

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



гической активностью. Более того, закрепляя МНЧ на поверхности клеточной мембраны и, затем, обрабатывая их слабыми низкочастотными переменными магнитными полями, можно проводить дистанционную активацию ионных каналов, а также запускать различные механизмы клеточной гибели. Такая возможность дистанционного контроля над различными молекулярными процессами открывает новые горизонты для разработки платформ для адресной доставки лекарств, контроля за их высвобождения, а также позволяет дистанционно разрушать опухолевые клетки. Несмотря на то, что эффективность магнито-механического подхода неоднократно демонстрировалась в различных экспериментальных работах, модельные исследования проводятся на уровне доказательств и не подкрепляются количественными данными, и лишь несколько теоретических работ описывают влияние внешних полей на МНЧ. Более того, существующие экспериментальные работы описывают магнито-механические эффекты, опосредуемые агрегатами МНЧ. Все это приводит к тому, что в различных работах экспериментальные значения энергий магнито-механического эффекта и механических сил, опосредованных МНЧ с одними и теми же характеристиками, отличаются на несколько порядков. Существующие противоречия ясно показывают необходимость правильной оценки корреляции между свойствами МНЧ и опосредуемым ими магнитомеханическим эффектом.

Для решения данной проблемы была разработана специальная экспериментальная методика с применением коротких ДНК-дуплексов, содержащих до 60 пар оснований, для которых может быть легко рассчитана энергия связи комплементарных цепочек. Одноцепочечную флуоресцентно-меченую ДНК, содержащую 60 нуклеотидов, ковалентно закрепляли на поверхности МНЧ, тогда как комплементарные ей цепочки с длиной от 18 до 60 нуклеотидов ковалентно связывали с поверхностью стеклянной подложки. Далее конъюгаты МНЧ гибридизовали с комплементарными ДНК на поверхности стекла, после чего полученные микрочипы обрабатывались низкочастотными магнитными полями с известной амплитудой, что приводило к вращательным движениям МНЧ, опосредованным магнитным крутящим моментом. Такой крутящий момент передавался от МНЧ к связанным с ними ДНК-дуплексам, что приводило к механическим деформациям и разрыву цепей ДНК с последующим отрывом МНЧ от подложки, который фиксировался по изменению сигнала флуоресценции. Было показано, что 10 нм МНЧ ферритов способны опосредовать диссоциацию ДНК-дуплексов с энергией связи комплементарных цепочек $90 \text{ ккал-моль}^{-1}$ в поле с амплитудой 100 мТл и частотой 180 Гц. Кроме того, было показано, что выраженность магнито-механического эффекта напрямую зависит как от формы, так и от размера МНЧ, а также зависит от времени экспозиции и последовательности оснований в ДНК-дуплексе. Более высокие значения удельной намагниченности насыщения МНЧ приводили к большей степени механической диссоциации ДНК-дуплексов, что коррелирует с теоретическими расчетами.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-13-00438.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

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

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

Пористый никелид титана $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ является наиболее известным и перспективным функциональным материалом для многих применений благодаря своим уникальным механическим свойствам, отличной коррозионной стойкости и биосовместимости. Эти свойства во многом определяются спецификой пористой структуры: наличием в системе просачивающихся сетей пор или изолированных пор, а также размерами и геометрией пор. Одним из значительных достижений является синтез металлических пен на основе никеля и титана с микронными или наноразмерными порами, низкой плотностью в сочетании с высокой прочностью, большой площадью поверхности и открытой пористостью.

Несмотря на успехи, достигнутые в разработке технологий получения пористых металлических сплавов, производство пористого никелида титана значительно сложнее, в первую очередь, из-за высокой температуры плавления. Более того, результаты моделирования пористой структуры иногда не удается корректно сопоставить с данными эксперимента из-за существенного различия в линейных размерах пор: на эксперименте поры миллиметрового размера, в то время как моделирование позволяет получать поры размером порядка ста нанометров.

В настоящем исследовании мы представляем метод генерации пористой структуры для классической молекулярной динамики, позволяющий задать параметры пор, сопоставимые с параметрами пористых экспериментальных образцов. Предложен критерий масштабирования пористой структуры, позволяющий корректно сопоставлять результаты моделирования с экспериментальными данными для образцов с различной степенью пористости. Входными параметрами в предложенном методе являются координаты атомов модельной системы, экспериментальные значения среднего линейного размера пор и требуемое значение пористости. Рисунок 1 показывает мгновенный снимок пористого никелида титана при температуре 300 К, сгенерированного предложенным методом.

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

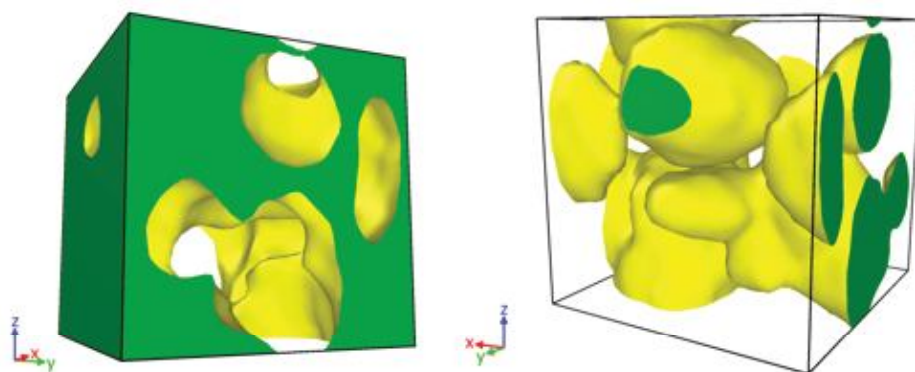


Рис. 1. Мгновенный снимок конфигурации пористой системы $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ (слева пористая матрица, справа — поры) с линейными размерами порядка 8.7 нм с пористостью 40% и размерами пор в пределах 2.1–5.7 нм.

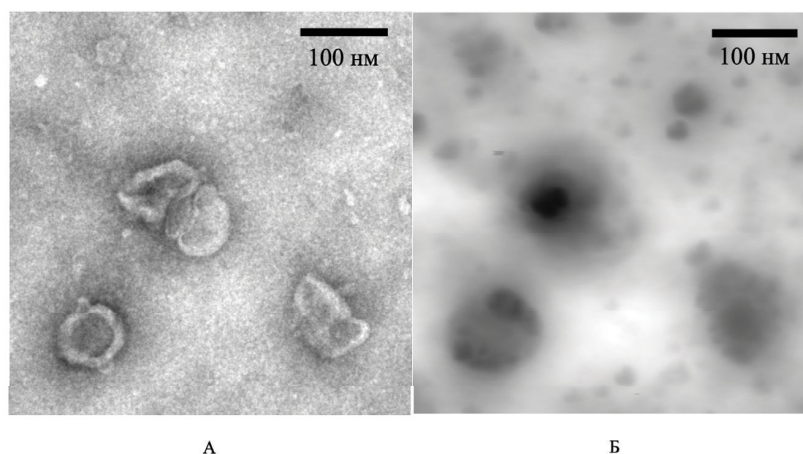
РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ

Никишин И.И.¹, Адлерберг В.В.¹, Сенковенко А.М.¹, Чевкина Е.М.², Скрыбин Г.О.², Багров Д.В.¹

¹Биологический факультет МГУ, Москва, Россия

²Российский научный онкологический центр им. Н.Н. Блохина, Москва, Россия

Развитие методов визуализации внеклеточных везикул (ВВ) с использованием микроскопии высокого разрешения критически важно для понимания функций и роли ВВ. Необходимость данных методов подчеркивается в рекомендациях Международного общества по изучению внеклеточных везикул (International Society for Extracellular Vesicles). Согласно этим рекомендациям, в исследованиях ВВ препараты после выделения следует характеризовать на уровне отдельных частиц, причем предпочитаемые методы — это просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) или атомно-силовая микроскопия (АСМ). В нашей работе мы разработали методику корреляционной АСМ-ПЭМ микроскопии, позволяющую охарактеризовать двумя методами отдельные везикулы на одних и тех же полях зрения. В нашей работе исследованы препараты ВВ, выделенных из кондиционированной среды культивирования клеток аденокарциномы молочной железы MCF-7 и линии клеток рака яичника Skov3. Метод ПЭМ позволяет получать детализированную информацию о размерах и морфологии частиц, при этом метод АСМ позволяет не только регистрировать изменение рельефа поверхности везикул и их латеральные размеры, но и оценивать высоту частиц над подложкой. С помощью разработанной методики было проведено сопоставление изображений индивидуальных внеклеточных везикул, полученных методами АСМ и ПЭМ (рис. 1), при этом точность позиционирования на макроскопическом образце достигала ~5 нм. Было показано, что морфология внеклеточных везикул «сдутые мячики» (cup-shaped morphology), которая для ПЭМ является наиболее распространенной и общепринятой, отличается от рельефа поверхности, полученного методом АСМ. По нашим данным, около 60% внеклеточных везикул на АСМ-изображениях не имели морфологии «сдутых мячиков», которая в 100% случаев проявлялась на ПЭМ-изображениях тех же самых частиц. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №19-34-90148), а также НОШ МГУ «Молекулярные основы живых систем и синтетическая биология».



А

Б

Рис. 1. Снимки внеклеточных везикул, полученные с использованием разных микроскопов (А — ПЭМ, Б — АСМ, выбрана инвертированная серая палитра).