

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



Оценка матричного эффекта проводилась на нижнем (L) и верхнем (H) уровнях концентрации в плазме: 0,060 мкг/мл и 0,960 мкг/мл — для ASA; 0,600 мкг/мл и 9,600 мкг/мл — для SA, соответственно. Значения матричного фактора (MF) для ASA и dASA меньше единицы, что указывает на подавление ионизации аналита компонентами матрицы. При оценке влияния MF на ионизацию SA и dSA отмечена тенденция близости значения к единице, что говорит о меньшем подавлении ионизации, чем в случае ASA. Кроме того, на нижнем уровне концентрации наблюдается небольшое улучшение ионизации SA. Согласно требованиям, установленным Решением Совета ЕврАзЭС № 85, нормализованный матричный фактор (NMF) не должен отличаться от единицы более чем на 15 %, коэффициент вариации (CV) для NMF не может быть больше 15 %. Результаты теста удовлетворяют критериям приемлемости и представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты валидационного теста «Матричный эффект»

Показатель / Уровень концентрации	MF ASA	MF dASA	NMF	CV NMF (%)	MF SA	MF dSA	NMF	CV NMF (%)
Нижний (L)	0,748	0,655	1,142	4,76	1,058	0,920	1,150	3,57
Верхний (H)	0,781	0,699	1,117	5,53	0,891	0,799	1,115	8,96

Разработанная аналитическая методика количественного определения ASA и SA в плазме крови человека методом ВЭЖХ-МС/МС является валидной по показателю «Матричный эффект».

ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В АМОРФНОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

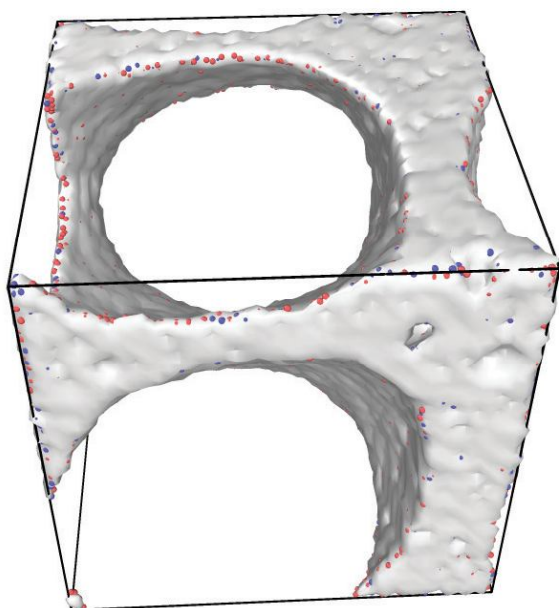
Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Пористые материалы являются перспективным направлением развития вследствие большого количества возможных приложений: костные имплантаты, гасители ударных воздействий, катализаторы, ячейки хранения водородного топлива, датчики дыма.

Одним из ключевых факторов, влияющих на конечные характеристики материала, является его пористость. Не менее важным является тип получаемых пор, например, наличие открытых или закрытых пор, а также структура твердой матрицы, которая может быть кристаллической или аморфной.

В настоящей работе демонстрируется возможность синтеза аморфного пористого нитинола с помощью методов молекулярной динамики.



Синтез пористого нитинола производится добавлением аргона в качестве порообразователя. Обнаруживается, что характер зависимости пористости нитинола от концентрации газа при различных температурах нагрева слабо изменяется, при этом максимальная пористость составляет 50 процентов. В отдельных случаях пористость может достигать 70 процентов. При таких больших значениях пористости поры являются открытыми.

Полученные результаты указывают на возможность экспериментального синтеза аморфного пористого нитинола. Результаты работы могут быть использованы применительно к улучшению существующих технологий, требующих долговечности и прочности пористых материалов.

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

Рис. 1. Образец пористого нитинола. Пористость равна 50 процентам. Красные и синие точки — атомы никеля и титана соответственно. Серым обозначена поверхность материала.