

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



В этой работе мы разработали методы получения разнообразных комплексов на основе МРс и родственных им соединений. В виде монокристаллов получена большая серия соединений, исследованы их кристаллическая структура, оптические и магнитные свойства. Показано, что за счет варьирования исходных соединений (Рс, катион, координирующийся фрагмент) мы можем направленно влиять на упаковку макроциклов в солях, а также на оптические и магнитные свойства получаемых комплексов.

Например, на основе  $\{VIVO(Pc^{3-})\}^-$  серия мультядерных соединений с перспективными магнитными свойствами. Соединение  $(Cr^*_2Cr^+)\{V^{IV}O(Pc^{3-})\}^- \cdot 3C_6H_4Cl_2$  содержит  $[(Cr^*_2Cr^+)\{V^{IV}O(Pc^{3-})\}^-]_2$  фрагменты, в которых наблюдается ферромагнитное взаимодействие спинов.

Соединения тетрапиразинопорфиразинов получены при поддержке проекта РНФ № 21-73-10207. Исследования магнитных свойств комплексов частично поддержаны Государственным заданием № АААА-А19-119092390079-8.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТА-ХРОМОФОРА ЗЕЛЕННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА

Фархутдинова Д.А., Боченкова А.В.

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

Низкая токсичность, относительная простота использования и возможность адресного мечения непосредственно внутри живых клеток сделали флуоресцентные белки незаменимым инструментом визуализации в современных биологических исследованиях. В изолированном хромофоре зеленого флуоресцентного белка (GFP) флуоресценция конкурирует с безызлучательным каналом релаксации, связанным с фотоизомеризацией хромофора. Для модификации GFP-хромофора с CF3-заместителем в мета-положении экспериментально наблюдается неожиданно большой квантовый выход, несмотря на то, что внутримолекулярное вращение не осложнено введением дополнительных групп. Целью данной работы является исследование фотофизических и фотохимических свойств CF3-модификации хромофора зеленого флуоресцентного белка методами квантовой химии высокого уровня точности.

Равновесные геометрические конфигурации хромофора в газовой фазе в основном и возбужденных электронных состояниях, а также энергии вертикальных переходов в спектрах поглощения и флуоресценции рассчитывались с помощью многоконfigurационной квазивыврожденной теории возмущений ХМСҚДРТ2. Расчет энергетического спектра и анализ характера низколежащих электронно-возбужденных состояний продемонстрировал наличие оптиически разрешенного возбужденного состояния с внутримолекулярным переносом заряда. Найдена геометрия конического пересечения основного и возбужденного состояний. Было установлено, что геометрия конического пересечения обладает неплоской структурой и характеризуется поворотом вдоль двойной мостиковой связи и значительной пирамидализацией атома азота имидазольного кольца. Анализ топографии поверхностей потенциальной энергии вблизи конического пересечения позволил найти седловую точку реакции перехода молекулы в нефлуоресцирующее состояние. Рассчитанное из значений барьера время жизни флуоресценции хорошо согласуется с экспериментальными данными. Высокие значения средних дипольных моментов геометрий конического пересечения и седловой точки, а также сильное разделение зарядов в данных структурах способствует стабилизации заряженных структур в полярных растворителях и объясняет наблюдаемый сольватохромизм и зависимость квантового выхода флуоресценции от растворителя.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №22-13-00126) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного согласно Программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

## УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ В КИНЕТИКЕ ПЛАВЛЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

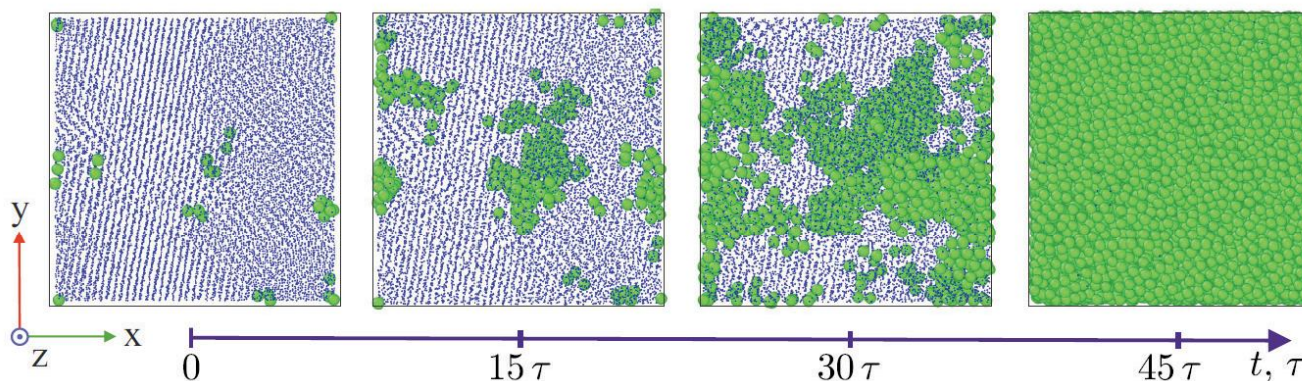
Фатихова Л.Р., Галимзянов Б.Н.

*Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

Понимание процессов структурно-фазовых трансформаций на микроскопических масштабах имеет важное фундаментальное значения. Исследование кинетики формирования жидкой фазы при плавлении кристаллов сильно зависит от протокола нагревания и от условий окружающей среды. Скорость нагревания, внешнее давление, температура начального состояния кристалла определяют как скорость протекания фазового перехода, так и механизм формирования зародышей жидкой фазы. Несмотря на достигнутые успехи в изучении механизмов плавления твердых тел, отсутствует общепринятое понимание универсальных закономерностей в кинетике формирования и роста жидких вкраплений малых размеров. Это обусловлено отсутствием детальных молеку-

лярно-динамических расчетов, охватывающих процесс плавления на наноразмерных пространственно-временных масштабах.

В настоящем исследовании мы выполнили моделирование молекулярной динамики процесса плавления кристаллической системы Леннард-Джонса, состоящей из 13500 частиц. Расчеты выполнены с использованием вычислительного пакета LAMMPS. Начальная конфигурация системы задается в виде кристалла с температурой  $T=0.1T_m$ , где  $T_m$  — температура плавления системы. Нагревание кристаллических образцов осуществлялось до температуры  $1.5T_m$  с различными скоростями. Полученные результаты показывают, что процесс плавления системы является аналогичным обратному процессу — капельному зародышеобразованию в насыщенном паре. А именно, мы наблюдаем гомогенное формирование и рост жидкой фазы внутри кристаллической системы, который напоминает сценарий фазового перехода насыщенный пар-жидкость (см. рисунок 1).



**Рис. 1.** Мгновенные снимки системы в различные моменты времени после начала процесса нагревания: синие точки — частицы кристаллической фазы, зеленые кружки — частицы жидкости.

Интенсивное плавление кристалла начинается с некоторым временем задержки и только после спонтанного появления жидких зародышей критического размера, как правило, состоящих из нескольких десятка частиц. При температурах вблизи плавления наблюдается быстрый рост и сращивание жидких зародышей вплоть до полного плавления кристалла. Такой сценарий плавления наблюдается при других рассмотренных скоростях нагревания. Результат оценки скорости формирования и роста зародышей жидкости, указывает на возможность унифицированного описания процесса плавления кристаллической системы при различных протоколах нагревания.

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

## **ВЛИЯНИЕ ВКЛЮЧЕНИЯ ФАКТОРОВ РОСТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВУХСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ КОЖНЫХ ПОКРОВОВ**

**Фетисова В.Э.**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия*

В последние годы всё более актуальной становится проблема создания материалов для замещения кожных покровов. На данный момент часто используемым способом является замещение повреждённого участка кожи кожей человека или животного. Однако такой метод имеет недостатки, связанные с ограниченной доступностью пересаженного материала и низкой биологической совместимостью с организмом человека.

Альтернативой может служить создание материалов на основе биополимеров — таким образом будет достигнута достаточная биосовместимость с организмом человека, а также решена проблема доступности. Стоит отметить, что биополимеры животного происхождения способны переносить инфекции из организма животного в организм человека, а синтетические биополимеры не обладают достаточной биологической совместимостью. Таким образом становится очевидно, что использование биополимеров растительного происхождения было бы оптимально для данных целей. В данной работе в качестве биополимера растительного происхождения был использован альгинат натрия.

Известно, что кожный покров состоит из двух основных слоёв — эпидермиса и дермы. Тканевый эквивалент для эффективного лечения должен обладать свойствами обоих слоёв, что подразумевает двухслойность такого материала.