
Бикеев Ю.В., Кометова В.В., Хохлова С.В., Заварыкина Т.М.
КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ ТРАНСКРИПТОВ
МАРКЕРНЫХ ГЕНОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ
РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ 179

Дудкина Е.С., Козырко Е.В., Руженцева Д. А.,
Лужина Е.А., Хохлова С.В., Заварыкина Т.М.
ПОЛИМОРФНЫЕ ВАРИАНТЫ ГЕНОВ ABCB1 И ABCC1
У БЕРЕМЕННЫХ С ОНКОЛОГИЧЕСКИМИ ЗАБОЛЕВАНИЯМИ
КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРОГНОСТИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ.....180

Сувернева Д.О., Хасан А., Будылин Г.С., Филиппов И.Д., Давыдов Д.А.,
Корнева Н.В., Кисляков Д.А., Щеславский В.И., КамаловА.А., Ширшин Е.А.
ДИАГНОСТИКА РАКА МОЧЕВОГО ПУЗЫРЯ НА ОСНОВЕ ВРЕМЕНИ
ЖИЗНИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРОТОПОРФИРИНА IX.....181

Мосолова А.А., Гусева Е.А., Немец Е.А., Басок Ю.Б.
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ЭЛЕКТРОСПИННИНГА ДЛЯ СОЗДАНИЯ
БИОДЕГРАДИРУЕМЫХ КОНДУИТОВ ИЗ ПОЛИКАПРОЛАКТОН–ЖЕЛАТИН
В НЕЙРОХИРУРГИЧЕСКОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ 183

Корепанова Е.П., Шилов Н.Р., Аникин А.А.,
Пшеничников С.Е., Левада Е.В.
ВЛИЯНИЕ $Ti_3C_2T_x$ МХЕНОВ, ОБРАБОТАННЫХ NAOH,
НА ЖИЗНЕСПОСОБНОСТЬ КЛЕТОК HUH7 В ХОДЕ
ФОТОТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ.....184

Генералова А.А., Коваленко В.В., Терешкин Э.В.,
Терешкина К.Б, Лойко Н.Г., Крупянский Ю.Ф.
ОБРАЗОВАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДНК-DPS ПОД ДЕЙСТВИЕМ
4-ГЕКСИЛРЕЗОРЦИНА В КЛЕТКАХ ESCHERICHIA COLI.....186

Тагирова А.Р., Смолина А.В., Полетаева Д.А.,
Солдатова Ю.В., Забельникова А.М., Санина Н.А., Файнгольд И.И.
КАРДИОПРОТЕКТОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНОГО
НИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА С ПЕНИЦИЛЛАМИНОВЫМИ
ЛИГАНДАМИ: КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НА МОДЕЛЯХ
IN VITRO И IN VIVO.....187

Шахов А.М., Осыченко А.А.
ЛАЗЕРНАЯ ДЕАКТИВАЦИЯ ДНК В ООЦИТАХ МЫШИ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО КРАСИТЕЛЯ
HOECHST В КАЧЕСТВЕ СЕНСИБИЛИЗАТОРА 188

Осыченко А.А., Шахов А.М., Залесский А.Д., Айбуш А.В.
РАЗРУШЕНИЕ ДНК ФЕМТОСЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ
ИЗЛУЧЕНИЕМ БЛИЖНЕГО ИК ДИАПАЗОНА:
МЕХАНИЗМ И ПРИМЕНЕНИЕ.....189

Маннинен А.С., Белик П.А., Афанасьев Н.А., Бузыкин А.Г.
ИССЛЕДОВАНИЕ БИОСОВМЕСТИМОСТИ НАНЕСЕННЫХ ЛАЗЕРОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ МЕТОДОМ ОКРАШИВАНИЯ LIVE/DEAD 190

Хроменкова Т.А., Минаева С.А., Миронов А.В.
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ЭЛЕКТРОСПРЕИНГА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ МИКРОЧАСТИЦ 191

Аскерова А.С., Блинов А.В.
ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ФОРМ ОКСИДОВ МАРГАНЦА И МОЛИБДЕНА НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ПОСЕВНЫХ КУЛЬТУР 192

Леонова Т.В., Дроздов А.С.
СИНТЕЗ СУПЕРПАРАМАГНИТНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ МАГНЕТИТА ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ 193

Голованова Л.М., Горохова А.А., Кириллин М.Ю., Амосов А.В., Кучмижак А.А., Балалаева И.В.
БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛАЗЕРНО-СИНТЕЗИРОВАННЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ AU–TIO_2: ОЦЕНКА ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И ФОТОТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА КЛЕТОЧНЫХ ЛИНИЯХ 194

Ягодка Г.А., Курмаз С.В., Ульянов И.В., Балакина А.А.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЦИТОТОКСИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ КУРКУМИНА НА ОСНОВЕ (СО)ПОЛИМЕРОВ N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА 195

Иваненко А.Д., Кулебякина А.И., Бакиров А.В., Стрельцов Д.Р.
ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАГРУЖЕННОГО МЕТАЛЛА В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ НАНОЧАСТИЦ 196

Астафьев О.М., Полетаева Д.А., Тагирова А.Р., Комчихина О.М., Смолина А.В., Краевая О.А., Большакова В.С., Трошин П.А., Файнгольд И.И.
АНТИОКСИДАНТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} С АМИНОФОСФОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ 197

Чернышова К.Д., Филатов П.В., Швецов В.А., Зюзин М.В.
ДВУХСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ АНТИБИОТИКОРЕЗИСТЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ ДНК-КОНСТРУКЦИЙ ТИПА 4 WAY-JUNCTION 198

Пляшечник Е.С.
ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ
ДЛЯ НОСИМЫХ СЕНСОРНЫХ СИСТЕМ 199

Марченкова Н.С., Кулебякина А.И.
ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СУБМИКРОННЫЕ
НОСИТЕЛИ НА ОСНОВЕ ЭМУЛЬСИИ ПИКЕРИНГА
ДЛЯ КАПСУЛИРОВАНИЯ И ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ 200

Копылец Т.А., Амозова В.И., Приходченко Т.Р.,
Мищенко Д.В., Балакина А.А.
КАРДИОПРОТЕКТОРНЫЕ И ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ
СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНОГО ПИРИДОКСИНА B6NO:
NRF2-ЗАВИСИМЫЙ МЕХАНИЗМ И СИНЕРГИЗМ
С ЦИТОСТАТИКАМИ ПРИ МЕЛАНОМЕ B16 201

Коблов И.А., Семенов К.А.,
Чупров-Неточин Р.Н., Кислый В.П., Семенов В.В.
ОБНАРУЖЕНИЕ НОВОГО КЛАССА АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ
АГЕНТОВ, АКТИВНЫХ В ОТНОШЕНИИ БАКТЕРИАЛЬНОГО
МИТОТИЧЕСКОГО БЕЛКА FTSZ 202

Цай С., Чернобурова Е.И., Иловайский А.И., Заварзин И.В.
НОВЫЕ ГИБРИДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ
ПРОИЗВОДНЫХ D-СЕКОСТЕРОИДОВ И НАФТАЛИМИДА 203

Нижник О.А., Чернобурова Е.И., Иловайский А.И., Заварзин И.В.
МОДИФИКАЦИЯ КОЛЬЦА А В Г-ЛАКТОНЕ
17-ГИДРОКСИ-3-ОКСО-17А-ПРЕГН-4-ЕН-21-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ 204

Костандян Е.С., Давыдов Р.Э., Хаев А.О., Чистяков Е.М.
АЭРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ СШИТОГО ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА,
СОДЕРЖАЩИЕ РАСТИТЕЛЬНЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ ДОБАВКИ 205

Торопцева А.В., Горобец М.Г., Абдуллина М.И.,
Шалупов А.И., Градова М.А., Белых Д.В., Бычкова А.В.
ВКЛЮЧЕНИЕ 17-ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕВОГО ЭФИРА
ПИРОФЕОФОРБИДА А В СОСТАВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
ГИБРИДНЫХ НАНОСИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ
ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА И СЫВОРОТОЧНЫЙ АЛЬБУМИН 206

Белова А.Д., Кузнецова Е.Г., Пономарева А.С., Нефоткина В.С., Басок Ю.Б.
РАЗРАБОТКА ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ДЕЦЕЛЛЮЛЯРИЗОВАННОЙ
ТКАНИ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ РАНЕВЫХ ДЕФЕКТОВ КОЖИ 207

Борисенко Е.А.
БУЛЕВО МОДЕЛИРОВАНИЕ СИГНАЛЬНЫХ ПУТЕЙ
WNT/B-CATENIN И PI3K/AKT/MTOR ПРИ ОКИСЛИТЕЛЬНОМ
СТРЕССЕ: ПРЕДСКАЗАНИЕ УЗЛОВ-МИШЕНЕЙ 208

Воротник И.С.
РОЛЬ АЦЕТИЛТРАНСФЕРАЗ В ФИТОИММУННОМ ОТВЕТЕ
ПШЕНИЦЫ НА ИНФИЦИРОВАНИЕ ВОЗБУДИТЕЛЕМ СЕПТОРИОЗА 209

Гаврилов А.В., Стрельцова К.А.
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ
И СОЛЮБИЛИЗИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ТОКОФЕРОЛА
ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ СУКЦИНАТА 210

Соломаха О.А., Джужа А.Ю., Скорик Ю.А., Коржикова-Влах Е.Г.
ПОЛИМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ КОЛХИЦИНА:
ИНКАПСУЛИРОВАННЫЕ И КОНЪЮГИРОВАННЫЕ ФОРМЫ 211

Жакупова Ю.Б., Красников А.С., Науменко К.Н.,
Малыгин А.А., Лаврик О.И., Грайфер Д.М.
ADP-РИБОЗИЛИРОВАНИЕ РИБОСОМНОГО БЕЛКА EL6
ЧЕЛОВЕКА ФЕРМЕНТАМИ PARP1 И PARP2 IN VITRO 212

Ивашков С.С.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КОМПЛЕКСА P TAU БЕЛКА И ИОНОВ КАЛЬЦИЯ 213

Марченко В.А., Иващенко Л.И., Облогина Е.Ю.
ЗЕЛЕНЫЙ ВЕКТОР ВЕТЕРИНАРИИ: В ПОИСКАХ
ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ И ЭФФЕКТИВНЫХ ДЕЗИНФЕКТАНТОВ 214

Кугрышева Т.Д., Винокуров В.А.
ОПТИМИЗАЦИЯ БИОСИНТЕЗА ВНЕКЛЕТОЧНЫХ
ПОЛИСАХАРИДОВ SCHIZOPHYLLUM COMMUNE
ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕЛАССЫ В КАЧЕСТВЕ
ИСТОЧНИКА УГЛЕРОДА 215

Лихоман А.Е., Доценко В.В.
ОКИСЛЕНИЕ НАДУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ
2-ЦИАНОТИОАКРИЛАМИДОВ И 2-ТИОКСОПИРИДИНОВ 216

Мельников Г.А., Кыров Д.Н.
МОЛЕКУЛЯРНО-БИОФИЗИЧЕСКИЕ ДЕТЕРМИНАНТЫ
АРХИТЕКТУРЫ CYP4 И CYP6: МЕХАНИЗМЫ АДАПТАЦИИ,
МЕМБРАННОЕ ЗАКРЕПЛЕНИЕ И ЗАРЯДОВОЕ ЗОНИРОВАНИЕ 217

Морозов Д.А., Белова А.Д., Кузнецова Е.Г., Басок Ю.Б.
РАЗРАБОТКА СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВИНМОНОНУКЛЕОТИДА В ПЕРФУЗИОННОМ РАСТВОРЕ ПЕЧЕНИ 218

Москвина А.А., Деева Т.А.
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭСТРОГЕНОВ НА ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА МИКРОБИОТЫ ВЛАГАЛИЩА 219

Новак В.В., Киндоп В.К., Доценко В.В.
А-РОДАНОАЦЕТАМИДЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ТИЕНО[2-В]ХИНОЛИНОВЫЙ ФРАГМЕНТ: СИНТЕЗ И ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ 220

Подлесных С.В., Бембеева Б.О., Припутневич Т.В., Денисов П.А., Красновский А.А., Козлов А.С., Бендиткис А.С., Силачев Д.Н.
АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРИРОДНОГО ХЛОРИНА ЕТРА ИЗ OPHIURA SARSI 221

Поздеев А.О., Коротеев А.М., Коротеев М.П., Офицеров Е.Н.
НОВЫЕ СЛОЖНОЭФИРНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ДИГИДРОКВЕРЦЕТИНА 223

Пуха Е.Ю., Пономарева А.С., Круглов Д.Н., Басок Ю.Б.
СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА СРЕД ДЛЯ КРАТКОСРОЧНОГО ГИПОТЕРМИЧЕСКОГО ХРАНЕНИЯ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТРОМАЛЬНЫХ КЛЕТОК ПЕРЕД ИНФУЗИЕЙ 224

Пуха Е.Ю., Пономарева А.С., Баранова Н.В., Кирсанова Л.А., Григорьев А.М., Басок Ю.Б.
РАЗРАБОТКА ПРОТОКОЛА ДЕЦЕЛЛЮЛЯРИЗАЦИИ СЕЛЕЗЕНКИ КРЫСЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СКАФФОЛДА В ТКАНЕВОЙ ИНЖЕНЕРИИ 225

Ремезова Г.В., Хайруллина Р.Р.
КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ, 4-ДИГИДРО-2Н-БЕНЗО[Е][,4]ТИАДИАЗИН-,1-ДИОКСИДА 226

Соломаха О.А., Степанова М.А., Никифоров А.А., Нащекина Ю.А., Егорова Т.С., Демьянова Е., Коржикова-Влах Е.Г.
РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ПАРЕНТЕРАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ПЕПТИДНЫХ АНТИБИОТИКОВ — ПОЛИМИКСИНОВ 227

Швецов В.А., Филатов П.В., Попышева Т.М., Бобков Г.А., Чернышова К.Д., Зюзин М.В.
ОПТИМИЗАЦИЯ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА HEM1/ГЕМИН 228

Трифонова Н.Е., Ванин А.Ф., Тронов В.А., Шумаев К.Б., Ткачев Н.А., Микоян В.Д.
ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ НИТРОПРУССИДА
ПРИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ЗНАЧЕНИЯХ РН ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ
НЕ АНИОНАМИ ЦИАНИДА, А КАТИОНОМ НИТРОЗОНИЯ (NO^+) 229

Куулар Мангалтепе А.Р.
ПРИМЕНЕНИЕ ТРАНСКРАИАЛЬНОЙ
МИКРОПОЛЯРИЗАЦИИ В ДЕТСКОЙ НЕВРОЛОГИИ.....230

Куулар Мангалтепе А.Р.
ПРИМЕНЕНИЕ ТРАНСВЕРТЕБРАЛЬНОЙ МИКРОПОЛЯРИЗАЦИИ
В КОМПЛЕКСНОЙ ТЕРАПИИ ПАТОЛОГИЙ СПИННОГО МОЗГА 231

**СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ В МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»....232**

Сторожева К.Д., Маркина А.А.
ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЗМОВ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА
ОТ КОНФОРМАЦИИ В СПИРАЛЕОБРАЗНЫХ ОЛИГОМЕРАХ.....232

Галикберова М.Р., Боченкова А.В., Клещина Н.Н.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
МЕХАНИЗМОВ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ
ПРОИЗВОДНЫХ МЕЗО-CF_3-BODIPY 233

Мезенцев-Черкес И.В.
МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КМ/ММ
НЕФЛУОРЕСЦИРУЮЩЕГО БЕЛКА SHADOWR.....234

Гвоздикова Е.В.
AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГИДРОКСОСУЛЬФАТА ЦИНКА.....235

Коровина А.В., Квашнин Д.Г.
АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРУЮЩЕГО
КОМПОНЕНТА НА ОСНОВЕ ТРИАЗИНОВОГО КАРКАСА.....236

Проломов И.В., Малашкеевич К.М., Алабугин И.В., Медведев М.Г.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО
СТРОЕНИЯ НЕИННОЦЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ
С ПЕРОКСИД-ПРОИЗВОДНЫМИ ЛИГАНДАМИ 237

Руденко Е.И.
МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМАРНОЙ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА
И КИСЛОРОДА НА НАНОЧАСТИЦАХ D^9- И D^{10}-МЕТАЛЛОВ 238

Иванькова Ю.И., Сорокина Л.Ю.
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИИ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ НА КОМПОЗИТНЫХ НАНОВОЛОКНАХ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА 239

Федорова Е.П., Ионин М.В., Киняевский И.О., Климачев Ю.М.
РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ГЕНЕРАЦИИ РАЗНОСТНЫХ ЧАСТОТ ТИТАН-САПФИРОВОГО ЛАЗЕРА В КРИСТАЛЛЕ $BAGA_2GES_6$ 240

Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А.
ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛ ИНДОМЕТАЦИНА В РАСТВОРИТЕЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПОЛЯРНОСТИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЯМР 241

Макагонов И.А., Чаплина Е.С.
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕПЛОСТОЙКИХ ПОЛИЭФИРИМИДОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 242

Зеленина А.И., Маслов П.А., Кудряшов С.И., Орехов Н.Д.
ИССЛЕДОВАНИЕ БИМОДАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ ИНТЕРСТИЦИАЛЬНОГО ВОДОРОДА В АЛМАЗЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 243

Исаев Я.И., Ковалев А.Е., Макаров Д.М., Ходов И.А.
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ MN, FE, NB, MO В КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ 244

Дудаков И.В., Королев В.В., Боченкова А.В.
НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ XMCQDPT2-ТОЧНОСТИ ДЛЯ МАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФОТОДИССОЦИАЦИИ $CH_2NH_2^+$ 245

Куклин Ф.А., Иванов В.С.
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ УСКОРЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ 246

Самсонов М.А., Писарев В.В.
ОЦЕНКА ОБЪЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ УГЛЕВОДОРОДОВ МОДЕЛЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 247

Семенова Д.К., Парочкина Е.В., Бормотов Д.С., Заворотнюк Д.С., Буйко Е.Е., Уфандеев А.А., Иванов В.В., Удут Е.В., Пеков С.И., Попов И.А.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЛИПИДОМА ПЕЧЕНИ У ЗДОРОВЫХ МЫШЕЙ И МЫШЕЙ С ГЕПАТОЦЕЛЛЮЛЯРНОЙ КАРЦИНОМОЙ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ 248

Санников В.С., Иванов В.С.
МЕТОД АВТОМАТИЧЕСКОГО РАСЧЕТА СКОРОСТИ ФРОНТА РЕАКЦИИ ПО ДАННЫМ ВИДЕОСЪЕМКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ 249

Кожевников Ф.А., Синько А.С., Конникова М.Р., Ангелуц А.А.
АНАЛИЗ ТЕРАГЕРЦОВЫХ СПЕКТРОВ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ С ОЦЕНКОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ 250

Медведева А.И.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВНУТРИГЛАЗНОГО ДАВЛЕНИЯ И СЕНСОРНЫХ НАРУШЕНИЙ В ЗРИТЕЛЬНОМ АНАЛИЗЕ ПРИ ГЛАУКОМЕ 251

Холманских Д.Д., Поляков М.Д., Хренова М.Г.
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОННО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕСКРИПТОРЫ СВЯЗИ P–O КАК МЕРА РКА УХОДЯЩЕЙ ГРУППЫ АРИЛФОСФАТОВ 252

Алтынбаев В.Д., Панченко Д.Д., Нурисламов А.Р.
АНАЛИЗ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ ЦИС-РЕГУЛЯТОРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ CMV И SV40 И ОЦЕНКА ПРИМЕНИМОСТИ ГЕНОМНОЙ ЯЗЫКОВОЙ МОДЕЛИ GENA-LM ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ НУКЛЕОТИДНЫХ ЗАМЕН 253

Зарькова Е.М., Ларин Д.Е.
САМОСБОРКА В ПОЛИМЕРНЫХ ЩЕТКАХ, СОСТОЯЩИХ ИЗ АМФИФИЛЬНЫХ ГРЕБНЕОБРАЗНЫХ СОПОЛИМЕРОВ 254

Полунин К.С., Иким М.И., Демина В.А., Курмангалеев К.С.
СОПОСТАВЛЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА ТПВ-ПРОФИЛЕЙ 255

Федосеев Т.В., Трайтак С.Д.
ДИФФУЗИЯ В ТОНКИХ ТРУБКАХ: ОГРАНИЧЕНИЯ МОДЕЛИ ФИКА–ЯКОБСА 256

Трофименко Е.Т., Вандышев Г.К, Копаничук И.В.
РАЗНООБРАЗИЕ МОРФОЛОГИЙ ЖИДКОЙ ФАЗЫ
В ТРЕУГОЛЬНЫХ НАНОПОРАХ ПРИ ПОЛНОМ НЕСМАЧИВАНИИ 257

Ли Р.В., Игошин О.А., Криссинель Е.Б., Французов П.А.
КВАНТОВО-ПОЛЕВОЙ ПОДХОД К КИНЕТИКЕ МНОГОСТАДИЙНЫХ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ: СОЗДАНИЕ ПОЛНОСТЬЮ
МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕОРИИ ВСТРЕЧ (СМЕТ) 258

Щербинина Е.А., Демидов А.Б.
СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕДИЦИОННЫХ ДАННЫХ
ПО ПРОДУКЦИОННЫМ ПАРАМЕТРАМ И ФАКТОРАМ
СРЕДЫ КАРСКОГО МОРЯ 259

Губарев Е.Д., Серещенко Е.В., Губернов В.В.
ЧИСЛЕННОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ВЛИЯНИЯ ПОРИСТОСТИ ПЛОСКОЙ ГОРЕЛКИ НА СВОЙСТВА
И СТРУКТУРУ ПЛАМЕНИ 260

Кожаткин И.Д., Щербинин А.В., Васильев А.Н.
ЗОННАЯ СТРУКТУРА ИОДИДА ЦЕЗИЯ 261

Никитин К.Ю., Щербинин А.В.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
И РАСЧЕТНЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ДАННЫХ ПО ДВУХФОТОННОМУ
ПОГЛОЩЕНИЮ РЯДА ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ 262

Дмитрович А.Д., Буглаков А.И.
ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
КЛИНОВИДНЫХ МЕЗОГЕНОВ НА САМООРГАНИЗАЦИЮ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ 263

Терехина Е.Н., Антипова М.Л., Петренко В.Е.
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КОМПЛЕКСА ВКЛЮЧЕНИЯ В-ЦИКЛОДЕКСТРИН-
ХЕЛИДОНОВАЯ КИСЛОТА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПРИ 298–340 К 264

Кристовский Н.В., Армеев Г.А., Шайтан К.В.
АВТОМАТИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОСТАТКОВ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 265

Петрова С.С., Квашнин Д.Г.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭФФЕКТОВ ГИБРИДНЫХ
СИСТЕМ TE@УНТ ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ 266

Сыроватская Я.В., Нурбеков М.К.
КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ
ПЛАЗМИДЫ PCOMB3XSS-S100B 267

Васильев Г.А., Корнейчук А.Д., Яковенко Л.В.
МОДЕЛЬ ГЕТЕРОАГРЕГАТОВ ТРОМБОЦИТОВ
С ОПУХОЛЕВЫМИ КЛЕТКАМИ MCF-7 268

Миннуллина Г.А., Ефимов С.В., Клочков В.В.
ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОНФОРМЕРОВ CSD
С ПОМОЩЬЮ ЯМР И МД МОДЕЛИРОВАНИЯ 269

Хохлов А.А., Булавко Е.С., Иванков Д.Н.
ВОССТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПРЕДРЕАКЦИОННОГО
КОМПЛЕКСА 6-ФОСФО-А-ГЛЮКОЗИДАЗЫ GLVA МЕТОДАМИ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ 270

Барулина М.А., Цитронов В.А.
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТИ
ПРИ ПОМОЩИ ТРАНСФОРМЕРА И ГРАФОВОЙ
СЕТИ ВНИМАНИЯ 271

Боровиков Н.С., Малков Д.А., Параскун А.Г.
ОТКЛОНЕНИЕ ДРЕЙФА ЧАСТИЦ ОТ КЛАССИЧЕСКОГО
СТОКСОВА ДРЕЙФА НА НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛНАХ 272

Губанков А.А., Новиков В.Т.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА
ГЛИКОЛИДА ИЗ МЕТИЛГЛИКОЛЯТА 273

Малков Д.А., Боровиков Н.С., Параскун А.Г.
ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ВОЛНОВЫМ
ДРЕЙФОМ И ПОВЕРХНОСТНЫЙ ЗАХВАТ ПЛАВУЧИХ ЧАСТИЦ 274

Миронов В.А., Курамшин Б.К., Штырлин В.Г.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ИОНОВ MN(III) В БИЯДЕРНЫХ
ОКСО-КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСАХ: СУПЕРОБМЕННЫЕ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И АТОМНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ 275

Смыгалина П.П., Абдулхамидов Ш.Ш.
БЕСКОНТАКТНЫЙ МОНИТОРИНГ СВЧ-ОТОГРЕВА
С ПОМОЩЬЮ ИК-ТЕРМОМЕТРИИ 276

Соловьев А.Н., Кизилова Я.В., Чернуха А.Е., Бровин А.И., Иванов С.А., Печенин А.А., Казаков Е.И., Сабуров В.О., Корякин С.Н.
ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОГЛОЩЕННЫХ ДОЗ ДЛЯ ЗАДАЧ РАДИОЛОГИИ 277

Лонг Трьет Гьянг ХУЫНЬ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕЩЕНИЯ МГНОВЕННОГО ЦЕНТРА ВРАЩЕНИЯ КОЛЕННОГО СУСТАВА ПРИ ФОРМУЛИРОВАНИИ ТРЕБОВАНИЙ К КОМПЕНСИРУЮЩЕМУ МЕХАНИЗМУ ЭКЗОСКЕЛЕТА 278

Гробовой И.С., Сунцов А.Ю.
ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТАЦИИ И ПРОТОННОГО ТРАНСПОРТА В ДОПИРОВАННЫХ ЦЕРИЕМ И ИТТРИЕМ ФЕРРИТАХ БАРИЯ 279

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ 280