



IX Всероссийская
научная молодежная
школа-конференция

Организаторы



ФИЦ ХФ РАН



Партнёры



Благотворительный фонд
**РАЗВИТИЕ
ХИМИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ**

триалог

1931



ПРОФСОЮЗ
ИХФ РАН

ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ

20-22 апреля 2022 года,
ФИЦ ХФ РАН

ТЕЗИСЫ

chemphysbioint.ru

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

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

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

**Москва
20–22 апреля 2022 года**

УДК 50(063)
ББК 2я431

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

ISBN 978-5-6045579-5-2

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

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

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

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

1. Новые материалы: технологии создания и методы исследования;
2. Физико-химические процессы, кинетика и термодинамика;
3. Компьютерное моделирование и теория наносистем;
4. Биохимия, биофизика, биотехнология и биомедицина.

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

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

ISBN 978-5-6045579-5-2



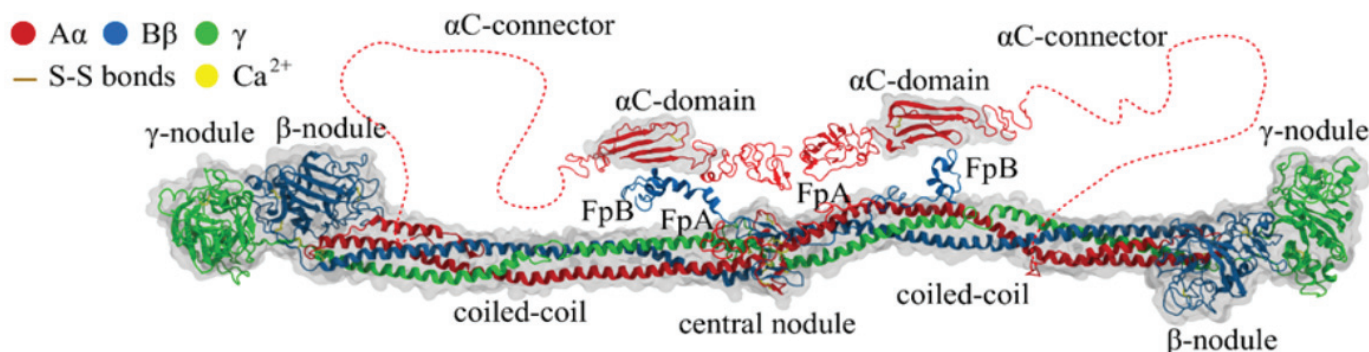


Рис. 1. Структура молекулы фибриногена. [Y.F. Zuev, et al. “Conformational Flexibility and Self-Association of Fibrinogen in Concentrated Solutions”, J. Phys. Chem. B, 121: 7833-7843 (2017)].

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

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ С ЦИКЛОПРОПАНОВЫМ КОЛЬЦОМ

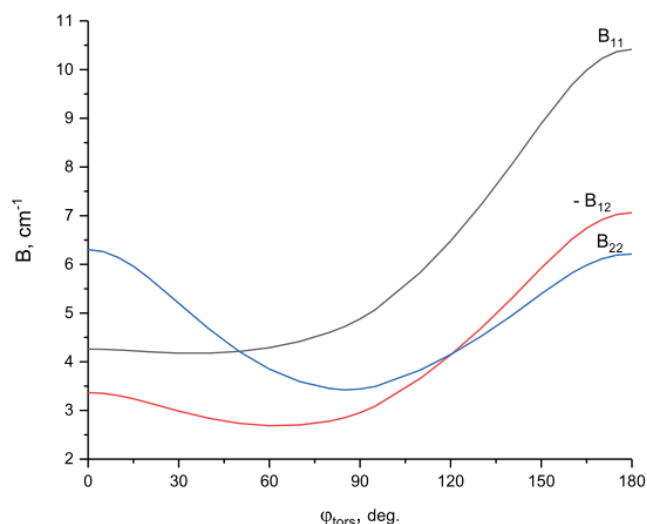
Акимов Г.А., Степин С.С., Батаев В.А., Годунов И.А.

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

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

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

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



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

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

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

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

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

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

²Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук

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

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

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

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

При использовании электролита HF : C₂H₅OH = 1 : 1 + STAC, на пластинах кремния марки КДБ 0,005 (100), при плотности тока $j = 80 \text{ мА/см}^2$ в течение 60 мин, была сформирована нанопористая структура. Согласно результатам СЭМ, поры имеют одинаковый диаметр по глубине травления, с размерами порядка 20 нм при глубине пористого слоя порядка 180 мкм.

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



Рис. 1. Процесс проявления пористого слоя.

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

Экспериментально установлено, что:

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