

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



## ДИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕТАБОЛИТОВ И КРИВАЯ BOLD ОТВЕТА НА КОРОТКИЙ ЗРИТЕЛЬНЫЙ СТИМУЛ, ИЗМЕРЕННЫЕ ПРИ ПОМОЩИ 1H-MPC

Яковлев А.Н.<sup>1,2,3</sup>, Грицкова А.В.<sup>4</sup>, Ублинский М.В.<sup>1,2</sup>,  
Манжурцев А.В.<sup>1,2,4</sup>, Ахадов Т.А.<sup>1,4</sup>, Семенова Н.А.<sup>1,2,3,4</sup>

<sup>1</sup>Научно-исследовательский институт неотложной детской хирургии и травматологии

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

<sup>3</sup>Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

<sup>4</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Глутамат (Glu) и  $\gamma$ -аминоасляная кислота (ГАМК) являются основными нейромедиаторами (возбуждающим и тормозным, соответственно). В исследованиях с использованием единичного стимула изменение Glu в коротком периоде времени связано с выпуском нейромедиатора из везикул, так как метаболические процессы имеют недостаточную скорость. Косвенным подтверждением является быстрое заполнение везикул нейромедиатором: характерное время процесса от 1 до 20 с. В работах с использованием длительного стимула (от 30 с) изменения, в основном, связывают с метаболизмом. К настоящему времени известно, что средний уровень ГАМК в ответ на стимуляцию снижается. Поскольку ГАМК также является нейромедиатором и упакован в везикулы, при вовлечении тормозных процессов в обработку зрительного стимула, ожидается увеличение интенсивности ЯМР сигнала ГАМК в коротком периоде. Последующая кинетика будет характеризовать возвращение ГАМК в везикулы.

Цель данной работы при помощи 1H-MPC измерить динамику ГАМК в ответ на короткий зрительный стимул. МРТ и протонная MPC выполнены на 3T томографе Philips Achieva dStream. В исследовании приняло участие 33 здоровых волонтера (13 мужчин; 22.7±2.3 лет). Для зрительной активации использовалась мерцающая с частотой 8 Гц шахматная доска в блоках (3с — стимуляция, 13.5s — черный экран; 15 раз для фМРТ и 40 — MPC). фМРТ-изображения получены при помощи GE EPI со следующими параметрами TR/TE = 3000/40 мс, угол отклонения = 90°, разрешение = 2.4×2.4 мм, толщина среза = 4 мм, число срезов = 30 (83 накопления). Спектры получены при помощи импульсной последовательности MEGA-PRESS (TR/TE = 1500/68мс, NSA = 802, 30×40×25мм) и локализованы в активированной области зрительной коры. Ширина линии и высота сигналов метаболитов определена из аппроксимации резонансных линий Cr (3 м.д.) и NAA (2 м.д.). Количественная обработка спектров выполнена при помощи LCmodel.

Апостериорный тест Даннета выявил статистически значимые изменения ширины линии и высот резонансных линий Cr и NAA. Ширины линий этих метаболитов уменьшаются, а высоты — увеличиваются, причем максимальное изменение наблюдается на 6-ой секунде. Статистически значимых изменений уровней Glu и ГАМК не выявлено.

Наше исследование демонстрирует применимость протонной MPC для измерения BOLD-ответа, в том числе и его временных характеристик, в группе испытуемых. Данное изменение показывает преимущество использования MPC в сопоставлении нейронной активности (при помощи BOLD-эффекта) и метаболических уровней.

## ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Яруллин Д.Т., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский Федеральный Университет

В настоящее время, несмотря на значительное количество исследований, посвященных кинетике кристаллизации, поведение некоторых кинетических характеристик остается малоизученным. Так, например, кинетический фактор кристаллизации (скорость пристегивания частиц к зародышу) был исследован лишь вблизи критического размера зародышей. Недоступность исследований в области сверхкритических размеров обусловлена отсутствием подходящих симуляционных методов. В настоящей работе будет представлен оригинальный метод оценки скорости пристегивания, позволяющий производить оценки в области суб- и сверхкритических зародышей.

В качестве исследуемой системы рассматривается однокомпонентная система Леннард-Джонса, состоящая из 13500 частиц, расположенных в кубической ячейке моделирования с параметрами  $Lx \approx Ly \approx Lz \approx 15\sigma$ . Кристаллизация системы достигается путем её быстрого охлаждения до температуры  $0.5 \epsilon/k_B$  при постоянном давлении  $p=2.0 \epsilon/\sigma^3$ , что соответствует переохлаждению  $\Delta T/T_m \approx 43\%$ . Идентификация упорядоченных структур проводится в ходе кластерного анализа, основанного на расчете параметров локального ориентационного порядка. Скорость пристегивания оценивается на основе информации о количестве частиц, пристегивающихся к «первому» зародышу системы за временной интервал  $\Delta t$ , совпадающий с шагом интегрирования уравнений движения.

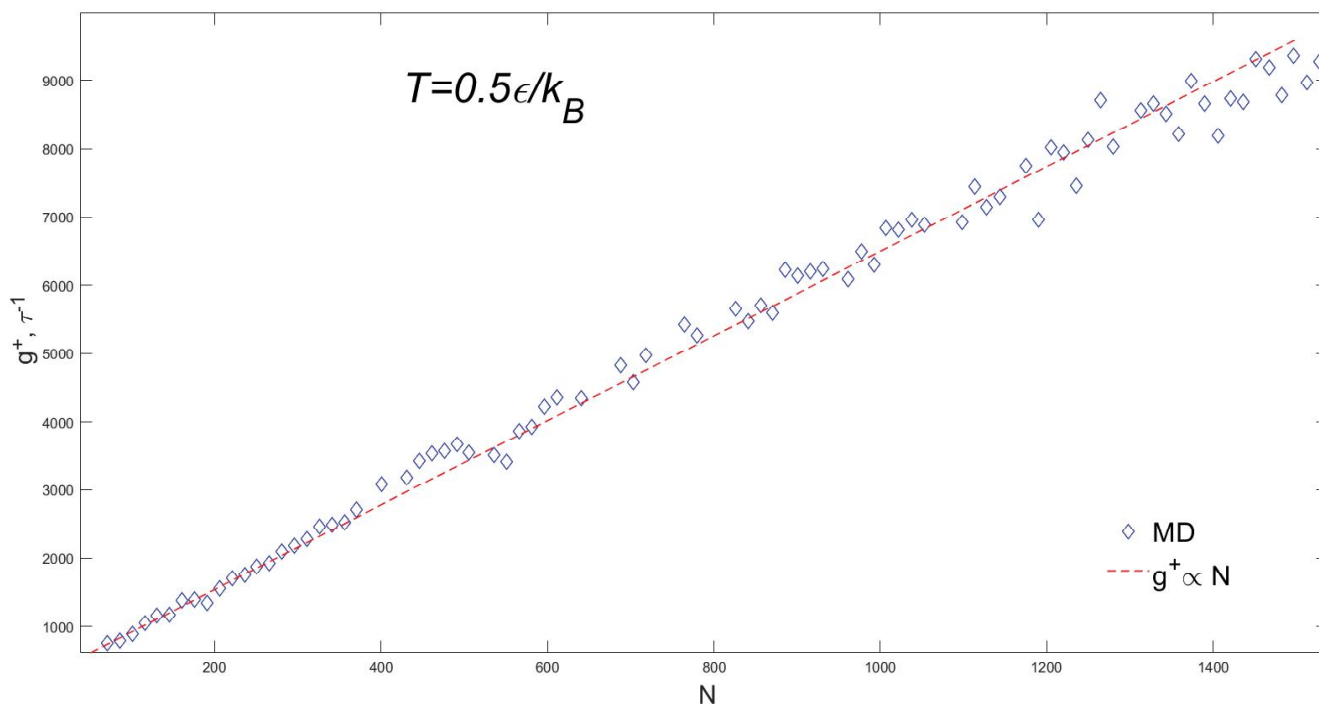


Рис. 1. Скорость пристёгивания  $g^+$  как функция от размера «первого» зародыша системы.

На рисунке 1 представлены результаты оценки скорости пристёгивания как функции от размера «первого» зародыша системы. Как видно из рисунка, поведение  $N$ -зависимости скорости пристёгивания с высокой точностью может быть описано линейной функцией  $g^+ \propto N$ .

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Проект № 20-1-2-38-3).

### ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ АБСОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА, ПОЛИГИДРОКСИБУТИРАТА И ХИТОЗАНА

Яхина А.Р., Жорина Л.А., Роговина С.З., Иорданский А.Л.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Постоянно увеличивающееся с ростом промышленных отходов содержание токсичных тяжелых металлов в сточных водах представляет собой угрозу для здоровья человека. Среди различных металлов, встречающихся в водоемах, наиболее распространенными являются ионы железа и хрома, эффективное удаление которых требует создания новых технологий.

Абсорбция ионов металлов с использованием различных биополимеров, способных к биоразложению после окончания срока использования, представляет собой один из наиболее перспективных методов очистки сточных вод. В качестве эффективных селективных абсорбентов большой интерес представляют композиции на основе биополимеров, которые совмещают в себе высокие сорбционные характеристики, хорошие механические параметры, а также биоразлагаемость. К таким полимерным композициям относятся, в частности, абсорбенты на основе полисахарида хитозана, и полиэфиры полилактида (ПЛА) и полигидроксибутирата (ПГБ), синтезируемых из природного сырья.

Смешение исходных полимеров проводили в растворе с последующим получением тройных пленочных композиций ПЛА-ПГБ-хитозан. Для этого к растворам ПЛА и ПГБ в хлороформе при механическом перемешивании добавляли хитозан в виде порошка.

Полученные композиционные пленки помещали в водные растворы солей металлов железа и хрома различной концентрации и выдерживали в растворе в течение определенного времени. Теплофизические характеристики исходных полимеров и их смесей исследовали методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и термогравиметрического анализа (ТГА). Определены температуры и энтальпии фазовых переходов и рассчитана степень кристалличности образцов. Продемонстрировано, что наиболее заметные изменения тер-