



Физика  
Водных  
Растворов

# СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**VII ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ  
ФИЗИКА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ**

18-20 ноября 2024 г.

УДК 532. 5; 532. 7; 536. 71; 53.091; 53.098; 544.03  
ББК 253.3; 341.1; 353.1; 365.3; 365.5

## **ОРГАНИЗАТОР КОНФЕРЕНЦИИ**

**Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук**

### **Председатель конференции**

**И.А. Щербаков**, академик РАН, ИОФ РАН

### **ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

#### **Сопредседатели**

**Н.В. Пеньков**, ФИЦ ПНЦБИ РАН

**Г.А. Ляхов**, ИОФ РАН

**М.Х. Ашуров**, ГНПО "Фонон", АН Республики Узбекистан

**Н.Ф. Бункин**, МГТУ им. Баумана

**С.В. Гудков**, ИОФ РАН

**В.И. Лобышев**, МГУ им. М.В. Ломоносова

**В.Н. Очкин**, ФИАН

**С.М. Першин**, ИОФ РАН

**Д.Л. Тытик**, ИФХЭ РАН

**Е.В. Успенская**, РУДН

**Д.Н. Чаусов**, ИОФ РАН

### **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

#### **Председатель**

**С.В. Гарнов**, член-корреспондент РАН, ИОФ РАН

**В.И. Пустовой**, ИОФ РАН

**Н.П. Хакамова**, ИОФ РАН

**Н.Л. Истомина**, ОФН РАН

Тезисы докладов 7-й всероссийской конференции «Физика водных растворов».  
– 2024. – 120 с.

В сборнике представлены тезисы докладов конференции, посвященные:

- Модели строения и химической кинетики водных растворов
- Водные растворы в биологических системах
- Методы исследования водных растворов
- Водные растворы в материаловедении
- Водные растворы в фармации

Тезисы конференции размещены на сайте конференции <https://physwatsol.ru/>

ISBN 978-5-5057004-4-4



9 785605 200444

© ООО "МЕСОЛ", 2024

© Институт общей физики им. А.М. Прохорова  
Российской академии наук, 2024



Физика  
Водных  
Растворов

# СБОРНИК ТЕЗИСОВ

## VII ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ ФИЗИКА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ



Конференция проходит  
при поддержке РАН

18-20 ноября 2024 г.  
Москва

## Содержание

### Пленарные доклады

|                |   |
|----------------|---|
| <i>Plenary</i> | 5 |
|----------------|---|

### Водные растворы в биологических системах

|                                                |    |
|------------------------------------------------|----|
| <i>Aqueous solutions in biological systems</i> | 12 |
| Приглашенные доклады                           | 13 |
| Устные доклады                                 | 24 |
| Постерный доклад                               | 37 |

### Водные растворы в материаловедении

|                                               |    |
|-----------------------------------------------|----|
| <i>Aqueous solutions in materials science</i> | 39 |
| Приглашенные доклады                          | 40 |
| Устные доклады                                | 43 |
| Постерный доклад                              | 53 |

### Водные растворы в фармации

|                                    |    |
|------------------------------------|----|
| <i>Water solutions in pharmacy</i> | 56 |
| Приглашенные доклады               | 57 |
| Устные доклады                     | 63 |
| Постерный доклад                   | 68 |

### Методы исследования водных растворов

|                                               |    |
|-----------------------------------------------|----|
| <i>Methods for study of aqueous solutions</i> | 74 |
| Приглашенные доклады                          | 75 |
| Устные доклады                                | 83 |
| Постерный доклад                              | 94 |

### Модели строения и химической кинетики водных растворов

|                                               |     |
|-----------------------------------------------|-----|
| <i>Aqueous solutions in materials science</i> | 100 |
| Приглашенные доклады                          | 101 |
| Устные доклады                                | 109 |

|                     |     |
|---------------------|-----|
| Авторский указатель | 118 |
|---------------------|-----|

# ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ



# WATER AND ITS DIELECTRIC SIGNATURE. NEW MARKER FOR BIOSENSING

Feldman Y.D.

*The Hebrew University of Jerusalem, Institute of Applied Physics,  
Edmond J. Safra Campus, Jerusalem 91904, Israel  
e-mail: yurif@mail.huji.ac.il*

Whenever water molecules interact with either dipolar or charged systems, the main water dielectric relaxation peak broadens. If a solute is dipolar in nature, new solute-water clusters are created due to dipole-dipole interactions. It leads to the “red shift” of the dielectric loss maximum frequency. In the case of ionic solutions, another cluster structure develops, due to dipole-charge interactions and a “blue shift” is observed. In the general case when a solute molecule has both charged and dipole groups, the dielectric loss maximum demonstrates a “red” or “blue” shift, depending on the entity concentration. In all aqueous solutions, the water-solute interactions can be considered as dipole-matrix interactions in which water is the dipole subsystem. The phenomenological 3D trajectories approach was applied to the results of isothermal dielectric measurements of different concentrations of the following aqueous solutions: Hydrocarbons, NaCl and KCl, AMP and ATP, Amino Acids and proteins [1-5]. The parameters of the main water peak define a trajectory that can clarify the nature and rate, at which water interacts with the solute. In this paper, we extend this approach from comparatively simple solutions to the complexity of Red Blood Cells (RBC) suspensions by monitoring the RBC cytoplasm under different external conditions [6,7]. Dielectric measurements of RBC suspensions in the frequency region of 100 MHz to 50 GHz as a function of aging or external glucose concentration also reveal a distinct time point or glucose concentration after which the spectra are radically changed. The conclusion is that the dielectric response of the cytoplasm in microwaves is due to the water therein and its interaction with physiological active components in cytoplasm. This opens a window of opportunity to exploit this for the non-invasive monitoring of diabetes or to non-invasive control of the quality of Stored RBC in a Blood bank in order to manage the inventory.

## References:

1. E. Levy, A. Puzenko, U. Kaatz, P. Ben Ishai, Y. Feldman, Dielectric spectra broadening as the signature of dipole-matrix interaction. I. Water in nonionic solutions, *J. Chem. Phys.*, (2012) **136**, 114502.
- 2 E. Levy, A. Puzenko, U. Kaatz, P. Ben Ishai, Y. Feldman, Dielectric spectra broadening as the signature of dipole-matrix interaction. II. Water in ionic solutions *J. Chem. Phys.*, (2012) **136**, 114503.
3. A. Puzenko, E. Levy, A. Shendrik, M.S. Talary, A. Caduff, Y. Feldman, Dielectric spectra broadening as a signature for dipole-matrix interaction. III. Water in adenosine monophosphate/adenosine-5'-triphosphate solutions, *The Journal of chemical physics*, (2012) **137**, 194502.
4. E. Levy, S. Cervený, I. Ermolina, A. Puzenko, Y. Feldman, Dielectric spectra broadening as a signature for dipole-matrix interaction. IV. Water in amino acids solutions, *J. Chem. Phys.*, (2014) **140** 135104.
5. L. Latypova, A. Puzenko, E. Levy, Yuri Feldman, “Dielectric spectra broadening as a signature for dipole-matrix interactions. V. Water in protein solutions” *J. Chem. Phys.* (2020) Vol. 153, 045102-8 <https://doi.org/10.1063/5.0016437>
6. E. Levy, G. Barshtein, L. Livshitz, P. Ben Ishai and Yu. Feldman, “The Vitality of Human RBC and its connection to cytoplasmic water: I. The glucose concentration influence” *Journal Physical Chemistry B* (2016), **120**, 10214.
7. E. Levy, M. David, G. Barshtein, S. Yedgar, L. Livshits, P. Ben Ishai, and Yu. Feldman, “Dielectric Response of Cytoplasmic Water and Its Connection to the Vitality of Human Red Blood Cells: II. The influence of storage”, *Journal Physical Chemistry B* (2017), **121**, 5273.



# ЗАГАДКИ ВОДЫ И ДРУГИХ АНОМАЛЬНЫХ ЖИДКОСТЕЙ: «МЕДЛЕННЫЙ» ЗВУК, РЕЛАКСИРУЮЩИЕ СЖИМАЕМОСТЬ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ

[Бражкин В.В.](#)

*Институт физики высоких давлений РАН,  
Калужское шоссе 14, г. Троицк, г. Москва 108840, Россия  
e-mail: [brazhkin@hppi.troitsk.ru](mailto:brazhkin@hppi.troitsk.ru)*

Проведен анализ причин существования «быстрого» звука на терагерцовых частотах в различных жидкостях. Показано, что величина скорости «быстрого» звука хорошо описывается стандартной формулой из теории упругости:  $VI = ((B(\omega) + 4/3 G(\omega))/\rho)^{1/2}$ , где  $\rho$  – плотность жидкости, а  $B(\omega)$  и  $G(\omega)$  – модули объемного сжатия и сдвига на соответствующих частотах. В «нормальных» жидкостях превышение значения скорости «быстрого» звука над скоростью обычного звука составляет 10-20%, при этом оно почти полностью определяется вкладом модуля сдвига  $G(\omega)$  на высоких частотах и обнуляется на линии Френкеля. В то же время в таких жидкостях (далее называемых «аномальными»), таких как вода, расплав теллура и его соединений, огромное (50-150%) превышение скорости «быстрого» звука над скоростью «нормального» связано, главным образом, с сильной частотной зависимостью модуля объемного сжатия  $B(\omega)$ . Аномально низкие значения релаксирующего модуля сжатия ранее были изучены нами для многих оксидных и халькогенидных стекол в области размытых фазовых превращений под давлением. В аномальных жидкостях также происходят размытые фазовые превращения в широкой области температур и давлений, что приводит к резкому снижению модулей сжатия и скоростей звука. Таким образом, рекордно большая разница между скоростями «быстрого» и «нормального» звука в аномальных жидкостях связана не с аномально «быстрым» звуком, а с тем, что «нормальный» звук в таких жидкостях является аномально «медленным», а модули сжатия – аномально малыми. Ультразвуковые исследования аморфных льдов  $H_2O$  низкой плотности (low density amorphous - lda) и высокой плотности (high density amorphous - hda) показывают, что их модуль сжатия, действительно, в 4-5 раз превышает модуль сжатия воды. Размытые фазовые превращения в воде и расплаве теллура приводят также к аномально большим значениям теплоемкости – в 1.5-2 раза выше, чем у «нормальных» жидкостей, т.е. для аномальных жидкостей характерны не только аномальное (немонотонное) поведение физических величин, но и их аномальные абсолютные значения для большинства доступных методик измерения. Аналогичное аномальное увеличение сжимаемости и теплоемкости наблюдается, как известно, для всех флюидов в близкой окрестности критической точки жидкость-газ. На терагерцовых частотах при этом наблюдается аномально «быстрый» звук, что также связано с резким ростом величины модуля сжатия  $B(\omega)$  на высоких частотах. Вместе с тем, для аномальных жидкостей и стекол в области размытых фазовых превращений высокая сжимаемость и теплоемкость, как и большое превышение «быстрого» звука над «нормальным», не обязательно связаны с близостью критических точек и имеют место при любом сценарии размытого фазового превращения.

# О ПРИРОДЕ ФИЗИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ИЗМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ В РЕАКЦИЯХ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Евстигнеев М.П.

*Институт перспективных исследований, Севастопольский государственный университет,  
ул. Университетская, 33, Севастополь, 299053, Российская Федерация  
e-mail: [evstigneev@mail.sevsu.ru](mailto:evstigneev@mail.sevsu.ru)*

Обсуждается современная проблематика термодинамического анализа реакций нековалентного комплексообразования в водной среде и возможность декомпозиции вклада различных физических факторов в экспериментально измеряемые термодинамические потенциалы на уровнях энергии Гиббса, энтальпии, энтропии и теплоемкости [1, 2]. На примере различных классов биологически-важных взаимодействий – лиганд-ДНК/РНК, образование стэкинг-комплексов малых молекул, взаимодействия хозяин-гость – демонстрируется неполнота существующей системы знаний в части роли водного окружения. Впервые обсуждается возможность неэмпирического разделения полярного и неполярного вкладов в изменение теплоемкости и приводится обоснование природы полярного вклада [3].

## Литература:

- [1] M. Evstigneev and A. Shestopalova, Application of Computational Techniques in Pharmacy and Medicine (Springer Netherlands), Structure, Thermodynamics and Energetics of Drug-DNA Interactions: Computer Modeling and Experiment, (2014).
- [2] V. Kostjukov and M. Evstigneev, The energetics of small molecules binding with nucleic acids, J. Chem. Thermodyn., 139, 105887, (2019).
- [3] M. Evstigneev and A. Lantushenko, The fundamental origin of polar and non-polar contributions to heat capacity changes on hydrophobic hydration in aqueous solution, Phys. Chem. Chem. Phys, submitted, (2024).



## ФАКТОРЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ КОНТИНЕНТАЛЬНЫХ ВОД

[Крылов А.В.](#)

*Институт биологии внутренних вод им. И.Д. Папанина РАН,  
152742, Россия, Ярославская обл., Некоузский р-н, пос. Борок*

Физические и химические свойства природных вод формируют качество среды и определяют состав, структуру и функционирование сообществ гидробионтов. Ключевую роль в состоянии континентальных вод играют диффузные и точечные поступления биогенных и органических веществ, изменение климата, зарегулирование стока рек, изъятие биологических ресурсов. Скорость и направление трансформации экологического состояния континентальных вод определяются типом водного объекта, его морфометрическими характеристиками, трофическим статусом.

На основе многолетних наблюдений на разнотипных водных объектах представлены последствия влияния зарегулирования, избыточного поступления органических и биогенных веществ при антропогенном и зоогенном воздействии, глобального изменения климата и загрязнения токсическими веществами на видовой состав и количественные характеристики внутренних и контурных сообществ гидробионтов, а также на экологическое состояние водоемов и водотоков разных природных зон.

# МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ПУТИ РАЗРАБОТКИ БИОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КЛАССИФИКАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЯРНО-КЛАСТЕРНЫХ СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕСТРОЕК ВОДЫ

Рахманин Ю.А.

*НИИЭЧиГОС им. А.Н.Сысина ФГБУ «ЦСП» ФМБА России,  
ФБУН «ФНЦГ им. Ф.Ф.Эрисмана» Роспотребнадзора,  
г. Москва, Мытищи Моск. обл.*

Вода является самым массивным универсальным по форме (жидкой, твердой, газообразной и даже, по Джеральду Поллаку, в виде холодной электронной плазмы) и загадочным объектом материального мира, что в медико-биологическом отношении определяет необходимость разработки ее биоэнергетических классификационных характеристик различных молекулярно-кластерных структурных перестроек.

К наиболее простым ее классификациям, связанным, в основном, с местом ее нахождения и солевым составом, относятся:

- по месту происхождения: поверхностная (речная, озерная, болотная, морская), подземная (грунтовая, артезианская, родниковая, инфильтрационная), воздушная (туманная, влажностная, облачная, тучная, дождевая, градовая, снежная);
- по уровню минерализации: пресная (дистиллированная, питьевая), минеральная (солончатая, соленая, рассольная);
- по температуре: холодная, термальная;
- по лечебному эффекту: лечебно-столовая, лечебная;
- по величине pH: кислая, нейтральная, щелочная;
- по форме образования кристаллов при замораживании воды и по соотношению 8 видов полиморфных льдов (пентамеров Вольфафена) при ее размораживании;
- по форме нахождения в живых объектах и окружающей среды: свободная и связанная;
- по показателям радиоактивности ( $\alpha$ - объемной,  $\beta$ - объемной) с детальной при необходимости расшифровкой конкретного нормированного радиоизотопного состава, в том числе по содержанию радона;

Развитие исследований в области биофизики воды определяет необходимость научного обоснования ее новых, более сложных классификаций с учетом ее различного водородно-кислородного изотопного состава, размерных и энергетических молекулярно-кластерных величин, активности акцептерно-донорных электронных обменных процессов и величин окислительно-восстановительного потенциала.

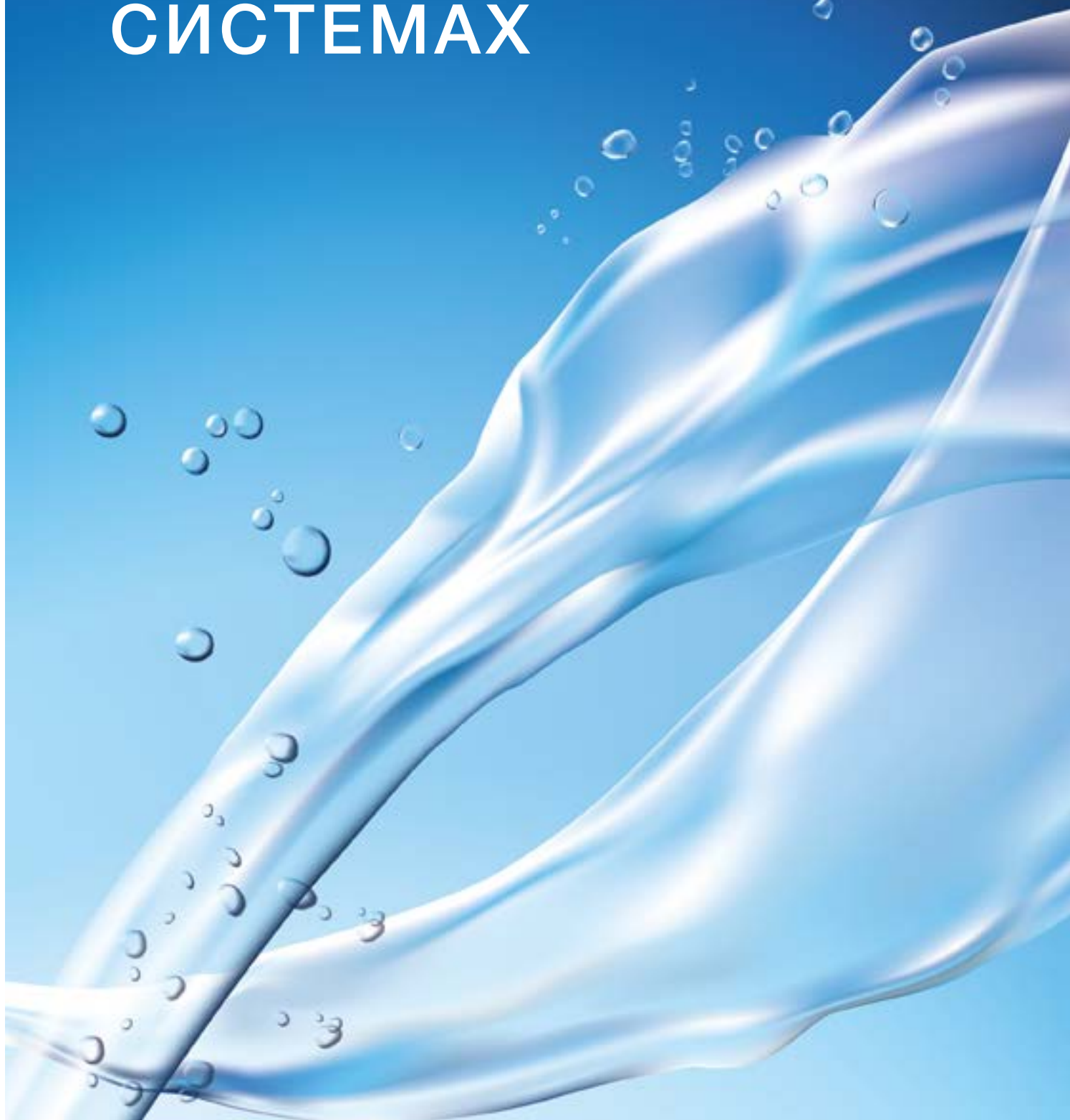
В наших исследованиях по испытанию более 20 физических методов воздействия на воду были апробированы следующие методические приемы для определения классификационных характеристик различных образцов воды:

- Австрийская методика цветового разложения светового луча, пропускаемого через воду, где по изменению долей цветового спектра определяется направленность отслеживаемого биологического эффекта;
- Оригинальная (В.К. Кондратов) методика определения соотношения полуплощадей валентных и деформационных колебаний, выявляемых при инфракрасной спектроскопии водных образцов, применение которой позволило в результате исследования более 50 различных вод, определить такие классификационные показатели, как протонированная вода, электронно-насыщенная вода, зарядовый баланс, по соотношению коэффициентов трансформации полос валентных и деформационных колебаний образцов воды и изменению ее биологической активности;
- Оригинальная (Стехин А.А., Яковлева Г.В.) система структурно-энергетических показателей качества воды: биокаталитическая активность (концентрация  $\text{НО}_{-2}$ , мг/л), окислительно-восстановительный потенциал (Eh, мВ-), термодинамический показатель (динамическая вязкость ( $\mu$  сантипуаз), структурированность ( $q$  ср, %) и энергетическое распределение структурированной фазы ( $\Delta q$ , отн.ед.), позволивший разработать примерные величины низких, средних, высоких и экстремально высоких уровней биоэнергетической активности питьевой воды;

- Метод ядерно-магнитного резонанса для определения водородно-кислородного изотопного состава воды, в том числе содержания тяжелого изотопа водорода-дейтерия в диапазоне 10-300 ppm, позволивший при сопоставлении различного содержания дейтерия в воде с ее биологическими эффектами выделить параметры повышенной биологической активности «легкой» воды.

Результаты проведенных исследований показали, что примененные методические подходы к анализу молекулярно-кластерных перестроек воды, подвергаемой физическим способам ее обработки, позволяют выявить определенные взаимосвязи этих перестроек с той или иной формой активации биологической активности обработанной ими воды, что свидетельствует о перспективности развития дальнейших исследований в области квантовой физики явлений и биофизики воды в направлении поиска путей, средств и методов продления активного здорового долголетия живых организмов.

# ВОДНЫЕ РАСТВОРЫ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ



Приглашенный доклад

# MICROSCOPICALLY DIVERSE DYNAMICS OF BIOLOGICAL WATER BY THZ SPECTROSCOPY

Yao Xu<sup>a</sup>, Martina Havenith<sup>b</sup><sup>a</sup>*Artivla Therapeutics, Longcheng Str., 518172 Shenzhen, China*<sup>b</sup>*Lehrstuhl für Physikalische Chemie II, Ruhr Universität, 44801 Bochum, Germany  
e-mail: yao.xu@rub.de Martina.Havenith@rub.de*

The influence of water on the dynamics of biomolecules is an important topic of research. THz spectroscopy enables the measurement of small changes in the water network dynamics at the biomolecule-water interface. Recent applications of the technique have witnessed significant progress in various scenarios, including aqueous solutions, molecular crowding, self-assembly, electron transfer and phase separation, unraveling the interplay between structure, dynamics, and thermodynamics of biological water. I will highlight and discuss a few interesting applications with my personal insights into the microscopically diverse behavior of water.

**References:**

- [1] Mukherjee, S.; Ramos, S.; Pezzotti, S.; Kalarikkal, A.; Prass, T. M.; Galazzo, L.; Gendreizig, D.; Barbosa, N.; Bordignon, E.; Havenith, M.; Schäfer, L. V. Entropy Tug-of-War Determines Solvent Effects in the Liquid–Liquid Phase Separation of a Globular Protein. *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, 15 (15), 4047–4055.
- [2] Mahanta, D. D.; Brown, D. R.; Webber, T.; Pezzotti, S.; Schwaab, G.; Han, S.; Shell, M. S.; Havenith, M. Bridging the Gap in Cryopreservation Mechanism: Unraveling the Interplay between Structure, Dynamics, and Thermodynamics in Cryoprotectant Aqueous Solutions. *J. Phys. Chem. B* 2024, 128 (15), 3720–3731.
- [3] Novelli, F.; Chen, K.; Buchmann, A.; Ockelmann, T.; Hoberg, C.; Head-Gordon, T.; Havenith, M. The Birth and Evolution of Solvated Electrons in the Water. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2023, 120 (8), e2216480120.

Приглашенный доклад

# ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЙ ВОДЫ И МОДИФИКАЦИЯ УЛЬТРАСТРУКТУРЫ В КОМПАРТМЕНТАХ РАСТИТЕЛЬНОЙ КЛЕТКИ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И ОСМОТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЯХ

Баранова Е.Н.

<sup>1</sup> *Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Сельскохозяйственной Биотехнологии,  
ул. Тимирязевская, 42, 127555, Москва, Россия;*

<sup>2</sup> *Главный ботанический сад им. Н.В. Цицина РАН, ул. Ботаническая, 4, 127276, Москва, Россия;*

<sup>3</sup> *АНО Институт стратегий развития, ул. Краснопролетарская, д. 16, 127473, Москва, Россия,  
e-mail: greenpro2007 @ rambler.ru*

Вода в биологических системах может находиться в различных агрегатных состояниях. Однако в живых клетках она обычно представлена в виде растворов с разной степенью плотности, содержащих ионы, инертные соединения, а также газы в различных компартментах. Одной из критически важных особенностей сохранения жизнеспособности и обратимости состояний биологических объектов является регуляция состояния активных форм кислорода и объём свободной воды. При этом такие абиотические факторы как температура и давление играют критически важную роль в сохранении компартментализации и функций мембран, которые разделяют растворы с различающимися свойствами. Это необходимо для осуществления энергетических реакций накопления и выработки энергии и преобразования ее в глюкозу, и далее, в другие сахара. Этот процесс осуществляется высшими растениями в результате фотосинтеза, и для его осуществления необходимо формирование специализированных мембранных систем, где происходит функционирование фотосистем I и II. Агрегатное состояние в виде кристаллов может приводить к механическому необратимому повреждению мембран. Это характерно для низких температур и сопровождается или предворяется появлением свободной воды. Повреждение мембран, связанное с изменением структуры и свойств (изменением их текучести), может быть вызвано изменениями соотношения водных оболочек и состояния связанной воды. Обратимость этого процесса непосредственно влияет на жизнеспособность и на процессы как запасаения энергии на основе ламеллярных и гранальных тилакоидов хлоропластов, так и потребления энергии, заключенной в химических связях соединений, которая происходит в кристах митохондрий. Изменение температуры характеризуется быстрым изменением физических состояний воды и водных растворов. При этом состав, плотность, pH жидких фракций водных растворов может существенно различаться и представлять собою множество вариантов физических состояний (гель, суспензия, монослой, свободная вода) и биологических функций. Жизнеспособность сохраняется только в случае целостности мембранной системы компартментов, сохранения адресного целевого обмена между различными компартментами и субкомпартментами, что подразумевает постоянный обмен водными растворами, ионами, молекулами, и сложную регуляцию состояния молекул и молекулярных комплексов. Динамические состояния могут сопровождать любые процессы первичного и вторичного метаболизма, такие как дыхание, фотосинтез, ферментативные реакции. Перемещение водных растворов между клетками различных тканей, их отдельными компартментами и субкомпартментами обеспечивает все процессы перемещения жидкостей, как на длинные дистанции (от всасывания до транспирации и гуттации через листья и их специализированные структуры), так и на средние и короткие дистанции. Высокая степень обратимости переходных состояний является свойством клетки как живой системы.



Приглашенный доклад

# ЭФФЕКТЫ ВОДЫ, АНАЛОГИЧНОЙ МАРСИАНСКОЙ ПО ИЗОТОПНОМУ СОСТАВУ, НА ОРГАНИЗМ МЛЕКОПИТАЮЩИХ

Джимак С.С.,<sup>1,2</sup> Лясота О.М.,<sup>2</sup> Козлова Е.А.,<sup>1</sup> Рубайло А.Д.,<sup>1</sup> Козин С.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»  
350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149

<sup>2</sup> ФГБУН ФИЦ «Южный научный центр РАН», 344006, г. Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41  
e-mail: jimack@mail.ru

На Марсе содержание дейтерия в ледниках на полюсах, на вершинах гор и экваторе имеют гораздо большую разницу: ~155 – ~1246 ppm [1]. Ранее нами было установлено, что при потреблении воды с содержанием дейтерия 750 ppm, наблюдается усиление антиоксидантного потенциала в тканях печени и в плазме крови лабораторных животных [2]. Известна теория изотопного резонанса и влияние среды с содержанием 370 ppm по дейтерию на активность микроорганизмов [3]. Однако исследования влияния на организм млекопитающих воды, соответствующей по дейтерию верхнему марсианскому диапазону, ранее не проводились. На сегодняшний день известно, что колебания концентрации дейтерия в питьевой воде в небольшом диапазоне могут приводить к активационным (за счет реализации реакций адаптации организма) и ингибирующим эффектам [4-6]. В работе представлены результаты экспериментов, доказывающих развитие стрессовой реакции на фоне потребления питьевого рациона с содержанием дейтерия 1200 ppm и формирование перекрестной адаптации в тканях головного мозга к действию иммобилизационного стресса. Было установлено, что потребление лабораторными животными питьевого рациона с концентрацией дейтерия 1200 ppm приводит к накоплению дейтерия в крови и тканях, а скорость изотопного D/H обмена максимальна в первую неделю и замедляется при более продолжительном воздействии. При этом в первые две недели наблюдается нарушение редокс равновесия в крови и тканях головного мозга в сторону усиления продукции свободных радикалов, которое выравнивается в четвертую неделю эксперимента. По мере поступления дейтерия, в организме происходит активация антиоксидантной системы, а также усиление экспрессии провоспалительных молекул в первые три недели эксперимента. Эти процессы являются результатом компенсаторных реакций на дейтериевый стресс. На фоне стрессовой реакции, вызванной изменением содержания дейтерия в организме, возникают колебания лейкоцитарного и метаболического профиля крови лабораторных животных, а также численности микробиома кишечника.

Установлено, что длительное потребление утяжеленной дейтерием воды с концентрацией дейтерия 1200 ppm способствовало развитию перекрестной адаптации к действию иммобилизационного стресса. Таким образом, изменение изотопного D/H состава на фоне питьевого рациона с концентрацией дейтерия 1200 ppm приводит к развитию адаптационного синдрома и активации защитных механизмов к действию стресса иной природы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания ЮНЦ РАН №122020100351-9.*

## Литература:

- [1] G.L. Villanueva, M.J. Mumma, R.E. Novak, H.U. Kaufl, P. Hartogh, T. Encrenaz, M.D. Smith, Strong water isotopic anomalies in the martian atmosphere: Probing current and ancient reservoirs, *Science*, 348(6231), 218–221. (2015).
- [2] S.V. Kozin, O.M. Lyasota, A.A. Kravtsov, E.V. Chikhirzhina, V.A. Ivlev, K.A. Popov, A.A. Dorohova, V.V. Malyshko, A.V. Moiseev, A.V. Drozdov, S.S. Dzhimak, Shift of Prooxidant–Antioxidant Balance in Laboratory Animals at Five Times Higher Deuterium Content in Drinking Water // *Biophysics*. V. 68. N2, P. 289–294. (2023.). DOI: 10.31857/S0006302923020163
- [3] X. Xie, R.A. Zubarev, Isotopic Resonance Hypothesis: Experimental Verification by Escherichia coli Growth Measurements // *Scientific reports*. 5, 9215. (2015).
- [4] A. Kravtsov, S. Kozin, A. Basov, E. Butina, M. Baryshev, V. Malyshko, A. Moiseev, A. Elkina, S. Dzhimak, Reduction of deuterium level supports resistance of neurons to glucose deprivation and hypoxia: Study in cultures of neurons and on animals, *Molecules*, 27, 243, (2022).
- [5] A.A. Basov, L.V. Fedulova, M.G. Baryshev, S.S. Dzhimak, Deuterium-depleted water influence on the isotope 2H/1H regulation in body and individual adaptation, *Nutrients*, 11, 1903, (2019).
- [6] A.V. Syroeshkin, N.V. Antipova, A.V. Zlatska, I.A. Zlatskiy, M.D. Skylska, T.V. Grebennikova, V.V. Goncharuk, The effect of the deuterium depleted water on the biological activity of the eukaryotic cells, *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology*, 50, pp. 629–633, (2018).

Приглашенный доклад

# ЯДЕРНЫЙ СПИНОВЫЙ КАТАЛИЗ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ БИОСИСТЕМ: МАГНИТНО-ИЗОТОПНЫЕ ЭФФЕКТЫ В КЛЕТКАХ И БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МОТОРАХ

Кольтовер В.К.

ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН,  
Черноголовка, Московская область, Россия  
e-mail: koltover@icp.ac.ru

В физике и химии магнитные изотопные эффекты (МИЭ) давно известны [1]. Недавно были обнаружены МИЭ в живой природе. Кинетика адаптации клеток бактерий *E. coli* к питательной среде, обогащенной магнитным изотопом магния,  $^{25}\text{Mg}$ , идет существенно быстрее по сравнению со средой, обогащенной немагнитным  $^{25}\text{Mg}$  [2]. Обнаружены МИЭ в экспериментах с дрожжевыми клетками *S. cerevisiae*, обогащенными различными изотопами магния. Константа скорости пост-радиационного восстановления клеток, облученных рентгеновскими лучами или коротковолновым УФ излучением, в два раза выше в клетках, обогащенных  $^{25}\text{Mg}$ , по сравнению с клетками, обогащенными  $^{24}\text{Mg}$  [3].

Более того, каталитические эффекты магнитного изотопа  $^{25}\text{Mg}$  обнаружены в реакции гидролиза АТФ, катализируемой миозином - важнейшим молекулярным мотором клеточной биоэнергетики, использующим химическую энергию АТФ для выполнения механической работы. Скорость ферментативного гидролиза АТФ в среде с магнитным  $^{25}\text{Mg}$  в два раза выше, чем скорости той же реакции в средах с немагнитными  $^{24}\text{Mg}$  или  $^{26}\text{Mg}$ . Аналогичный эффект ядерного спинового катализа обнаружен в экспериментах с цинком в качестве кофактора миозина. Скорость ферментативного гидролиза АТФ в реакционной среде с магнитным изотопом,  $^{67}\text{Zn}$ , выше на 40-50% по сравнению со скоростями в средах с немагнитными изотопами,  $^{64}\text{Zn}$  или  $^{68}\text{Zn}$  [4].

МИЭ однозначно свидетельствует, что в химико-механическом процессе, катализируемом молекулярным мотором, имеется лимитирующая стадия, которая зависит от электронного спинового состояния реагентов, и эта стадия ускоряется ядерным спином магнитного изотопа [1]. Известно, что гидролиз АТФ, катализируемый молекулярным мотором, сопровождается значительной конформационной перестройкой макромолекулы. При этом имеют место дегидратация и регидратация аминокислотных групп. Между тем, существуют два изомера молекул воды, различающиеся по взаимной ориентации ядерных спинов водорода, а именно: *ortho*- $\text{H}_2\text{O}$  с параллельной ориентацией протонных спинов и *para*- $\text{H}_2\text{O}$  с антипараллельной ориентацией протонных спинов [5]. Имеются основания полагать, что молекулы *ortho*- $\text{H}_2\text{O}$  имеют преимущественное сродство к *L*-аминокислотам. Перемещение преимущественно связанных молекул *ortho*- $\text{H}_2\text{O}$  при конформационном превращении макромолекулы затруднено, а спин-вращательные взаимодействия протонов ( $I = 1/2$ ) слишком слабы, чтобы обеспечить должную эффективность *ortho-para* переходов. Магнитные  $^{25}\text{Mg}$  ( $I = 5/2$ ) и  $^{67}\text{Zn}$  ( $I = 5/2$ ) способны устранить спиновый запрет, обеспечивая необходимую скорость конверсии изомеров воды. Детальные механизмы ядерного спинового катализа в биомолекулярных моторах и перспективы применения стабильных магнитных изотопов в медицинской физике – задачи дальнейших исследований.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема АААА-А19-119071890015-5.

## Литература:

- [1] Я.Б. Зельдович, А.Л. Бучаченко, Е.Л. Франкевич. Магнитно-спиновые эффекты в химии и молекулярной физике. Успехи физ. наук, 155, 3-45 (1988).
- [2] Л.В. Авдеева, В.К. Кольтовер. Ядерный спинового катализ в живой природе. Вестн. Моск. ун-та, сер. 2 «Химия», 57, 145-153 (2016).
- [3] L.V. Avdeeva, T.A. Evstyukhina, V.K. Koltover, V.G. Korolev, Y.A. Kutlakhmedov. Recovery of the yeast cells from radiation injuries by means of the magnetic isotopes: new trend in anti-radiation biomedicine. Nucl. Phys. Atom. Energy, 20, 271-277 (2019).
- [4] В.К. Кольтовер, Р.Д. Лабынцева, В.К. Карандашев. Магнитно-изотопные эффекты магния и цинка в ферментативных реакциях гидролиза АТФ, катализируемых молекулярными моторами. Биофизика, 65, 493-503 (2020).
- [5] С.М. Першин. Орто-пара-спин-конверсия  $\text{H}_2\text{O}$  в водных растворах как квантовый фактор парадоксов Коновалова. Биофизика, 59, 1209-1218 (2014).

## Приглашенный доклад

# ИЗУЧЕНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ УГЛЕВОДОВ: ПРОБЛЕМЫ И ВОЗМОЖНЫЕ РЕШЕНИЯ

**Кононов Л.О.**

*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, 1  
19991, Россия, г. Москва, Ленинский просп., 47  
e-mail: leonid.kononov@gmail.com*

В докладе будут представлены собственные [1-7] и литературные данные [8-12] по изучению структуры водных растворов низкомолекулярных углеводов с помощью светорассеяния [2, 6, 8, 10-12] и поляриметрии [1-6], а также ранее не опубликованные данные по изучению водных растворов углеводов методом анализа треков наночастиц (NTA). Особое внимание будет уделено вопросам пробоподготовки и воспроизводимости измерений в водных растворах углеводов. В ряде случаев для сравнения будут привлекаться данные измерений в неводных растворах (и не только углеводов).

Отдельно будет обсужден обнаруженный в ходе наших исследований феномен существования «критических» концентраций, при которых концентрационные зависимости количественных характеристик физических свойств раствора согласованно претерпевают изломы. Эти «критические» концентрации, по-видимому, разделяют области концентраций с различной структурой раствора, для которых характерно образование супрамеров [4] различного строения.

## Литература:

- [1] L.O. Kononov, D.E. Tsvetkov and A.V. Orlova, Conceivably the first example of a phase transition in aqueous solutions of oligosaccharide glycosides. Evidence from variable-temperature <sup>1</sup>H nmr and optical rotation measurements for a solution of allyl lactoside, *Russ. Chem. Bull.*, 51, 1337-1338 (2002).
- [2] A.V. Orlova, R.R. Andrade, C.O. da Silva, A.I. Zinin and L.O. Kononov, Polarimetry as a tool for the study of solutions of chiral solutes, *ChemPhysChem*, 15, 195-207 (2014).
- [3] A.V. Orlova, A.I. Zinin and L.O. Kononov, Mutarotation in aqueous solutions of d-levoglucosan: A supramer approach, *Russ. Chem. Bull.*, 63, 295-297 (2014).
- [4] L.O. Kononov, Chemical reactivity and solution structure: On the way to a paradigm shift?, *RSC Adv.*, 5, 46718-46734 (2015).
- [5] A.V. Orlova, N.N. Kondakov, Y.F. Zuev and L.O. Kononov, Temperature dependence of specific optical rotation of an aqueous levoglucosan solution, *Russ. Chem. Bull.*, 67, 2155-2156 (2018).
- [6] A.V. Orlova and L.O. Kononov, Polarimetry as a method for studying the structure of aqueous carbohydrate solutions: Correlation with other methods, *RENSIT*, 12, 95-106 (2020).
- [7] L.O. Kononov, K. Fukase and N.F. Bunkin, Editorial: Chemical reactivity and solution structure, *Front. Chem.*, 11, 1293697 (2023).
- [8] M. Sedláč, Large-scale supramolecular structure in solutions of low molar mass compounds and mixtures of liquids: I. Light scattering characterization, *J. Phys. Chem. B*, 110, 4329-4338 (2006).
- [9] D. Rak and M. Sedláč, Solvophobicity-driven mesoscale structures: Stabilizer-free nanodispersions, *Langmuir*, 39, 1515-1528 (2023).
- [10] M. Sedláč, Surfactant-free self-assembled mesoscale structures in multicomponent mixtures comprising solids, liquids, and gases: Nanoparticles, nanodroplets, and nanobubbles, *Front. Soft Matter*, 3, 1225709 (2023).
- [11] N.V. Penkov, V.A. Zhmurin, A.V. Kobelev, E.E. Fesenko and N.A. Penkova, Dispersed, optical and concentration characteristics of submicron heterogeneities in aqueous solutions of sugars, *J. Mol. Liq.*, 398, 124281 (2024).
- [12] N.V. Penkov, V.A. Zhmurin, A.A. Manokhin, A.V. Kobelev and N.A. Penkova, Capillary effects of submicron heterogeneities in aqueous solutions of sugars. The additional mechanism of microfluidics, *J. Mol. Liq.*, 410, 125638 (2024).

## Приглашенный доклад

**БИОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОТОПНЫЕ ЭФФЕКТЫ  
ОБЛЕГЧЕННОЙ ПО ДЕЙТЕРИЮ ВОДЫ  
И ЕЕ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА****Лобышев В.И.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет  
Москва 119991, ГСП-1, Ленинские горы, дом 1, стр. 2  
e-mail: lobyshev@yandex.ru*

Изучение биологических эффектов в воде с измененным изотопным составом началось сразу после получения концентрированной тяжелой воды  $D_2O$  в 1933 г. Длительное время основная часть исследований относилась к эффектам, наблюдаемым в концентрированной тяжелой воде, но был опубликован также ряд работ с немного увеличенной концентрацией дейтерия, где были обнаружены неожиданно большие изотопные эффекты активационного характера в то время как высокие концентрации дейтерия в воде всегда приводили к ингибированию различных функций вплоть до гибели организмов [1, 2]. К настоящему времени можно считать понятным механизмы кинетических и термодинамических эффектов чистой  $D_2O$ . Существующее в природе фракционирование изотопов водорода при фазовых переходах воды позволило обнаружить активирующее влияние талой воды с обедненным количеством дейтерия [3-5]. С появлением технологии получения воды с облегченным составом, до 2 ppm по дейтерию, значительно выросло количество работ с измененным изотопным составом вблизи его природного содержания около 150 ppm. В большинстве случаев регистрируются значительные изотопные эффекты, в том числе немонотонного типа. При интерпретации результатов возникает вопрос о физических характеристиках воды с измененным изотопным составом.

Известно, что смеси  $H_2O$ - $D_2O$  относятся к идеальным растворам. Самый большой изотопный эффект (около 20%) наблюдается в величине вязкости. В рамках идеального раствора погрешность измерения вязкости для различения обычной воды и воды с 4 ppm дейтерия должна составлять 0,00001 спз, которую нельзя достигнуть с помощью капиллярного вискозиметра. Используя частотный метод, мы изменили скорость ультразвука в воде с погрешностью 0,000001 м/с в диапазоне содержания дейтерия 4-125 ppm. Использовали воду, содержащую  $D=4 \pm 1$  ppm,  $^{18}O=849 \pm 15$  ppm,  $^{17}O=222 \pm 3$  ppm. Полученный график является линейным без аномального поведения [6]. Величины спин-спиновой релаксации протонов воды в интервале концентраций дейтерия 1953-4 ppm монотонно уменьшается от 1888 до 1710 мс, что значительно отличается от величины 347 мс, опубликованной в [7] и многократно цитируемой. Измерена также кинетика набухания семян гороха и шариков гидрогеля, которая оказалась неразличимой в воде 4 и 150 ppm. Теплоемкость воды  $C_p$  с увеличенной концентрацией дейтерия в интервале 0,1 – 1% дейтерия также оказалась линейной [8].

Полученные результаты показывают, что изменениями рассмотренных физических характеристик в воде с небольшим изменением содержания дейтерия относительно природной воды нельзя объяснить немонотонные биологические изотопные эффекты.

**Литература:**

- [1] В.И. Лобышев, Л.П. Калинин. Изотопные эффекты  $D_2O$  в биологических системах. Наука, М., 1978.
- [2] В.И. Лобышев. О проблеме влияния малых концентраций на биологическую активность. Актуальные вопросы биологической физики и химии, издательство Севастопольский государственный университет (Севастополь), 2020, том 5, № 3, с. 390-398
- [3] И.В. Торопцев, Б.Н. Родимов, А.М. Маршунина, И.О. Яфарова, В.И. Садовникова, И.Г. Лобина. Биологическая роль тяжелой воды в живых организмах. *Вопросы радиобиологии и гематологии*. Изд. Томского ун-та, 1966, с. 118-126.
- [4] J.D. Gleason, I. Friedman. Oats may grow better in water depleted in oxygen-18 and deuterium. *Nature*, 1975, vol. 256, N 5505, p. 305.
- [5] В.И. Лобышев, И.А. Мельников, А.Д. Есиков, В.В. Нечаев. Исследование изотопного состава кислорода арктического дрейфующего льда в связи с проблемой активации роста микроорганизмов на границе тающего льда. *Биофизика*, 1984, т.29, вып. 5, с. 835-839.
- [6] А. А. Киркина, В. И. Лобышев, М.Е. Асташев. Физические свойства легкой воды. Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук, 2013, т.12, №12-3, с. 37-39.
- [7] V.V. Goncharuk, V.B. Lapshin, T.N. Burdeinaya, T.V. Pleteneva, A.S. Chernopyatko, I.D. Atamanenko, *et al.* Physicochemical properties and biological activity of the water depleted of heavy isotopes. *J Water Chem Techn* 2011; 33:15-25.
- [8] Хун Юанькай, В.И. Лобышев. Измерение теплоемкости смесей  $H_2O$  -  $D_2O$  с помощью сканирующего микрокалориметра ДАСМ -4. *Биофизика* т.43, 1998, с. 364-365.

Приглашенный доклад

# АКТИВНЫЕ ФОРМЫ КИСЛОРОДА В МЕХАНИЗМАХ КЛЕТОЧНОЙ АДАПТАЦИИ: ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ АСПЕКТЫ

**Мартинovich Г.Г., Мартинovich И.В.**

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь  
e-mail: martinovichgg@mail.ru

Изучение механизмов адаптации клеток к стрессу и разработка способов регуляции их резистентности к действию физических, химических и биологических повреждающих факторов является актуальной задачей современной биофизики. Ключевыми участниками регуляции ответа клеток на действие стрессовых факторов являются активные формы кислорода (АФК) – высокореакционные продукты метаболизма кислорода, обладающие широким спектром физиологического и патофизиологического действия [1]. При трансдукции сигналов в клетках с участием АФК (редокс-сигналикации) в серии электрон-транспортных процессов происходит направленный перенос электронов от белков к  $O_2$ , что изменяет конформацию и активность биологических молекулярных «машин». Изменение активности белков-мишеней происходит в результате окисления депротонированных тиоловых групп цистеиновых остатков [2]. Данный механизм не является специфическим для ряда редокс-активных соединений и запускается как эндогенными, так и экзогенными акцепторами электронов. В транспорте электронов от начального донора к конечному акцептору могут участвовать несколько посредников (редокс-активных соединений), создавая цепи направленного переноса электронов или редокс-цепи [3]. Направление и скорость переноса электронов в редокс-цепях зависят от соотношения концентраций внутриклеточных редокс-активных соединений, которое определяется редокс-гомеостазом клетки. Поддержание редокс-гомеостаза является основой нормальной жизнедеятельности клеток и осуществляется в результате сопряженного функционирования систем генерации АФК и антиокислительной защиты, а также систем трансмембранного транспорта редокс-активных соединений [4].

Ключевую роль в поддержании редокс-гомеостаза клеток млекопитающих при стрессовых воздействиях играет фактор транскрипции Nrf2, активность которого регулируется с участием редокс-зависимого белка Keap1 [5]. В нормальных условиях Keap1 нековалентно связывает Nrf2, что обуславливает направленный транспорт и деградацию белка в протеасоме 26S. Умеренный окислительный стресс и электрофильные агенты нарушают взаимодействие в комплексе Nrf2-Keap1, в результате Nrf2 активирует транскрипцию сотен генов, участвующих в защите и адаптации клеток к окислительному стрессу. Однако при превышении определенного порога активации Nrf2 запускается экспрессия генов, продукты которых способствуют развитию окислительного стресса и последующей гибели клеток [6]. Таким образом, редокс-регуляция клеточных процессов осуществляется сложной сетью взаимодействий между окислителями и восстановителями, определяющей специфичность ответа биологической системы.

Количественная характеристика уникальной сети взаимодействий, определяющей видовые и индивидуальные особенности редокс-гомеостаза, является необходимым этапом для создания подходов дифференциации физиологических и патофизиологических процессов с участием активных форм кислорода [7]. Показано, что различия величин параметров редокс-гомеостаза в опухолевых и нормальных клетках могут служить основой для разработки новой стратегии таргетной противоопухолевой терапии.

## Литература:

- [1] Г.Г. Мартинovich, Активные формы кислорода в регуляции функций и свойств клеток: явления и механизмы (Минск: БГУ, 2021).
- [2] H. Sies and D.P. Jones, Reactive oxygen species (ROS) as pleiotropic physiological signalling agents, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, V. 21, P. 1–21, (2020).
- [3] G.G. Martinovich, I.V. Martinovich and S.N. Cherenkevich, Redox regulation of cellular processes: A biophysical model and experiment, *Biophysics*, V. 56, P. 444–451, (2011).
- [4] Г.Г. Мартинovich и С.Н. Черенкевич, Редокс-гомеостаз клеток, *Успехи физиологических наук*, Т. 39, С. 29–44, (2008).
- [5] N.K. Zenkov et al., Mazes of Nrf2 Regulation, *Biochemistry (Moscow)*, V. 82, P. 556–564, (2017).
- [6] S.N. Zucker et al., Nrf2 amplifies oxidative stress via induction of Klf9, *Mol. Cell.*, V. 53, P. 916–928, (2014).
- [7] G.G. Martinovich et al., Free radicals and signal transduction in cells, *Biophysics*, V. 68, P. 537–551, (2023).



## Приглашенный доклад

# ГИДРАТАЦИЯ И МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В МЕЛАНИНЕ

**Мотовилов К.А.,<sup>1</sup> Мостерт А.,<sup>2</sup> Гриненко В.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> *Московский физико-технический институт, Институтский пер., д.9, Долгопрудный, 14170.*

<sup>2</sup> *Department of Physics and Centre for Integrative Semiconductor Materials, Swansea University Bay Campus, Fabian Way, Swansea SA1 8EN, UK.*

<sup>3</sup> *Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai Jiao Tong University, Pudong, 201210 Shanghai, China.  
e-mail: k.a.motovilov@gmail.com*

Меланины являются широко распространённым классом биологических полимеров, представленным среди всех царств живых организмов и в большинстве тканей и органов человека [1-3]. Каркас мономеров меланина обладает хиноидной структурой. Связи между мономерами образованы  $sp^2$ -гибридизованными атомами углерода и азота. Это приводит к ряду принципиальных отличий этих материалов от белков, нуклеиновых кислот и полисахаридов [1]: в том числе к высокой химической устойчивости и эффективной делокализации спиновой плотности. Известно, что концентрация электронных радикалов в меланинах может достигать значений более 1019 на грамм [4]. Ею можно обратимо управлять с помощью pH [4] и уровня влажности [5], а также варьируя редокс-статус мономеров с помощью ионов металлов и других агентов [6]. Такие величины концентрации некомпенсированных спинов потенциально могут быть достаточными для возникновения магнитоупорядоченных фаз. В связи с этим представляет интерес исследование влияния концентрации воды и других факторов на потенциальное магнитное упорядочение в меланинах. В нашей работе мы исследовали влияние концентрации воды и ионов меди на магнитный отклик эумеланина в широком диапазоне температур. В сухом эумеланине были обнаружены признаки диа-, пара- и ферромагнитного вкладов. Отметим, что признаки магнитного упорядочения сохранялись вплоть до комнатных температур. Рост концентрации воды приводил к значительному снижению как парамагнитной, так и ферромагнитной компоненты. Это коррелирует с ранее открытой активацией «pancake bonding» между радикалами в увлажненном эумеланине [7], то есть с индуцируемой водой конверсией радикалов и, соответственно, потерей материалом парамагнитных свойств. Введение ионов  $Cu^{2+}$  приводило к практически полному исчезновению ферромагнитного и диамагнитного вклада, что коррелирует с реакцией восстановления радикалами семихинона, входящими в структуру меланина, ионов  $Cu^{2+}$  до  $Cu^{1+}$  [8].

В результате проведенной работы был сделан следующий предварительный вывод: выявленные зависимости магнитных свойств эумеланина от влажности и допирования ионами меди в сочетании с контрольными экспериментами по оценке концентрации потенциальных примесных магнитных неорганических ионов говорят о том, что наблюдаемый вклад в магнитоупорядоченное состояние спинов в данном материале содержит органическую компоненту.

*Работа была выполнена при поддержке РНФ, проект № 19-73-10154.*

## Литература:

- [1] K. Motovilov and A. Mostert, Melanin: Nature's 4<sup>th</sup> Biorganic Polymer, *Soft Matter*, 20, 5635-5651, 2024.
- [2] M. McNamara et al, Decoding the Evolution of Melanin in Vertebrates, *Trends in Ecology & Evolution*, 36, 430-443 (2021).
- [3] L. D'Alba and M. Shawkey, Melanosomes: Biogenesis, Properties, and Evolution of an Ancient Organelle, *Physiological Reviews*, 99, 1-19 (2019).
- [4] S. Chio, J. Hyde, R. Sealy, Paramagnetism in melanins: pH dependence, *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 215, 100-106 (1982).
- [5] P. Gonçalves, B. Filho, C. Graeff, Effects of hydrogen on the electronic properties of synthetic melanin, *Journal of Applied Physics*, 99, 104701 (2006).
- [6] C. Felix et al, Interactions of melanin with metal ions. Electron spin resonance evidence for chelate complexes of metal ions with free radicals, *Journal of the American Chemical Society*, 100, 3922-3926 (1978).
- [7] P. Abramov et al, Signatures of pancake bonding in hydrated eumelanin, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25, 16212-16216 (2023).
- [8] A. Mostert et al, Engineering proton conductivity in melanin using metal doping, *Journal of Materials Chemistry B*, 8, 8050-8060 (2020).

Приглашенный доклад

## ДИНАМИКА РЕОРГАНИЗАЦИИ СЕТКИ Н-СВЯЗЕЙ ВОДЫ КАК ОТКЛИК НА РАЗЛИЧНЫЕ ВНЕШНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ

Новаковская Ю.В.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
Ленинские горы, д.1, стр. 3, Москва, 119991 РФ  
e-mail: jvnovakovskaya@gmail.com*

При описании эффектов, вызываемых в образцах жидкой воды различными внешними воздействиями (термический или радиационный нагрев, изменение давления, введение посторонних макро- или микрочастиц, в т.ч. насыщение газами и др.) обычно используют макроскопические характеристики среды и динамические параметры потоков и неравновесных процессов. Корректный подбор параметров в соответствующих системах уравнений позволяет воспроизвести экспериментально измеряемые брутто-характеристики образцов и их зависимость от времени, но не дает представления о состоянии вещества и его локальных изменениях на молекулярном уровне. Использование молекулярно динамических расчетов для больших ансамблей молекул позволяет перейти на микроуровень и оценивать интегральные характеристики, сопоставимые с экспериментально измеряемыми физическими величинами, но в основном для равновесных процессов. Однако, основной интерес представляет собой неравновесная стадия динамического процесса, инициированного внешним воздействием, поскольку именно она в существенной степени предопределяет характер последующей динамической эволюции системы. Изучение неравновесных динамических процессов требует использования классической молекулярной динамики в приближении большого канонического ансамбля, причем с потенциалами, которые позволили бы описать, в том числе, ионизационные и диссоциационные процессы. Построение таких потенциалов представляет собой весьма сложную проблему, и в настоящее время надежных конструкций такого рода нет. Единственной альтернативой перечисленным подходам является неэмпирическая молекулярная динамика, в которой потенциал определяется решением квантовой электронной задачи, а потому позволяет описывать любые варианты перераспределения электронной плотности и соответствующей реорганизации системы ядер. Ограничением этого подхода является относительно небольшой молекулярный размер систем, которые можно моделировать, что предопределено большими вычислительными затратами на стадии решения электронной задачи. Однако любой сложный процесс может быть формально подразделен на стадии, часть которых характеризуется существенной локализацией энергии возбуждения, инициирующей кардинальную реорганизацию системы, а остальные – диссипацией энергии при распространении эффекта на прилежащие слои вещества и последующей релаксации системы. Наиболее интересны и значимы именно стадии первого типа. И об их характере можно судить, анализируя динамические траектории, построенные в неэмпирическом приближении. Именно этот подход был применен нами при изучении эффектов, инициируемых в небольших кластерах воды (1) локальным разогревом системы; (2) поглощением энергии возбуждения в различных областях инфракрасного диапазона; (3) объемным сжатием и (4) локальным напряжением, связанным с внедрением инородной частицы, в том числе под давлением. Спектр рассмотренных эффектов важен с точки зрения функционирования любых биологических систем. Получаемые данные позволяют оценивать характерные времена перераспределения энергии между различными степенями свободы; вероятности диссоциационных и ионизационных процессов; степень локального разогрева системы и ее компонентов в случае распада.



## Приглашенный доклад

# ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИЧЕСКИХ ГИДРАТНЫХ ОБОЛОЧЕК БЕЛКА В НАТИВНОЙ КОНФОРМАЦИИ НА ПРИМЕРЕ БЫЧЬЕГО СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА

Пеньков Н.В.

ФИЦ Пушинский научный центр биологических исследований РАН, г. Пушкино, ул. Институтская, д. 3  
e-mail: nvpenkov@rambler.ru

Множество исследований биомолекул было посвящено их гидратным оболочкам, под которыми понималось небольшое количество специфически связанных на поверхности молекул воды. Появившаяся в начале 2000х гг. терагерцовая (ТГц) спектроскопия продемонстрировала непревзойдённую чувствительность при анализе структурно-динамических характеристик воды в растворах. Это позволило установить, что гидратные оболочки биомолекул обладают протяжённостью порядка нанометров. Они были названы динамическими гидратными оболочками, поскольку вода в них не только структурно, но и динамически отличается от окружения. В ряде работ было показано [1], что гидратные оболочки белков проявляют особенности ТГц спектров, когда белки находятся в функциональных состояниях, включая нативную конформацию. Однако эти особенности на уровне межмолекулярной структуры и динамики воды объяснены не были.

В настоящей работе описан подход, основанный на методе терагерцовой спектроскопии временного разрешения (THz-TDS), позволяющий анализировать динамические гидратные оболочки белков. Суть метода заключается в анализе комплексной диэлектрической проницаемости водной фазы достаточно концентрированного раствора белка, в котором практически вся вода является гидратной. Для бычьего сывороточного альбумина (БСА) это около 334 мг/мл. Из диэлектрической проницаемости выделяются два релаксационных и один колебательный молекулярные процессы. Они интерпретируются классическим образом, как релаксация связанных и свободных (или слабо связанных) молекул воды и межмолекулярные колебания на водородных связях.

На примере БСА в трёх конформациях показано, что фракция свободных (или слабо связанных) молекул в гидратных оболочках белка оказывается более многочисленной, но усреднённая связанность воды больше, чем в невозмущённом состоянии. Аналогичные проявления наблюдались и для других типов биомолекул: нуклеотидов [2], ДНК [3], моно- и полисахаридов [4], фосфолипидных липосом [5], что, по-видимому, определяет специфику гидратации биомолекул. Это объясняется тем, что в гидратных оболочках усиливается связывание молекул воды в первичных слоях, а в более отдалённых областях гидратации, напротив, структура воды несколько разрушена, по сравнению с водой невозмущённой. Также энергетические распределения водородных связей в гидратных оболочках оказываются сужены.

Наиболее интересный результат заключается в том, что все указанные проявления гидратации наиболее сильно выражены для нативной конформации белка. Также для гидратных оболочек нативного белка характерно меньшее количество водородных связей и тенденция к уменьшению их средней энергии по сравнению с не нативными конформациями. Сам факт уникальности гидратной оболочки белка в нативной конформации отмечался для разных белков и ранее [6,7]. Однако применённый в настоящей работе методический подход впервые позволил эти особенности описать конкретными параметрами межмолекулярной структуры и динамики воды.

Полученные данные дополняют представление о связи структуры белков с их функциональной активностью. По-видимому, нативная конформация не сама по себе определяет активность белков, но при участии их динамических гидратных оболочек.

## Литература:

- [1] Penkov NV. Terahertz spectroscopy as a method for investigation of hydration shells of biomolecules. *Bioph. Rev.* **2023** 15 (5): 833–849.
- [2] Penkov NV, Penkova, N. Key differences of the hydrate shell structures of ATP and Mg·ATP revealed by terahertz time-domain spectroscopy and dynamic light scattering. *J. Phys. Chem. B* **2021** 125 (17): 4375–4382.
- [3] Penkova NA, Sharapov MG, Penkov NV. Hydration shells of DNA from the point of view of terahertz time-domain spectroscopy. *Int. J. Mol. Sci.* **2021** 22 (20): 11089.
- [4] Penkov NV. Relationships between molecular structure of carbohydrates and their dynamic hydration shells revealed by terahertz time-domain spectroscopy. *Int. J. Mol. Sci.* **2021** 22 (21): 11969–11988.
- [5] Penkov NV, Yashin VA, and Belosludtsev KN. Hydration shells of DPPC liposomes from the point of view of terahertz time-domain spectroscopy. *Appl. Spectrosc.* **2021** 75 (2): 189–198.
- [6] Born B, Kim SJ, Ebbinghaus S, Gruebele M, Havenith M. The terahertz dance of water with the proteins: the effect of protein flexibility on the dynamical hydration shell of ubiquitin. *Faraday Discuss* **2009** 141:161–173.
- [7] Meister K, Ebbinghaus S, Xu Y, Duman J.G, DeVries A, Gruebele M, Leitner D.M, Havenith M. Long-range protein-water dynamics in hyperactive insect antifreeze proteins. *Proc Nat Acad Sci USA* **2013** 110(5): 1617–1622.

Приглашенный доклад

# БИОАКТИВНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ УГЛЕРОДА И РОЛЬ ВОДЫ В ЕЕ ПРОЯВЛЕНИИ

**Рожкова Н.Н., Рожков С.П.***Кар НЦ РАН, 185910 г. Петрозаводск, ул. Пушкинская 11,  
e-mail: rozhkova@krc.karelia.ru*

Для наночастиц шунгитового углерода (ШУ) установлен ряд механизмов биологической активности, как неспецифических, так и обусловленных взаимодействием с биологическими мишенями с участием воды. В одном случае это способность ШУ в водной среде адсорбировать и переносить низкомолекулярные лиганды (жирные кислоты, гормоны, метаболиты и т.п.), что в присутствии белков-переносчиков способствует обмену между ними и ШУ посредством образования белковой короны. Это приводит как к регуляции насыщения белка лигандами, так и формированию дополнительной функциональной активности вследствие обмена белков короны с измененной конформацией с пулом белка в основной конформации. Окислительно-восстановительная активность ШУ обусловлена способностью его гидратной оболочки накапливать активные формы кислорода даже без активной генерации последних. В присутствии тиол-содержащих белков эта способность проявляется в их анти/прооксидантном действии. Мембранотропная активность ШУ влияет на морфологические свойства мембран и их проницаемость, как показано на примере белков актин-спектринового комплекса эритроцитов повышением их термоустойчивости и усилением клеточной агрегации. Физиологически наиболее значимым явлением представляется фазообразующая активность ШУ, сопряженная с образованием фракций из различных конформеров белка, формирующих метастабильные динамические белковые кластеры как прообраз безмембранных органелл, функциональная значимость которых получает многочисленные экспериментальные подтверждения.

При исследовании механизма молекулярной и коллоидной растворимости молекул сывороточного альбумина (СА) в водной среде в широком диапазоне концентраций белка и влияния на этот процесс присутствия ШУ методами спектроскопии комбинационного рассеяния (КРС) и динамического светорассеяния (ДРС) была установлена определяющая роль системы водородных связей воды в возникновении надмолекулярной организации в дисперсиях вода+СА; вода+ШУ; вода+СА+ШУ. Это было интерпретировано стремлением сетки водородных связей воды вытолкнуть макромолекулы и наночастицы к местам ее нарушения с заполнением дефектов сетки и созданием областей повышенной концентрации молекул и частиц. Поскольку спектры КРС в области частот  $3200 - 3600 \text{ см}^{-1}$  обусловлены валентными колебаниями ОН-групп воды в сетке водородных связей, уменьшение соотношения интенсивностей двух пиков при  $3450/3250 \text{ см}^{-1}$  соотносится с увеличением числа донорно-акцепторных связей и их стабилизацией [1]. Это происходит в диапазоне концентраций белка 0,1-0,3 мг/мл. В этом случае регистрируются кластеры белка диаметром около 100 нм, размер которых не меняется с ростом концентрации белка. Противоположно направленное «разрыхление» водородных связей (увеличение соотношения интенсивностей) при дальнейшем увеличении концентрации белка сопровождается появлением растущих кластеров другого типа размерами в несколько сотен нм. Вероятно, это обусловлено тем, что увеличение концентрации белковых молекул приводит к появлению новых, более крупных дефектов и формированию в них более крупных кластеров. При этом дисперсия остается седиментационно стабильной, несмотря на широкое распределение кластеров по размерам. В дисперсии ШУ с ростом концентрации до 0.1 мг/мл наблюдается только стабилизация системы связей с появлением кластеров радиусом ~60 нм, после чего дисперсия теряет стабильность. Видимо, электронная структура ШУ такова, что не способна генерировать новые дефекты в системе водородных связей. В присутствии в белковой дисперсии ШУ коллоидная стабильность дисперсии обеспечивается главным образом ассоциацией СА и ШУ с образованием белковой короны вокруг наночастиц. При этом изменения в сетке водородных связей воды происходят плавно, без резких перепадов. Можно предположить, что водная система управляет процессами инкорпорации и растворения либо путем изменения конформации макромолекул и адаптации их существующим дефектам структуры воды, либо путем возникновения белковой короны или кластерной организации во вновь создаваемых дефектах.

*Работа выполняется в рамках бюджетных тем FWME-0222-2019-0065 и FMEN-2022- 0006.***Литература:**

[1] S. Rozhkov, A. Goryunov, N. Rozhkova. Molecular Serum Albumin Unmask Nanobio Properties of Molecular Graphenes in Shungite Carbon Nanoparticles. Int. J. Mol. Sci. 2024. 25(5). 2465

## Устный доклад

# ANALYSIS OF THE KINETICS OF THE GUT MICROBIOTA PRODUCED HYDROGEN AND METHANE BY THE TEST WITH H<sub>2</sub>- AND CH<sub>4</sub>-RICH WATER PROBE

[Medvedev O.S.](#),<sup>1,6</sup> Stavrovskii D.B.,<sup>2</sup> Bondarenko G.N.,<sup>1</sup> Litvinov A.V.,<sup>3</sup> Etrekova M.O.,<sup>3</sup> Karabinenko A.A.,<sup>4</sup> Kilimnik V.A.,<sup>5</sup> Ponurovskii Ya.Ya.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Lomonosov Moscow State University, Russia, 119192, Moscow, 27-1 Lomonosovsky Prospekt

<sup>2</sup> Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Russia, 119991, Moscow, 38 Vavilov street

<sup>3</sup> National Research Nuclear University "MEPhI", Russia, 115409, Moscow, 31 Kashirskoe shosse

<sup>4</sup> Pirogov Russian National Research Medical University, Russia, 117997, Moscow, 1 Ostrovitianov street

<sup>5</sup> Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation Russia, 190000 St.Petersburg, 67 Bolshaya Morskaya street

<sup>6</sup> Smirnov Institute of Experimental Cardiology Chazov National Medical Research Center for Cardiology, Russia, 121552, Moscow, 15A Chazov street  
e-mail: oleg.omedvedev@gmail.com

**Introduction.** Recent years have seen an upsurge in interest in studying the role of microorganisms of the large intestine (microbiota) of animals and humans and their capacity to generate a number of metabolites that may exert both protective and provocative influence on the development of metabolic, cardiovascular, and other non-infectious diseases. Those food components (primarily complex carbohydrates and dietary fiber) that are not absorbed by our body in the small intestine reach the large intestine, where they are fermented by the microbiota with a much larger set of enzymes for their utilization. As a result of their metabolism, a large number of low-molecular-weight compounds are produced in the colon: gas biomarkers (hydrogen, methane, and hydrogen sulfide), short-chain fatty acids, etc.

In this work, our attention was focused on studying the time dependences of the concentration of hydrogen and methane in the exhalation of the subject after taking two portions of water, which were saturated with hydrogen and methane, respectively. Particular interest in these gases is due to the fact that the analysis of the kinetics of their appearance in the exhaled air allows diagnosing such a disease as bacterial overgrowth syndrome in the small intestine (SIBR). Concentrations of oxygen and carbon dioxide were simultaneously recorded in the exhaled air.

**The aim** of our study was to obtain experimental data to analyze the process of absorption of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> in the gastrointestinal tract and the process of their release through the lungs.

**Methods.** Concentrations of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> were measured by the multichannel diode laser spectrometer, for O<sub>2</sub>-electrochemical sensor, and for H<sub>2</sub>-MIS sensor were used [1].

**Results.** 5 adult volunteers participated in the pilot study. They drank 150 ml portions of water that was saturated with hydrogen and methane at a pressure of 1 atm above the surface of the water. The levels of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> increased in breath by 35-60 ppm with a max on 8-12 min and returned to the baseline level in 45-55 min after drinking H<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub>-saturated water. The ratio of H<sub>2</sub> exhaled/H<sub>2</sub> ingested (~60%) is higher than CH<sub>4</sub> exhaled/CH<sub>4</sub> ingested (~50%), which may reflect different intestinal wall permeability for these gases. Results of the tests with H<sub>2</sub>- and CH<sub>4</sub>-saturated water allow to understand better the kinetics of this gaseous biomarkers, generated by the gut microbiota.

**Conclusions.** First time kinetics of both (hydrogen and methane) release in exhaled air were assessed in humans using multichannel diode laser spectrometer. It is possible to combine this test with taking lactulose or glucose for the regular breath testing because microbiota-produced gases appear in 60-70 min, the time needed to reach the large intestine.

## References:

[1] Я.Я. Понуровский, Д.Б. Ставровский, И.В. Широков, Ф.И. Романихин, Г.Н. Бондаренко, А.В. Литвинов, М.О. Этрекова, А.А. Карабиненко, В.А. Килимник, О.С. Медведев. Новые возможности для анализа биологической роли водорода, метана и других биомаркеров активности микробиоты кишечника при использовании перестраиваемой диодной лазерной спек-трометрии поглощения и селективных сенсоров водорода и кислорода// Оптика и спектроскопия, том 132, вып. 3 стр. 303-309 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.03.58150.35-24

Устный доклад

# ABSTRACT - 7TH ALL-RUSSIAN CONFERENCE "PHYSICS OF AQUEOUS SOLUTIONS"

## HIGH DILUTIONS OF TWO HOMEOPATHIC DRUGS IN AQUEOUS SOLUTION TRANSFER THEIR OPTICAL PROPERTIES TO WATER WITHOUT ANY DIRECT PHYSICAL CONTACT

Sukul A.C.,<sup>1\*</sup>, Singh R.K.,<sup>2</sup> Pande N.,<sup>3</sup> Sukul A.<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Professor (Retd.) and President, Department of Zoology, Visva-Bharati University, Santiniketan, Sukul Institute of Homeopathic Research, Birbhum, West Bengal, India.

<sup>2</sup> Assistant Professor, Department of Botany, Government General Degree College, Mangalkote, Purba Bardhaman (Affiliated to University of Burdwan), West Bengal, India.

<sup>3</sup> State Aided College Teacher, Department of Geography, Panihati Mahavidyalaya, Sodepur, Kolkata, (Affiliated to West Bengal State University) West Bengal, India.

<sup>4</sup> Director, Department of Homeopathic Research, Sukul Institute of Homeopathic Research, Birbhum, West Bengal, India.

\* e-mail: [ncsukul@gmail.com](mailto:ncsukul@gmail.com) and ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5888-3369>

**Background:** High dilutions (HD) of drugs have been used for more than 200 years in homeopathy, a therapeutic system followed in many parts of the world. Homeopathic drugs are prepared by serial dilution followed by mechanical agitation in several successive steps. These HDs are called potencies. Water in direct contact with a potency acquires optical properties of the potency. Here we show that water does the same without any direct physical contact. Optical properties are determined by electronic and vibrational spectroscopy. **Methods:** The 200 cH potencies of a plant extract *Nux vomica* and an animal product *Sepia officinalis* were obtained from the marked. The drugs were in 90% ethanol which was diluted with deionized and distilled (DD) water 1:100. So, the EtOH content in the drug solution is 0.09%. This is virtually water. Each diluted potency of a drug was kept in a 30 ml brown glass bottle. A narrow test tube containing diluted EtOH solutions was dipped into a potency of the bottle. After one hour each test tube was taken out and its water content was analysed by UV and FT-IR spectroscopy. The same samples were also tested spectroscopically before one hour exposure. For UV spectroscopy, baseline was set with 0.09% EtOH. **Results:** Water in each test tube after one hour exposure acquired the optical properties of the concerned drug kept in the brown glass bottle. **Discussion:** It is possible that electromagnetic radiation (EMR) might have carried the specific information of the optical properties of the potentized drug in the bottle, and then transferred the same to water in the test tube. **Conclusion:** Two potentized drugs tested could transfer their optical properties without direct physical contact to water.

**Keywords:** Homeopathic drugs, *Nux vomica* 200 cH, *Sepia officinalis* 200 cH, Water, Optical properties, Transfer, UV and FT-IR spectra.

## Устный доклад

# РЕГУЛЯЦИЯ КЛЕТОЧНЫХ ПРОЦЕССОВ В УСЛОВИЯХ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО/ГАЛОГЕНИРУЮЩЕГО СТРЕССА

Горудко И.В.<sup>1</sup>, Григорьева Д.В.<sup>1</sup>, Реут В.Е.<sup>1</sup>, Мартинович Г.Г.<sup>1</sup>,  
Соколов А.В.<sup>2,3</sup>, Панасенко О.М.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь

<sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Институт экспериментальной медицины»,  
ул. Академика Павлова, 12, Санкт-Петербург, 197022, Россия

<sup>3</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение  
«Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени академика  
Ю.М. Лопухина Федерального медико-биологического агентства»,  
ул. Малая Пироговская, 1а, Москва, 119435, Россия  
e-mail: irinagorudko@gmail.com

Ключевой особенностью нейтрофилов является наличие в их азурофильных гранулах фермента миелопероксидазы (МПО), катализирующего образование активных форм галогенов (АФГ). В силу высокой реакционной способности АФГ наряду с активными формами кислорода (АФК), образующимися в результате активации НАДФН-оксидазы, выполняют бактерицидную функцию. Повышенное образование АФК/АФГ приводит к развитию окислительного/галогенирующего стресса, инициирующего деструктивные процессы в организме. В то же время АФК выполняют важную роль внутри- и межмолекулярных мессенджеров в регуляции различных клеточных процессов. В последние годы накопилось значительное количество экспериментальных данных, свидетельствующих о том, что в регуляцию внутриклеточной и межклеточной сигнализации вовлечены также АФГ. В отличие от АФК, взаимодействие которых с функциональными группами биологических молекул осуществляется через реакции окисления (в случае редокс-регуляции модифицируются преимущественно SH-группы), НОСl и другие АФГ участвуют не только в реакциях окисления (например, окисление Cys, Met, Trp и His белков), но и в реакциях замещения и присоединения галогенов (например, галогенирование боковых цепей Arg, Tyr и Lys в белках). При этом после модификации АФГ ряд молекул приобретают способность связываться с рецепторными структурами клеток и активировать процессы внутриклеточной сигнализации, т.е. выступают в качестве медиаторов, способных передавать информацию между клетками. Нами установлено, что сывороточный альбумин человека, модифицированный гипогалоидными кислотами, индуцирует активацию НАДФН-оксидазы и дегрануляцию нейтрофилов. Пути трансдукции сигнала при действии галогенированного альбумина включают интегрин-зависимую активацию фосфатидилинозитол-3-киназ, тирозинкиназ и перестройку актинового цитоскелета в нейтрофилах. Активирующее действие на экзоцитоз гранулярных белков и продукцию  $H_2O_2$  нейтрофилами оказывают также липопроотеины низкой плотности (ЛНП), модифицированные при действии гипогалоидных кислот. Интересно отметить, что хлор- и бромгидрины фосфатидилхолина, одного из основных липидов ЛНП и плазматических мембран клеток, в низких микромолярных концентрациях оказывали праймирующий эффект на нейтрофилы, усиливая агонист-индуцированную продукцию  $H_2O_2$  и дегрануляцию. После взаимодействия с НОСl выявлено также изменение некоторых регуляторных свойств лактоферрина и МПО в отношении нейтрофилов. Предполагается, что в основе функционального переключения белков после их модификации при действии АФГ лежит обратимое N-галогенирование основных аминокислотных остатков. Приведенные данные наглядно демонстрируют, что АФГ-модифицированные молекулы, образующиеся при взаимодействии с продуктами реакций, катализируемых МПО, представляют собой новый класс биологически активных молекул, регулирующих клеточные процессы.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-315 на организацию и развитие Научного центра мирового уровня "Фотоника").*



Устный доклад

# КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКОГО КОНТРАСТА СУБМИКРОННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ САХАРОВ

**Жмурин В.А., Пеньков Н.В.**

Института биофизики клетки Российской академии наук – обособленного подразделения  
ФИЦ ПНЦБИ РАН, г. Пущино, ул. Институтская, д. 3.  
e-mail: zhmurin.vasya@mail.ru

Явление формирования субмикронных неоднородностей (СМН) в водных растворах, по химической классификации считающихся истинными, изучается давно, но до сих пор нет полного понимания природы данного явления [1–6]. Установлено, что СМН – устойчивые образования, формирующиеся при приготовлении растворов и сохраняющие стабильность на протяжении практически бесконечного времени (годы [7]) в рамках лабораторного эксперимента. Больше всего свидетельств наличия СМН описано для водных растворов органики, которые регистрировались методами светорассеяния. Эти методы показывают, что практически во всех растворах размеры СМН составляют сотни нанометров, однако они не позволяют определять плотность СМН. В нашей недавней работе был описан и реализован комплексный подход, позволяющий определять размеры СМН, их дифференциальный коэффициент преломления ( $\Delta n$ ) относительно окружающего раствора и концентрацию [6]. Показано, что в растворах сахаров с концентрацией 0.5 моль%  $\Delta n$  составляет около 0.005 для глюкозы и фруктозы и 0.01 для сахарозы. Для всех трёх растворов это соответствует в 1.8 раз большей концентрации сахаров в СМН по сравнению со средней концентрацией в растворе, что соответствует плотностному контрасту  $\sim 3\%$ . Объёмная доля СМН в этих растворах довольно велика  $\sim 0.1\%$ . Показано также, что с ростом концентрации сахаров в растворах интенсивность рассеяния СМН увеличивается не линейно. Это может быть связано с двумя факторами: с нелинейной зависимостью концентрации СМН и/или их  $\Delta n$  от концентрации сахара.

В настоящей работе были определены значения  $\Delta n$  для растворов нескольких хорошо растворимых в воде сахаров (глюкозы, мальтозы, сахарозы, трегалозы) в диапазоне концентраций 0.5–1.5 моль%. Установлено, что с ростом концентрации глюкозы, мальтозы и сахарозы от 0.5 до 1.5 моль%  $\Delta n$  уменьшается от значений  $\sim 0.01$  до значений  $\sim 0.001$ . При повышении концентрации указанных сахаров происходит уменьшение оптического, а значит, плотностного контраста СМН. Из этого следует, что СМН не являются ассоциатами со стандартной структурой и составом, которые зависят от концентрации сахара. Интересно, что для растворов трегалозы наблюдается малое значение  $\Delta n \sim 0.001$ , которое не монотонно меняется (от 0.001 до 0.003) в указанном диапазоне концентраций. Это говорит о зависимости характеристик СМН не только от концентрации, но и от типа сахара.

Эта особенность СМН в растворах трегалозы (по сравнению с другими проанализированными сахарами) интересна не только с точки зрения физической химии, но и биологии. Предположительно, она может объяснить нераскрытую до сих пор загадку криозащитных свойств трегалозы, которая по сравнению с другими сахарами проявляет наибольшую эффективность [8]. Малое значение  $\Delta n$  означает малый плотностный контраст СМН, то есть малую гетерогенность растворов, что определяет низкую вероятность формирования кристаллов льда в растворах трегалозы. Этот аспект требует более глубокого исследования.

## Литература:

- [1] M.F. Vuks, L.V. Shurupova. The scattering of light and phase transition in solutions of tertiary butyl alcohol in water. *Opt. Commun.* **1972** 5:277–278.
- [2] M. Sedláč. Large-Scale Supramolecular Structure in Solutions of Low Molar Mass Compounds and Mixtures of Liquids. III. Correlation with Molecular Properties and Interactions. *J. Phys. Chem. B* **2006** 110:13976–13984.
- [3] N.F. Bunkin, G.A. Lyakhov, A.V. Shkirin, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, S.V. Ugraitskaya, E. E. Fesenko, Jr. Study of the submicron heterogeneity of aqueous solutions of hydrogen-bond acceptor molecules by laser diagnostics methods, *Phys. Wave Phenom.* **2015** 23(4):241–254.
- [4] N.F. Bunkin, A.V. Shkirin, G.A. Lyakhov, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, S.V. Ugraitskaya, E. E. Fesenko, Jr. Droplet-like heterogeneity of aqueous tetrahydrofuran solutions at the submicrometer scale. *J. Chem. Phys.* **2016** 145(18):184501.
- [5] N.F. Bunkin, G.A. Lyakhov, A.V. Shkirin, S.V. Krivokhizha, A.A. Afonin, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, E. E. Fesenko, Jr. Laser diagnostics of the mesoscale heterogeneity of aqueous solutions of polar organic compounds. *Phys. Wave Phenom* **2018** 26(1):21–35.
- [6] N.V. Penkov, V.A. Zhmurin, A.V. Kobelev, E.E. Fesenko (Jr.), N.A. Penkova. Dispersed, optical and concentration characteristics of submicron heterogeneities in aqueous solutions of sugars. *Journal of Molecular Liquids.* **2024** 398:124281.
- [7] D. Rak, M. Sedlak, Solvophobicity-driven mesoscale structures: stabilizer-free nanodispersions, *Langmuir* **2023** 39 (4):1515–1528.
- [8] L. M. Crowe, R. Mouradian, J. H. Crowe, S. A. Jackson, C. Womersly. Effects of carbohydrates on membrane stability at low water activities. *Biochim. Biophys. Acta* **1984** 769:141–150.



## Устный доклад

# ИЗМЕНЕНИЕ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПРИ ВИБРАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Лесин В.И., Сафарова Е.А.

Институт проблем нефти и газа РАН, 119333, г. Москва, ул. Губкина, дом 3  
e-mail: vilesin@inbox.ru

Вибрационное воздействие на коллоидные водные растворы широко применяется в технических средствах, предназначенных для транспортировки и изменения физико-химических свойств растворов. Известно, что течение водного коллоидного раствора через капилляры и пористые среды сопровождается появлением локальных электрических полей (потенциалов течения), вызванных формированием объемных электрических зарядов [1,2], что должно сопровождаться как изменением редокс-потенциала ( $E_h$ ), так и изменением минерального состава среды. В [3] было показано, что колебания давления с частотой  $\omega$  в растворах, содержащих коллоидные частицы, формируют локальные электрические объемные заряды, вызванные колебаниями градиента давления  $P$ - ( $\Delta P/\Delta x$ ) ( $\omega$ ). При исследовании водного раствора из скважины подземного хранилища метана было обнаружено, например, что кратковременное вибровоздействие с частотой 20 кГц в течение 4 мин сопровождается как постепенным снижением  $E_h$  с +28 мВ до – 162 мВ за 24 часа (см. рис.1), так выпадением в твердую фазу частиц, содержащих оксиды железа и растворенные в воде соли. За счет растворения углекислого газа при дальнейшем хранении водный раствор снизил восстановительный потенциал до -144 мВ.

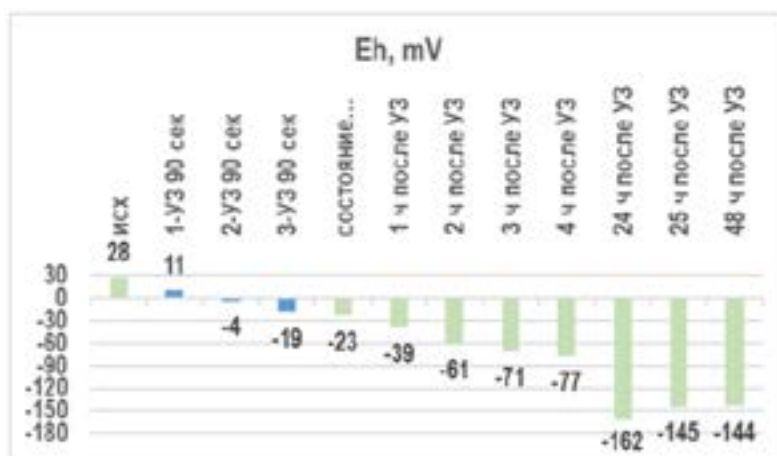


Рис.1 График изменений  $E_h$  в ходе эксперимента по вибровоздействию

## Литература:

- [1] М.Г/ Газимов, Р.А. Максutow, К.М. Кадеев. Электризация при освоении и эксплуатации скважин» // Татарское книжное издательство, Казань, 1972, 80 с.
- [2] В.И. Лесин/ Возникновение волн плотности электрических зарядов при течении жидких коллоидных растворов // Нефтяное хозяйство, 2005, №4, с. 37-39.
- [3] Б.П. Шафарец. Реализация приемной антенны на механизме электрокинетического явления «потенциал течения» // Научное приборостроение, 2019, т.29, № 2, с. 103- 108.

Устный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ РОЖДАЕМОСТИ ЖИВОРОДЯЩИХ МОЛЛЮСКОВ *MELANOIDES ORGANIFERS* В ГИПОГЕОМАГНИТНЫХ УСЛОВИЯХ

[Мойса С.С.](#), Нефедова Е.Л.

ГНЦ РФ – ИМБП РАН  
e-mail: butalana07@list.ru

Исследования эффектов пониженного магнитного поля на биологические системы привлекают внимание ученых [Binhi, 2017; Erdmann, 2021], поскольку в межпланетных полетах человек, животные и растения попадают в условия окружающего магнитного поля, величина которого составляет около 1 нТл. Подобные исследования имеют особое направление в настоящее время в связи с реализацией проектов космических полетов в околоземном пространстве, в том числе полетов к Луне и Марсу. В модельных экспериментах нами установлено [Цетлин, 2010, 2012; Moisa, 2015, 2016, 2019, 2020] изменение окислительно-восстановительных свойств воды под воздействием гипогеомагнитного поля. Вода способна отражать внешние факторы воздействия в своих структурных изменениях, которые соответственно оказывают непосредственное влияние на физиологические процессы в организме. Остается до конца не выясненным вопрос о влиянии на биообъекты измененной вследствие этих факторов среды обитания. В наших предыдущих работах [Moisa, 2015, 2016, 2019, 2020] показано влияние гипогеомагнитных условий на эмбриональное развитие роговой катушки *Planorbarius corneus*, всхожесть и развитие проростков семян высших растений и физико-химические свойства ростовых сред для клеточных культур млекопитающих. Целью настоящего исследования было изучение в модельных экспериментах влияния гипогеомагнитных условий на размножение живородящих моллюсков. Живорождение – способ воспроизведения потомства, при котором зародыш развивается внутри материнского организма. В качестве объекта исследования был выбран живородящий моллюск *Melanoides organifera*, обладающий высокой жизнеспособностью. Это – индикаторы качества воды. В гипогеомагнитной камере, представляющей собой открытый сверху цилиндрический стакан, стенки и дно которого были изготовлены из листового пермаллоя, изучали влияние пониженного в 40 раз геомагнитного поля на рождаемость моллюска и водородный показатель воды. Выявлена задержка и снижение рождаемости моллюсков. Рождаемость моллюсков в гипогеомагнитных условиях была в три раза меньше по сравнению с показателями рождаемости в геомагнитном поле. Как известно, размножение моллюска может быть замедленно при недостатке корма, недостатке карбонатов в воде, ухудшении условий формирования раковины у зародышей и неблагоприятных условиях. На протяжении всего периода эксперимента моллюски получали достаточно корм. Жесткость воды была одинаковой в гипогеомагнитных условиях и геомагнитном поле. Однако в гипогеомагнитных условиях резко повышалась концентрация  $H^+$ , а величина pH снижалась, т.е. повышались окислительные свойства воды, что, в свою очередь, препятствовало формированию раковины у моллюсков и, тем самым, на наш взгляд, явилось причиной торможения рождаемости моллюсков. Таким образом, гипогеомагнитные условия ухудшали среду обитания данного вида моллюсков, т.е. создавали неблагоприятную условия для его размножения. Определяющим фактором действия пониженного геомагнитного поля на изучаемые биообъекты является изменение состояния водной среды. Дальнейшие исследования покажут, смогут ли родившиеся моллюски адаптироваться в гео- и гипогеомагнитных условиях. Понимание механизмов эффекта гипогеомагнитных условий на биообъекты и водную среду обитания поможет разработать научные рекомендации для дальнейшего освоения космоса.

Устный доклад

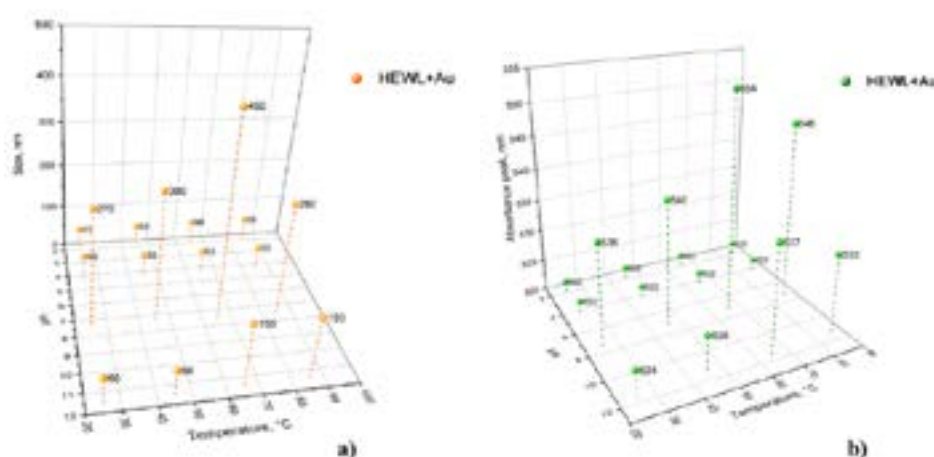
# ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ БЕЛКОВОЙ КОРОНЫ НА НАНОЧАСТИЦАХ

**Молькова Е.А., Саримов Р., Гудков С., Симакин А., Пустовой В., Матвеева Т.**

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН  
e-mail: bronkos627@gmail.com

Наночастицы, попадая в биологическую среду покрываются слоем биомолекул. В основном это белки, который образуют так называемую «белковую корону». Это происходит в результате термодинамики водной среды и опосредовано ван-дер-ваальсовыми силами, кулоновскими взаимодействиями и образованием водородных связей [1]. На стабильность таких комплексов может влиять большое количество факторов. К примеру, кислотность среды может влиять на комплекс наночастиц с белками [2]. Так, изменение кислотности среды приводит к изменению заряда белковых молекул. Это в свою очередь влияет на взаимодействие белка с поверхностью наночастицы, с другими молекулами белков и с окружающей средой в целом [3]. Так же температура может влиять на вторичную структуру белков, ведь при повышении температуры может происходить денатурация белка.

В работе мы рассматриваем влияние таких внешних факторов как кислотность среды и температура на взаимодействие наночастиц и белков. Так же для исследования были выбраны два вида частиц, отличающихся размерами, с функциональными группами на поверхности и без них.



**Рис.1.** Влияние pH и температуры на а) средний гидродинамический диаметр частиц и б) положение пика поглощения золотых наночастиц в коллоидном растворе смеси белка лизоцим с концентрацией 0.5 mg/ml и золотых наночастиц.

## Литература:

- [1] J. Zhang, X. Fu, C. Yan, G. Wang. The morphology dependent interaction between silver nanoparticles and bovine serum albumin. *Materials*, 16(17), 5821, (2023).
- [2] S. Pandit, S. Kundu, Fluorescence quenching and related interactions among globular proteins (BSA and lysozyme) in presence of titanium dioxide nanoparticles. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 628, 127253, (2021)
- [3] E. Molkova, V. Pustovoy, E. Stepanova, I. Gorudko, M. Astashev, A. Simakin, R. Sarimov, S. Gudkov. pH-Dependent HEWL-AuNPs Interactions: Optical Study. *Molecules*, 29(1), 82, (2024).

Устный доклад

# СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ БЕЛКОВ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Нагаев Е.И., Пустовой В.И., Саримов Р.М., Симакин А.В., Гудков С.В.**

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,  
119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38  
e-mail: nagaev\_e@kapella.gpi.ru*

Водные растворы, в том или ином виде, присутствуют практически во всех живых системах. Даже в простейших растворах часто присутствуют растворенные газы и нанопузыри. Под влиянием разных внешних воздействий могут меняться параметры даже такого, казалось бы, простого объекта [1,2]. Гораздо все сложнее в коллоидных растворах, чаще всего встречающихся в природе. Большинство биологических жидкостей представляют собой коллоидные системы. Поэтому изучение влияния физико-химических факторов на свойства таких растворов является актуальной задачей.

Одним из таких воздействий является лазерное, широко применяемое в современной медицине. Лазеры широко применяются в диагностике, терапии, хирургии и косметологии. Воздействие лазерного излучения на биологические ткани хорошо изучено. Однако элементарные процессы, проходящие в организме при лазерном воздействии, мало изучены. Одним из важнейших биологических объектов являются белки. Влияние лазерного излучения на белки мало изучено. Для исследования свойств белков широко используются водные растворы белков.

Целью данной работы было исследовать влияние лазерного излучения с длиной волны 1064 нм на водные растворы белков. Известно, что излучение на длине волны 1064 хорошо поглощается водой, что делает возможным использование таких лазеров для хирургических вмешательств. Хорошо изучено влияние подобного лазерного скальпеля на биологические ткани, однако, остается слабо изученным вопрос о влиянии импульсного лазерного излучения на структуру и свойства белковых коллоидов, хотя данное изучение позволило бы понять, как хирургический лазер влияет на состояние белков в организме пациента, в том числе и иммунных.

В данной работе проведено изучение влияния продолжительного импульсного лазерного излучения на структуру и свойства водных растворов трех белков: бычьего сывороточного альбумина, лизоцима и IgG. Растворы были приготовлены при pH 7.4. В качестве источника излучения использовался Nd:YAG лазер со следующими характеристиками: длина волны излучения 1064 нм, частота следования импульсов 1 кГц, время импульса 3.6 нс., энергия в импульсе 8 мДж. Растворы облучали в течение 30 минут.

После облучения растворы исследовались с помощью фотонной корреляционной спектроскопии, спектроскопии УФ-видимого диапазонов, флуоресцентной спектроскопии, рефрактометрии. Изменения зависят от типа белка и времени воздействия. Однако, во всех случаях наблюдалось уменьшения диаметра гидродинамической оболочки растворов, что может свидетельствовать о частичной фрагментации белков в растворе. Во всех случаях увеличивалось поглощение белковых растворов в области аминокислотных остатков. Нами зарегистрирован процесс денатурации белка, вызванный локальным нагревом плазмы, его агрегацию, вызванную ударными, акустическими волнами и образованием АФК и частичную фрагментацию белков, вызванную воздействием плазмы. Полученные нами результаты показывают, что 30-минутное воздействие лазером с указанными выше характеристиками оказывает влияние на белковые коллоиды, характер изменений зависит от времени воздействия и типа белка.

## Литература:

1. Gudkov S.V. et al. Effect of mechanical shaking on the physicochemical properties of aqueous solutions //International journal of molecular sciences. – 2020. – Т. 21. – №. 21. – С. 8033.
2. Gudkov S.V. et al. Physical and chemical changes that occur in water when drops fall on a hard surface (rain, waterfall, shower) //Journal of Molecular Liquids. – 2024. – Т. 401. – С. 124686.

Устный доклад

# КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ И ПЛОТНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СУБМИКРОННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ САХАРОВ. ВОЗМОЖНЫЙ НОВЫЙ КРИОПРОТЕКТОРНЫЙ ФАКТОР

Пеньков Н.В.

ФИЦ Пущинский научный центр биологических исследований РАН,  
г. Пущино, ул. Институтская, д. 3  
e-mail: nvpenkov@rambler.ru

Как известно, в водных растворах низкомолекулярной органики спонтанно образуются стабильные неоднородности. Они были обнаружены и изучались с помощью методов светорассеяния [1-8] и некоторых других [9,10]. Установлено, что размеры этих неоднородностей составляют сотни нанометров, поэтому в наших работах они были названы субмикронными неоднородностями (СМН) [6-8]. Очевидно, что СМН – это области повышенной концентрации органических молекул, поэтому представляет интерес концентрационный контраст и его зависимость от концентрации органики в растворе. Концентрационный контраст можно рассчитать по оптическому контрасту СМН. Подход для его определения на основе теории Ми и методов светорассеяния был разработан в нашей недавней работе [6] и опробован на растворах некоторых сахаров. Также, калибруя интенсивность рассеяния света по стандартным суспензиям, рассчитывались концентрации СМН.

В настоящей работе проводилось изучение СМН в водных растворах сахаров (глюкозы, сахарозы, мальтозы, трегалозы) с концентрациями 0.5 – 1.5 моль%. Из оптического контраста СМН было рассчитано превышение концентрации сахаров в СМН относительно среднего значения в растворе: 2 – 80%. Это соответствует приросту плотности СМН: 0.2 – 3%. Числовая концентрация СМН в указанных растворах составляет  $\sim 10^{12} - 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , а их объёмная доля  $\sim 0.1 - 10\%$ . Полученные данные показывают, что СМН, хоть и малозаметны (из-за малого контраста), но являются существенной частью водных растворов сахаров и, по всей видимости, другой органики тоже [8].

Концентрация и объёмная доля СМН в растворах глюкозы и сахарозы монотонно возрастают с ростом концентрации сахаров при уменьшающемся контрасте. При этом для растворов трегалозы и мальтозы эти зависимости немонотонны. Таким образом, характеристики СМН зависят как от концентрации, так и от типа сахара. Эти закономерности представляют не только физико-химический интерес, но и, возможно, определяют новый аспект процесса криоконсервации. Как известно, разные сахара, являясь непроникающими в клетку криопротекторами, обладают разной эффективностью. Прилагается немало усилий в подборе смесей сахаров (часто вместе с другими криопротекторами) для достижения наиболее эффективного влияния на процессы образования и роста кристаллов льда [11,12]. Однако практически всегда этот подбор делается эмпирически, без осознания на фундаментальном физико-химическом уровне. Наличие СМН в этих растворах до сих пор не учитывалось, хотя они могут выступать в качестве зародышей или, наоборот, ингибиторов роста кристаллов льда. Данное направление, безусловно, представляет интерес для дальнейшего исследования.

## Литература:

- [1] M.F. Vuks, L.V. Shurupova. The scattering of light and phase transition in solutions of tertiary butyl alcohol in water. *Opt. Commun.* **1972** 5:277–278.
- [2] M. Sedláč. Large-Scale Supramolecular Structure in Solutions of Low Molar Mass Compounds and Mixtures of Liquids. III. Correlation with Molecular Properties and Interactions. *J. Phys. Chem. B* **2006** 110:13976–13984.
- [3] N.F. Bunkin, G.A. Lyakhov, A.V. Shkirin, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, S.V. Ugraitskaya, E. E. Fesenko, Jr. Study of the submicron heterogeneity of aqueous solutions of hydrogen-bond acceptor molecules by laser diagnostics methods, *Phys. Wave Phenom.* **2015** 23(4):241–254.
- [4] N.F. Bunkin, A.V. Shkirin, G.A. Lyakhov, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, S.V. Ugraitskaya, E. E. Fesenko, Jr. Droplet-like heterogeneity of aqueous tetrahydrofuran solutions at the submicrometer scale. *J. Chem. Phys.* **2016** 145(18):184501.
- [5] N.F. Bunkin, G.A. Lyakhov, A.V. Shkirin, S.V. Krivokhizha, A.A. Afonin, A.V. Kobelev, N.V. Penkov, E. E. Fesenko, Jr. Laser diagnostics of the mesoscale heterogeneity of aqueous solutions of polar organic compounds. *Phys. Wave Phenom* **2018** 26(1):21–35.
- [6] N.V. Penkov, V.A. Zhmurin, A.V. Kobelev, E.E. Fesenko (Jr.), N.A. Penkova. Dispersed, optical and concentration characteristics of submicron heterogeneities in aqueous solutions of sugars. *J. Mol. Liq.* **2024** 398:124281.



## Устный доклад

- [7] N.V. Penkov, V.A. Zhmurin, A.A. Manokhin, A.V. Kobelev and N.A. Penkova, Capillary effects of submicron heterogeneities in aqueous solutions of sugars. The additional mechanism of microfluidics, *J. Mol. Liq.* **2024** 410:125638.
- [8] N. V. Penkov, N. A. Penkova, V. A. Zhmurina, and A. G. Pogorelov. Natural Submicron Heterogeneities in Aqueous Solutions of ATP. *Phys. Wave Phenom.* **2024** 32(3):178–186.
- [9] A.V. Orlova, R.R. Andrade, C.O. da Silva, A.I. Zinin and L.O. Kononov, Polarimetry as a tool for the study of solutions of chiral solutes, *Chem Phys Chem* **2014** 15:195–207.
- [10] L. O. Kononov, Chemical reactivity and solution structure: On the way to a paradigm shift? *RSC Adv.* **2015** 5(58):46718–46734.
- [11] K. W. Yong, L. Laouar, J.A.W. Elliott, N.M. Jomha. Review of non-permeating cryoprotectants as supplements for vitrification of mammalian tissues. *Cryobiol.* **2020** 96:1–11.
- [12] K.A. Murray, M.I. Gibson. Chemical approaches to cryopreservation. *Nat Rev Chem* **2022** 6:579–593.

## Устный доклад

# ЗАВИСИМОСТЬ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ ОТ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ РАСТВОРЯЕМОГО ВЕЩЕСТВА

**Родионова Н.Н.<sup>1</sup>, Пеньков Н.В.<sup>2</sup>, Слатинская О.В.<sup>1,3</sup>, Тарасов С.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> ООО «НПФ «МАТЕРИА МЕДИКА ХОЛДИНГ»; Департамент Научных исследований и разработок;

<sup>2</sup> Институт биофизики клетки РАН – обособленное подразделение Федерального исследовательского центра «Пушинский научный центр биологических исследований РАН»;

<sup>3</sup> Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

*rodionovann@materiamedica.ru*

Не вызывает сомнений, что внешнее непродолжительное (до 30 мин) воздействие, в том числе механическое, оказываемое незадолго до измерений, влияет на молекулярный состав и физико-химические свойства воды и водных растворов [1-3]. В настоящей работе мы оценивали возможность изменения свойств растворов за счет механической обработки сухого порошка, используемого для приготовления данных растворов, а также сравнивали полученный результат с влиянием механической обработки уже готового раствора. В качестве объектов исследования выбраны порошок сульфата натрия и порошок лактозы моногидрата, а также растворы, приготовленные из них. В качестве способа механоактивации выбрано встряхивание на вортексе (3000 об/мин, 10 с). Методами динамического рассеяния света и ТГц время-разрешенной спектроскопии оценивали показатели следующих растворов сульфата лактозы и лактозы моногидрата: (1) порошок растворен деликатным (без встряхивания) перемешиванием; (2) порошок растворен перемешиванием со встряхиванием на вортексе; (3) порошок, предварительно встряхнутый на вортексе, растворен деликатным (без встряхивания) перемешиванием; (4) порошок, предварительно встряхнутый на вортексе, растворен перемешиванием со встряхиванием на вортексе.

При исследовании растворов сульфата натрия оказалось, что встряхивание только порошка, или только раствора, а также порошка и приготовленного из него раствора приводят к увеличению интенсивности рассеяния получаемого раствора, что, по-видимому, обусловлено формированием неоднородностей во всех растворах. Встряхивание порошка перед растворением приводит к уменьшению гидродинамического диаметра частиц размером менее 1 нм, являющимися ионам (с гидратной оболочкой), на которые диссоциируют молекулы  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  при растворении. Однако ни встряхивание порошка, ни встряхивание раствора, ни порошка и приготовленного из него раствора не изменяют показатели ТГц-спектроскопии полученных растворов.

В исследовании растворов моногидрата лактозы установлено, ни встряхивание порошка, ни встряхивание раствора, приготовленного из «интактного» порошка, не изменяют оцениваемые характеристики растворов. Однако встряхивание порошка с последующим встряхиванием получаемого раствора, приводит к изменению соотношения вкладов фракций неоднородностей, присутствующих в растворе лактозы (вклад мономолекулярной фракции лактозы (с гидратной оболочкой) размером около 1 нм увеличивается, тогда как вклад субмикронной фракции размером 160 нм уменьшается), а также к увеличению показателя  $(A/\omega^2)$ , указывающему на увеличение числа водородных связей.

Таким образом показано, что не только механическое воздействие на раствор, но и на сухой порошок, используемый для приготовления раствора, оказывает значительное влияние на физико-химические свойства растворов. Надо отметить, что мы обнаружили влияние механического воздействия и на порошок неорганической соли, и на порошок органического вещества, однако характер оказываемых эффектов зависит от конкретного порошка. Принимая во внимание возможность порошков лактозы излучать в радиодиапазоне (специфично в зависимости от предварительной пробоподготовки) [2], результаты данной работы в целом согласуются с обнаруженной возможностью изменять свойства порошков, подвергнутых встряхиванию совместно с другим порошком, и получаемых из них растворов [5].

## Литература:

- [1] Домрачев ГА и др. Механохимически активированное разложение воды в жидкой фазе. ДАН. 1993;329(2):186-188.
- [2] Shcherbakov I.A. Current Trends in the Studies of Aqueous Solutions. Phys. Wave Phen. 2022;30(3):129–134.
- [3] Руднев СД и др. О влиянии механоактивации и свч-воздействия на поверхностные свойства воды и водных растворов. Новые технологии / New technologies. 2022;18(3):74-84.
- [4] Stepanov GO et al., The Effect of Aqueous Solutions Processed Using Gradual Technology on the Emission of a Carbohydrate (Lactose) in the RF Range. Phys Wave Phenom. 2024;32:43–7.
- [5] Petrova A et al. Phenomenon of Post-Vibration Interactions. Symmetry. 2024;16(8):958.

Устный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИК-ОБЛУЧЕННОГО ВОДЯНОГО ПАРА НА ВОДНЫЕ РАСТВОРЫ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ

Яблонская О.И.,<sup>1\*</sup> Воейков В.,<sup>2</sup> Буравлева Е.,<sup>2</sup> Трофимов А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт Биохимической Физики им. М.Н. Эмануэля РАН

<sup>2</sup> Биологический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова

\*e-mail: olga.yablonsky@gmail.com

Водяной пар хорошо поглощает инфракрасное (ИК) излучение, и это может привести к изменению свойств воды. Наши исследования показали, что предварительная обработка водяного пара ИК-излучением может сделать пар способным влиять на характеристики водных растворов и биологических объектов, с которыми он контактировал.

В наших исследованиях мы изучали, как ИК-облученный водяной пар, так называемый СоНу – coherent humidity, влияет на воду и биологические системы. Вода, обработанная СоНу, показала заметные изменения, включая более низкий окислительно-восстановительный потенциал и поверхностное натяжение, а также более высокую диэлектрическую постоянную [1]. Эти свойства типичны для воды EZ, которая образуется на гидрофильных поверхностях [2]. Эта форма воды существенно отличается от «объемной» по своим физико-химическим свойствам и биологической активности. Карбонатные и фосфатные буферы, подвергнутые воздействию СоНу, обладали повышенной буферной емкостью при титровании кислотой или щелочью. Эти эффекты отсутствовали при обработке воды и водных растворов необлученным влажным воздухом, что подчеркивает особую роль ИК-излучения.

В ходе исследования влияния СоНу на растворенные в воде ферменты [3] было обнаружено, что кратковременное воздействие СоНу защищает такие разные ферменты как щелочная фосфатаза, пероксидаза хрена и каталаза, от теплового повреждения, окислительного стресса и потери активности после воздействия денатурирующих веществ. Мы предполагаем, что СоНу может стабилизировать белки, изменяя свойства окружающей воды.

Кроме того, добровольцы использовали ИК-облученный водяной пар в качестве ингаляций в течение пяти дней, что привело к заметному повышению антиоксидантной активности их слюны. Этот эффект сохранялся даже после окончания периода ингаляций. Это повышение было связано с более высокими уровнями слюнного альбумина, что указывает на потенциальную пользу СоНу для здоровья в повышении антиоксидантной защиты организма.

Наше исследование показывает, что ИК-облученный водяной пар обладает способностью изменять свойства воды, биологических молекул и живых организмов. Эти результаты указывают на необходимость дальнейших исследований возможности использования СоНу в различных областях, от химической инженерии до применения в медицинской практике.

## Литература:

- [1] O. Yablonskaya, V. Voeikov, E. Buravleva, A. Trofimov and K. Novikov, Physicochemical effects of humid air treated with infrared radiation on aqueous solutions, *Water*, 13(10), p.1370, (2021).
- [2] A. Wang and G.H. Pollack, Exclusion-zone water inside and outside of plant xylem vessels, *Scientific Reports*, 14(1), p.12071, (2024).
- [3] O.I. Yablonskaya, V.L. Voeikov, K.N. Novikov, E.V. Buravleva, V.A. Menshov and A.V. Trofimov, Effect of Humid Air Exposed to IR Radiation on Enzyme Activity, *International Journal of Molecular Sciences*, 23(2), p.601, (2022).

Устный доклад

# ВОЗРАСТНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ТИМОПОЭЗА ПРИ ПОТРЕБЛЕНИИ ВОДЫ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ДЕЙТЕРИЯ

**Яглова Н.В., Обернихин С.С., Тимохина Е.П., Яглов В.В., Назимова С.В.**

*НИИ морфологии человека им. ак. А.П. Авцына ФГБНУ «РНЦХ им. ак. Б.В. Петровского»,  
Москва, Россия  
e-mail: yaglova@mail.ru*

Тимус – центральный орган иммунной защиты, формирующий пул Т-лимфоцитов, распознающих бактериальные, вирусные, опухолевые антигены. С возрастом тимус претерпевает инволюцию, которая усугубляется действием эндогенных и экзогенных факторов. Целью исследования было оценить развитие возрастных изменений в тимусе при потреблении организмом воды с различным содержанием дейтерия. Эксперимент был выполнен на половозрелых самцах крыс Вистар, потреблявших воду с концентрацией дейтерия 150 (контрольная группа) и 10 ppm в течение 4 недель. Проведено цитофлуориметрическое исследование Т-лимфоцитов и их предшественников в первичной культуре тимоцитов и периферической крови.

У крыс, потреблявших воду со стандартным содержанием дейтерия, процесс пролиферации клеток-предшественников и их дальнейшей дифференцировки протекал волнообразно. К концу эксперимента отмечалось снижение активности тимопоэза, свидетельствующее о наступлении инволютивных изменений. Через сутки после начала эксперимента у крыс, потреблявших воду с пониженным содержанием дейтерия, отмечалось многократное пропорциональное увеличение содержания в тимусе тимобластов и одновременно дифференцированных Т-клеток, что указывало на активацию тимопоэза и подтверждало ранее полученные данные об активации тимопоэза у взрослых животных при понижении содержания дейтерия в организме в течение суток [1]. Эти данные коррелируют с результатами предшествующего исследования, показавшего активацию секреторных процессов в щитовидной железе и увеличение концентрации тироксина в системном кровотоке, являющегося стимулятором тимопоэза, через сутки после потребления воды с пониженным до 10 ppm содержанием дейтерия [2]. К третьим суткам наступало истощение пролиферации тимобластов и их дифференцировки. На 7-ые сутки усиливалась миграция высокодифференцированных Т-клеток из тимуса в кровоток. Через две недели после начала эксперимента наблюдалось повторное усиление дифференцировки тимоцитов, а через три недели – увеличение пролиферации лимфобластов в тимусе. Через 4 недели отмечено продолжающееся формирование предшественников Т-клеток в тимусе и одновременно активная миграция зрелых Т-клеток в системный кровоток, превышающие значения крыс, потреблявших воду с содержанием дейтерия 150 ppm.

Полученные данные свидетельствуют, что потребление воды с пониженным содержанием дейтерия активизирует тимопоэз и замедляет инволютивные процессы в тимусе.

*Исследование выполнено по государственному заданию № FGFZ-2022-0035.*

## Литература:

- [1] Н.В. Яглова, С.С. Обернихин, Е.П. Тимохина, С.В. Назимова, В.В. Яглов. Реактивные изменения лимфоцитопоэза в тимусе при кратковременном уменьшении содержания дейтерия в организме, Бюллетень экспериментальной биологии и медицины, Т. 173, №4, С.508-511, 2022. DOI: 10.47056/0365-9615-2022-173-4-508-511
- [2] Н.В. Яглова, С.С. Обернихин, Е.П. Тимохина, В.В. Яглов. Реакция гипофизарно-тиреоидной оси на кратковременное изменение содержания дейтерия в организме, Бюллетень экспериментальной биологии и медицины, Т.171, № 2, С. 232-234, 2021.

Постерный доклад

# НОВОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ФЛУОРЕСЦЕИНА В КАЧЕСТВЕ РАТИОМЕТРИЧЕСКОГО ЗОНДА ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ЭНДОГЕННОЙ $\text{HOBr}$

Григорьева Д.В.<sup>1</sup>, Горудко И.В.<sup>1</sup>, Костевич В.А.<sup>2,3</sup>, Горбунов Н.П.<sup>2</sup>,  
Панасенко О.М.<sup>3</sup>, Соколов А.В.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь

<sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт экспериментальной медицины», ул. Академика Павлова, 12, Санкт-Петербург, 197022, Россия

<sup>3</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени академика Ю.М. Лопухина Федерального медико-биологического агентства», ул. Малая Пироговская, 1а, Москва, 119435, Россия  
dargr@tut.by

Среди активных форм галогенов (АФГ), образующихся в реакциях, катализируемых гем-содержащими пероксидазами млекопитающих (миелопероксидазой (МПО), пероксидазой эозинофилов, лактопероксидазой, пероксидазином 1),  $\text{HOCl}$  и  $\text{HOBr}$  являются наиболее реакционноспособными и играют важную роль в физиологических и патологических процессах. Существуют многочисленные методы регистрации АФГ с использованием флуоресцентных зондов, однако разработка способов избирательной регистрации АФГ, и, прежде всего,  $\text{HOBr}$  является одной из нерешенных задач. Флуоресцеин – органическое соединение, относящееся к семейству ксантеновых красителей. Изотиоцианатные производные флуоресцеина используются в биохимии, молекулярной биологии и медицине в качестве флуорофоров для обнаружения антигенов и антител. Ранее нами было показано, что после взаимодействия с  $\text{HOBr}$ , а также в системе  $\text{МПО-H}_2\text{O}_2\text{-Br}^-$  флуоресцеин превращается в эозин Y, обладающий флуоресценцией на длине волны 540 нм при ее возбуждении на длине волны 520 нм. Целью настоящей работы явилось исследование возможности использования реакции бромирования флуоресцеина, в результате которой образуется эозин Y, для регистрации продукции  $\text{HOBr}$  в суспензии нейтрофилов. Показано, что при добавлении в суспензию нейтрофилов в фосфатно-солевом буфере (pH 7,35), содержащем флуоресцеин (5 мкМ) и  $\text{NaBr}$  (30 мМ), стандартного индуктора активации нейтрофилов форболового эфира РМА (50 нМ) регистрировалось 2,5-кратное увеличение интенсивности флуоресценции на длине волны 540 нм при ее возбуждении на длине волны 520 нм по сравнению с нестимулированными клетками, что свидетельствует о продукции  $\text{HOBr}$  и образовании эозина Y. Важно отметить, что при активации клеток РМА в отсутствие  $\text{NaBr}$  в клеточной суспензии на используемых длинах волн возбуждения/регистрации не было выявлено достоверного увеличения интенсивности флуоресценции. Это говорит о том, что в подобранных условиях выявляется именно продукция клетками  $\text{HOBr}$ . Для оценки вклада других оксидантов, ответственных за преобразования флуоресцеина в эозин Y в суспензии активированных нейтрофилов, использовали ингибиторы различных ферментных систем (ингибитор сборки и активации НАДФН-оксидазы – DPI, ингибитор МПО – 4-АВАН, ингибитор индуцибельной NO-синтазы – L-NAME). Индуцированное РМА преобразование флуоресцеина в эозин Y в суспензии нейтрофилов ингибировалось в присутствии 4-АВАН или DPI, подтверждая, что для образования эозина Y в суспензии активированных нейтрофилов важны два аспекта – каталитически активная МПО и респираторный взрыв, как источник  $\text{H}_2\text{O}_2$ , необходимого для катализа МПО. L-NAME не оказывал влияния на образование эозина Y в суспензии РМА-активированных нейтрофилов, свидетельствуя о том, что  $\text{ONOO}^-$  не вносит существенного вклада в преобразование флуоресцеина в эозин Y. Таким образом, флуоресцеин представляет собой чувствительный и селективный ратиометрический флуоресцентный зонд (зонд переключения) для детекции  $\text{HOBr}$  в живых клетках, а также для оценки бромлирующей активности МПО и других пероксидаз.

Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-315 на организацию и развитие Научного центра мирового уровня “Фотоника”).



## Постерный доклад

**ДАТЧИК ЯМР ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ПОДВОДНЫХ ОБЪЕКТОВ****Тарасова А.А.<sup>1</sup>, Анисимов Н.В.<sup>2</sup>**<sup>1</sup>Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова,<sup>2</sup>Факультет фундаментальной медицины, МГУ имени М.В. Ломоносова,  
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1  
e-mail: arina.tarasova99@mail.ru

Вода обладает уникальными физико-химическими характеристиками, к которым относятся большая диэлектрическая постоянная  $\epsilon=80$  и низкая электропроводность. Сочетание этих свойств позволяет создать предельно компактный датчик сигнала ЯМР для исследования подводных объектов. Мы реализовали резонансный LC контур датчика на базе соленоида с индуктивностью  $L$  без подключения к нему внешней емкости. Резонансная частота  $f$  такого контура определяется формулой  $2\pi f=(LC)^{-1/2}$ , где  $C$  – собственная (межвитковая) емкость катушки. В обычных условиях эта емкость мала – единицы пикофарад и менее, и сопоставима с паразитными емкостями окружения. Но при погружении соленоида в воду данная емкость возрастает на величину диэлектрической постоянной воды, т.е. в 80 раз. Если частота контура близка к ларморовой, то внутри катушки возможно усиление сигнала ядерной индукции от прецессирующих спинов. При этом данный контур должен быть индуктивно связан обычной, подключаемой к приемнику с помощью кабеля, катушкой, имеющейся в комплекте магнитно-резонансного томографа (МРТ) или спектрометра ЯМР.

В ЯМР и МРТ практикуется использование индуктивно связанных катушек – обычной, подключенной к приемнику с помощью кабеля, и изолированного резонансного контура, расположенного предельно близко к зоне интереса, включая вариант имплантного исполнения. Для такого контура применяется термин «wireless coil» – беспроводная катушка. Выигрыш в чувствительности при детектировании сигнала от зоны интереса при использовании беспроводной катушки достигает  $KQ$ , где  $K$  – коэффициент взаимной индукции проводной и беспроводной катушек, а  $Q$  – добротность последней [1]. Но обычно беспроводную катушку реализуют из двух сосредоточенных элементов – индуктивности и емкости.

Беспроводной контур, содержащий лишь сосредоточенную индуктивность, даёт те же полезные функции, что и контур с сосредоточенной емкостью. Причем, для управления частотой контура можно изолировать часть витков соленоида от воды. Зато упрощается ее конструкция и манипуляции с ней при исследовании подводных объектов. Особенно это касается исследований растений – меньше вероятность того, что их части попадут внутрь контура, образованного проводами, соединяющими емкость с концами соленоида.

Мы проводили эксперименты на 0.5 Тл клиническом МРТ Bruker Tomikon S50. Беспроводная катушка была реализована на базе 10 виткового соленоида с внутренним диаметром 2 см, намотанного медным проводом диаметром 2 мм. Его индуктивность  $L=1.2$  мкГн, а резонансная частота в воде составила 21.08 МГц, что соответствует ларморовой частоте протонов в поле 0.5 Тл. При тестовых измерениях мы фиксировали повышение сигнала ЯМР внутри соленоида примерно в 4-4.5 раз по сравнению с сигналом вне его [2].

Внутри данного соленоида мы размещали некоторых обитателей аквариума – растения, моллюски, рыбы и проводили их МР-сканирование. В результате получали изображения, на которых сигнал от этих объектов был в 2.5 и более раз сильнее, чем при использовании обычной фирменной катушки без соленоида.

При исследовании живых объектов надо обращать внимание на возможность повышения электропроводности воды из-за биологической активности. Чтобы нивелировать эти процессы можно использовать дистиллированную проточную воду.

**Литература:**

- [1] R. R. Harrison Designing Efficient Inductive Power Links for Implantable Devices. 2007 IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS). DOI: 10.1109/ISCAS.2007.378508.(2007).  
[2] Н.В. Анисимов, Ю.А. Пирогов. Резонансные свойства погруженного в воду соленоида. Электромагнитные волны и электронные системы, 29 (2), 44-54 (2024).

# ВОДНЫЕ РАСТВОРЫ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ



Приглашенный доклад

# ГИДРОЗОЛИ ЗОЛОТА. ОТ СИНТЕЗА К РЕШЕНИЮ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

Дементьева О.В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН  
Ленинский проспект, 31, стр. 4, Москва, 119071, Россия  
e-mail: dema\_ol@mail.ru*

Эффект локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР), присущий наночастицам (НЧ) металлов и обуславливающий их способность к поглощению и рассеянию излучения строго определенной длины волны, а также возможность его использования для различных практических задач относятся к числу самых «горячих» тем, обсуждаемых в научно-техническом сообществе в последние 20–30 лет. При этом одной из ключевых задач является поиск путей управления положением ЛППР как в жидких, в частности, водных средах, так и на планарных подложках.

Представлены результаты исследований, посвященных коллоидно-химическому синтезу НЧ золота с заданными структурой и свойствами, а также их применению для решения практических задач.

Основные подходы, позволяющие регулировать морфологию НЧ и обеспечить настройку их ЛППР на заданную длину волны в широком оптическом диапазоне, связаны с созданием композитных структур. Представлен метод создания композитных структур ядро/оболочка и способы их дополнительной функционализации (например, за счет прививки молекул красителей).

Показана возможность использования синтезированных частиц в материаловедении (в первую очередь, при решении биомедицинских задач), а также в качестве сенситизаторов при фототермической и лучевой терапии опухолей.

Приглашенный доклад

# ТРАНСФИНИТНЫЕ ЧИСЛА В ТЕХНОЛОГИИ РАЗБАВЛЕНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

**Кузьмин В.И.,<sup>1</sup> Тытик Д.Л.,<sup>2</sup> Суворова О.В.<sup>2</sup>**<sup>1</sup> *Российский технологический университет (МИРЭА), 119454, Москва, просп. Вернадского 78*<sup>2</sup> *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
119991 Москва, Ленинский пр. 31*

Атомное представление о строении вещества давно и успешно используется в науке. Широко известно использование, например, числа Авогадро ( $1 \text{ моль} = 6.023 \times 10^{23}$  молекул). Поскольку физика привыкла работать со средними величинами, часто большие числа маскируются осреднением, например, использованием величины энергии в расчете на одну молекулу. Тем не менее, известны данные о зависимости устойчивости (стабильности) системы, например, кластеров ГЦК металлов от числа составляющих их атомов (магические числа атомов в кластере). Представляется целесообразным исследовать свойства широкого класса физико-химических систем в зависимости не только от числа составляющих ее элементов, но и от числа, произведенных с ней «манипуляций» разного рода (разбавление, перемешивание, воздействие физическими полями). Чтобы иметь возможность одновременно работать на разных масштабах, например, килограмм-метр-секунда и атомные единицы, необходимо использовать систему трансфинитных чисел. Как отмечал Р.Бэр – «...для системы счисления имеется возможность: либо следовать естественному расчленению сосчитываемых множеств данного ряда, либо, напротив, насильственно перестраивать множества, уничтожая их собственное строение и вводя иное, им чуждое» [1].

Предложено представлять физико-химические величины в классе трансфинитных чисел, учитывая все элементы системы. Обсуждается метод исследования возможных критических состояний вещества в технологии многократного разбавления и механического воздействия на водные растворы люцигенина по данным люминесценции.

**Литература:**

1. Бэр Р. Теория разрывных функций. ГТТИ, М.-Л. 1932.

Приглашенный доклад

# ФЕНОМЕН ФОРМИРОВАНИЯ И 1D РОСТА НАНОФИБРИЛЛ ОКСИГИДРОКСИДОВ АЛЮМИНИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ ПАРАМИ ВОДЫ ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКИХ СПЛАВОВ $\text{Me}(\text{Al})$ , ГДЕ $\text{Me} = \text{Hg}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Bi}, \text{Pb}$ , И РАСПЛАВА $\text{Al}$

Ходан А.Н.,<sup>1</sup> Копица Г.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН,  
Ленинский проспект, 31, 119071, Москва, Россия

<sup>2</sup> НИЦ КИ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова,  
г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, 188300, Ленинградская обл., Россия  
e-mail: anatole.khodan@gmail.com

Впервые феномен формирования и 1D роста нанофибрилл оксигидроксида алюминия при окислении парами воды поверхности жидкометаллического сплава  $\text{Hg}(\text{Al})$  был описан Н. Wislicenus [1], позднее аналогичные процессы были обнаружены при окислении парами воды поверхности жидких растворов  $\text{Me}(\text{Al})$ , где  $\text{Me} = \text{Hg}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Bi}, \text{Pb}$ , а также для расплава чистого  $\text{Al}$  в среде влажного аргона [2]. Но до настоящего времени механизм зарождения, формирования и 1D роста нанофибрилл оксигидроксида алюминия диаметром  $\sim 5\text{-}9$  нм при окислении поверхности жидкометаллических сплавов  $\text{Me}(\text{Al})$  в диапазоне температур от 20 до 670 °C остаётся не решённой фундаментальной физико-химической проблемой. Тем не менее, экспериментальные исследования и анализ условий протекания реакций окисления парами воды жидких растворов  $\text{Me}(\text{Al})$  позволили предложить ряд новых лабораторных нанотехнологий, имеющих перспективы прикладного использования. Основной вклад в развитие этого направления нанотехнологий внесли исследования, выполненные в LSPM UPR3407 CNRS во Франции [2]; а также в России, в результате сотрудничества ФЭИ им. А.И. Лейпунского и ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, где были разработаны и запатентованы способы синтеза оксидных 3D наноструктур путём окисления жидкометаллических расплавов  $\text{Me}(\text{Al})$ ,  $\text{Me} = \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Bi}, \text{Pb}$  во влажном воздухе или аргоне [3]. Установлено, что все синтезированные оксидные 3D наноматериалы имеют свойства близкие к классическим аэрогелям, но имеют принципиальное отличие в способе синтеза - одностадийный процесс формирования и 1D роста нанофибрилл в отсутствие жидкофазного геля. Все синтезированные наноматериалы являются рентгеноаморфными и содержат, как химически связанную структурную воду, так и молекулярную воду в межслоевом пространстве предбежитной структуры, а также физически связанную или адсорбированную молекулярную воду на поверхности. Отжиг оксидных 3D наноструктур в диапазоне 25 - 1700 °C существенно изменяет их физико-химические свойства: средний диаметр фибрилл возрастает от  $\sim 5$  до  $\sim 300$  нм, структура аморфного гидратированного псевдобемита  $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 4,6\text{H}_2\text{O}$  последовательно трансформируется в кристаллические фазы:  $\gamma$ -,  $\theta$ -, и  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Открытая пористость и монолитность 3D наноструктуры сохраняются при отжиге, но линейные размеры образцов изотропно и кратно уменьшаются, но изменяются их физические свойства: объёмная плотность от  $\sim 0,02$  до 3 г/см<sup>3</sup>, открытая пористость от 99,6% до 25%, более 100 раз уменьшается удельная поверхность. Предложена количественная физическая модель, описывающая эволюцию 3D наноструктуры при отжиге [4,5]. Особый интерес для исследований представляет селективность связывания спиновых изомеров  $\text{H}_2\text{O}$ , как при формировании наноструктуры оксигидроксида, так и изменения соотношений орто/пара компонент при адсорбции паров воды. Новые 3D наноструктуры являются перспективной основой для создания функциональных наноматериалов: нелинейные оптические среды, фотонные кристаллы, элементы оптики ИК, ТГц и ГГц, сенсорные устройства.

## Литература:

- [1] Wislicenus, H. // Zeitschrift Chemie Industrie Kolloide. 1908. V. 2. P. XI-XX.
- [2] Vignes, J-L., Mazerolle, L., Michel, D. // Key Eng. Mater. 1997. V. 132-136. P. 432-435.
- [3] Мартынов, П. Н., Ходан, А. Н., Асхадуллин, Р. Ш. и др. // Новые промышленные технологии. 2008. Т. 4, С. 48-52.
- [4] Khodan, A., Nguyen, T. H. N., Esaulkov, M. et al. // J. Nanopart. Res. 2018. V. 20. P. 194-201.
- [5] Khodan, A., Kanaev, A., Esaulkov, M. et al. // Nanomaterials 2022. V. 12. P. 3591-3613.



Устный доклад

# РАДИОФИЗИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ОБРАЗОВАНИЯ ПИКОВ В L-ДИЭЛЬКОМЕТРИИ

**Галль И.Р.,<sup>1</sup> Куанашив В.Т.,<sup>2</sup> Барбин Н.М.,<sup>2</sup> Галль Н.Р.<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> *Институт аналитического приборостроения РАН*

*e-mail: vanyagall@gmail.com*

<sup>2</sup> *Уральский технический институт связи и информатики (филиал УрТИСИ СибГУТИ)*

*e-mail: kuan06@mail.ru*

<sup>3</sup> *Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН*

*e-mail: gall@ms.ioffe.ru*

*e-mail: vayagall@gmail.com*

Спектральная L–диэлькометрия –метод изучения свойств водных и неводных растворов, основанный на изучении поглощения энергии электромагнитного поля, создаваемого в катушке индуктивности при помещении в нее пробирки с пробой. Используемый диапазон частот лежит в интервале 50 кГц – 2 МГц и обычно проводятся измерения частотной зависимости тангенса диэлектрической проницаемости. Для целого ряда сольвентов молекулярной и ионной природы (Cs, K, Na, Li, Ca, Cl, NO<sub>3</sub>, HSO<sub>4</sub>...) эти зависимости носят квазиспектральный характер с выраженными пиками, частотное положение которых специфично в отношении растворенного вещества. Получаемые пики обычно имеют ширину порядка 10-20 кГц.

Низкая частота заставляет предположить, что изменение тангенса диэлектрических потерь связано не с каким либо возбуждением молекул сольвента, но с возбуждением колебаний в их сольватных оболочках, структура которых специфична и различается от молекулы к молекуле и от иона к иону. В настоящее время модель этих процессов не разработана, и исследуемые пики используются в основном как «отпечатки пальцев».

С радиофизической точки зрения внесение водного раствора с переменное ЭМ поле, существующее внутри катушки, приводит к изменению его электрической составляющей, что описывается уравнениями Максвелла. При низкой величине проводимости, основные потери связаны именно с изменением как активной, так и реактивной части диэлектрической восприимчивости раствора.

Процесс удобно рассмотреть как колебания, протекающие в сложном колебательном контуре, включающем как элементы прибора (катушка, переменная емкость) так и свойства внесенного вещества. Сканируя частоту вблизи резонанса, можно снять форму АЧХ этого контура, которая в свою очередь может быть описана относительно простой эквивалентной схемой.

Как оказалось, форма АЧХ получающегося контура для пустой катушки имеет квази гауссову форму с небольшой асимметрией, и частотные зависимости 2го и 3го моментов этих кривых (дисперсии и асимметрии) носят почти монотонный характер с маленькими особенностями не превышающими 10%. При внесении в катушку водного раствора АЧХ становится существенно асимметричнее, и величины дисперсии и асимметрии начинают существенно зависеть от частоты. Как оказалось, частотные зависимости асимметрии этой АЧХ имеют выраженные особенности в тех же точках частотной оси, что и пики на частотной зависимости тангенса диэлектрических потерь. Это открывает новый подход к исследованию водных растворов указанным методом, позволяет рассчитывать величин параметров эквивалентной схемы с лучшим отношением сигнал/шум чем при традиционном подходе.



Устный доклад

# ПОДХОД К ОПИСАНИЮ СВОЙСТВ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ЛИУВИЛЛЯ И МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Горовой Ю.М.

ФБГОУ ВО «Ярославский государственный технический университет»  
150023, Россия, г. Ярославль, Московский проспект, 88  
e-mail: gorovoyj@mail.ru

Водные растворы – сложные неравновесные (метастабильные) многокомпонентные системы, которые могут содержать супрамолекулярные системы (ассоциаты). Специфические свойства водных растворов проявляются на макро- и на микроуровне. Пригожин [1] на основе уравнения Лиувилля разработал подход к описанию сложных неравновесных как классических систем (используя плотность числа состояний в фазовом пространстве Гиббса), так и квантовых систем (используя матрицу плотности). Предлагаемая модификация подхода Пригожина состоит в отказе рассматривать переходные (зависящие от времени) процессы изменения конформации супрамолекулярных систем, ограничившись сопоставлением различных конформаций, то есть, сопоставлением различных метастабильных состояний супрамолекулярной системы. В этом случае уравнение Лиувилля не зависит от времени. Замена в классическом уравнении Лиувилля плотности числа состояний на вероятность нахождения системы в элементарном объеме фазового пространства позволило выявить параметр, характеризующий глубину взаимодействия подсистем, составляющих сложную систему -  $I_c$  - количество взаимной информации. Для квантовых сложных (запутанных) систем этот параметр, как и энтропия фон Неймана, хорошо известен: это – количество квантовой взаимной информации. Предлагаемый подход позволяет в явном виде учесть в уравнении Лиувилля структуру супрамолекулярной системы с помощью графа взаимодействия подсистем и матрицы взаимодействия, сформированной для этого графа на основе матрицы смежности.

Предлагаемый подход позволяет описать процесс самоорганизации супрамолекулярных систем водных растворов (усложнение структуры этих систем) посредством тензорного произведения матриц взаимодействия для классических систем или тензорного произведения матриц плотности для квантовых систем. Поскольку матрицы плотности орто-  $H_2O$  изомера и пара-  $H_2O$  изомера различны, то будут существенно различны и структуры, в которых присутствуют эти изомеры. «Рыхлость» этих структур различна [2]. Уравнение Лиувилля может быть использовано для описания такого различия.

Специфической реакцией супрамолекулярных систем является реакция молекулярного распознавания, в ходе которой структуры лиганда и рецептора должны быть комплиментарны (схема «ключ – замок»). Комплиментарность структур может быть описана с помощью матриц взаимодействия лиганда и рецептора. Реакция молекулярного распознавания может сопровождаться предорганизацией рецептора (благодаря модифицирующему воздействию) [3], которое можно описать, используя уравнение Лиувилля. Известны экспериментальные данные об ИК спектрах собственного излучения и ТГц спектрах поглощения [4,5] супрамолекулярных систем водных растворов на основе которых можно сделать вывод о существовании дистанционного взаимодействия между супрамолекулярными системами аналогичному контактной реакции молекулярного распознавания. Поскольку эта реакция нелокальна, то дистанционное воздействие осуществляет волновой пакет собственного излучения супрамолекулярной системы, параметры которого несут информацию о матрице взаимодействия. Уравнение Лиувилля позволяет описать специфические свойства супрамолекулярных систем водных растворов.

## Литература:

- [1] И. Пригожин. Неравновесная статистическая механика, М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 1, (2009).
- [2] S. M. Pershin, A.F.Bunkin, Observation of temperature evolution of relative concentration ortho/para spin-isomers  $H_2O$  by four-photon spectroscopy, Laser Physics, 19(7), 1410–1414 (2009).
- [3] Y. Gorovoy. The Relationship between Symmetry and Specific Properties of Supramolecular Systems. Symmetry, 14, 2070 (2022). <https://doi.org/10.3390/sym14102070>
- [4] N.V. Penkov, N.A. Penkova. Infrared emission spectroscopy for investigation of biological molecules in aqueous solutions. Phys. Wave Phenom. 29, 164–168. (2021)
- [5] N. Penkov. Antibodies Processed Using High Dilution Technology Distantly Change Structural Properties of IFN $\gamma$  Aqueous Solution. Pharmaceutics (2021), 13, 1864. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics1311186415>
- Solution. Pharmaceutics, 13, 1864. (2021) <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13111864>

Устный доклад

# ОСОБЕННОСТИ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА В ПРИСУТСТВИИ ХИТОЗАНА И КАТИОНОВ МЕДИ

Зеников Г.Р., Хижняк С.Д., Иванова А.И., Пахомов П.М.

ФГБОУ ВО «Тверской Государственный Университет», г. Тверь, Садовый пер., д. 35  
e-mail: zenikov.german@mail.ru

Изучение процессов самосборки в водных растворах супрамолекулярных систем представляют огромный научный и практический интерес. В результате таких процессов могут образовываться различные структуры, которые состоят из супрамономеров – наноагрегаты, нановолокна. Существует возможность подобрать супрамономеры так, чтобы такие системы обладали бактерицидными, биоактивными свойствами. В результате ван-дер-ваальсовых, электростатических взаимодействий, водородных связей могут образовываться пространственные гель-сетки. Одним из примеров таких систем являются гидрогели на основе водного раствора аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра [1]. В результате смешения исходных компонентов в определённых пропорциях получается гель-прекурсор – цистеин-серебряный раствор (ЦСР), структурными единицами которого являются цвиттер-ионы меркаптида серебра (МС), образующие положительно заряженные кластерные цепочки  $-\text{[Ag-S(R)]}_n-$ , где R – остаток L-цистеина. При введении солей-инициаторов, в составе которых есть, например, сульфат-анион, в системах на основе ЦСР происходит гелеобразование. Сульфат-анион, выступает в качестве отрицательно заряженного линкера между кластерами МС, которые имеют положительный заряд. Имеет значение и вводимый вместе с электролитом катион, например,  $\text{Cu}^{2+}$  повышает прочность таких гидрогелей [2]. Введение в данную систему полисахарида природного происхождения, например, хитозана (ХЗ), потенциально может расширить спектр применения систем на основе ЦСР, но может провоцировать новые типы взаимодействий в системе [3]. Известно, что катионы меди образуют комплексные соединения и с хитозаном, и с L-цистеином. Поэтому целью данной работы является изучение особенностей гелеобразования в ЦСР в присутствии катионов меди и хитозана при инициации сульфат-анионом.

В работе изучены различные композиции: ЦСР-ХЗ- $\text{CuSO}_4$ , ЦСР- $\text{CuSO}_4$ . Для сравнения так же были сделаны эксперименты с ЦСР-ХЗ- $\text{Na}_2\text{SO}_4$  и ЦСР- $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . Синтез проводился по двухстадийной методике [3]. На первой стадии синтезировали гель-прекурсор из водных растворов L-Cys и  $\text{AgNO}_3$ ; на второй стадии в ЦСР добавляли ХЗ, а в случае трехкомпонентных систем – раствор электролита – инициатора гелеобразования, содержащего сульфат-анион:  $\text{CuSO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . При этом концентрация L-Cys в образцах составляла 3,0 мМ, молярное соотношение исходных компонентов L-Cys/ $\text{AgNO}_3$  – 1,25-1,27; концентрация ХЗ – от 0,0075-0,0175 мг/мл.  $C_{\text{CuSO}_4} = 0,3-0,7$  мМ.

С помощью различных физико-химических методов установлено, что катионы меди  $\text{Cu}^{2+}$  участвует в процессах комплексообразования и с кластерными цепочками МС, и с молекулами хитозана. При этом молекулы хитозана держатся обособленно от МС, так как обе подсистемы имеют положительный заряд.

## Литература:

- [1] S. Khizhnyak, P. Komarov, M. Ovchinnikov and etc, Mechanism of gelation in low-concentration aqueous solutions of silver nitrate with L-cysteine and its derivatives, Soft Matter, 30, 5168-5184 (2017)
- [2] Я. Андрианова, Д. Вишневецкий, С. Хижняк, П. Пахомов. Исследование процессов гелеобразования в цистеин-серебряном растворе при добавлении сульфатов металлов, Вестник ТвГУ, Серия: Химия. Т. 3. № 53. С. 21-29 (2023)
- [3] G. Zenikov, S. Khizhnyak, A. Ivanova, The Self-Organization and Gelation Processes in a Cysteine–Silver Solution Containing Chitosan and an Electrolyte. Colloid J 86, 370–380 (2024).

Устный доклад

# СРАВНЕНИЕ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЖИДКИХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ЭФИРОВ

Кашурин О.В.,<sup>1,2</sup> Кондратюк Н.Д.,<sup>1,2,3</sup> Ланкин А.В.,<sup>1,2</sup> Норман Г.Э.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

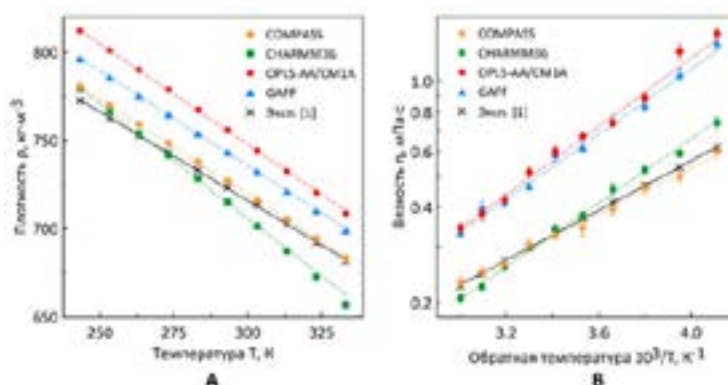
<sup>2</sup> Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup> Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики"

e-mail: oleg20502@gmail.com

Для качественного моделирования жидких ион-селективных барьеров на основе простых эфиров в воде в данной работе проведено сравнение межатомных потенциалов GAFF, OPLS-AA/CM1A, CHARMM36 и COMPASS с целью найти наилучший потенциал. В качестве основного вещества для моделирования использовался диизопропиловый эфир (DIPE).

С использованием выбранных потенциалов проведены расчеты плотности и вязкости DIPE в диапазоне температур 243–333 К. Результаты приведены на Рис. 1.



**Рис. 1.** Температурные зависимости плотности (А) и вязкости (В) диизопропилового эфира, рассчитанные с использованием различных потенциалов

Все 4 потенциала хорошо воспроизводят плотность, отклоняясь от эксперимента не более чем на 4–5 %. Однако, GAFF и OPLS-AA/CM1A дают сильное отклонение для вязкости. Это означает, что GAFF и OPLS-AA не подходят для моделирования жидких мембран на основе простых эфиров. CHARMM36 и COMPASS обеспечивают хорошую сходимость значений вязкости с экспериментом, давая отклонение не больше 10 % при 273–333 К. Предварительные результаты по плотности и вязкости опубликованы в [2].

С использованием CHARMM36 и COMPASS проведена оценка взаимной растворимости воды и DIPE, расчет межфазного натяжения между DIPE и водой, а также оценка коэффициентов распределения этанола в системах DIPE+этанол+вода. CHARMM36 в целом показал удовлетворительное описание растворимости и коэффициентов распределения, и дал точное значение для межфазного натяжения. COMPASS дает значения по растворимости, межфазному натяжению и коэффициентам распределения значительно хуже, чем CHARMM36. Таким образом, по результатам проведенного сравнения можно заключить, что среди рассмотренных потенциалом CHARMM36 является наилучшим для качественного моделирования ион-селективных барьеров на основе простых эфиров.

С использованием потенциала CHARMM36 проведено исследование подвижности ионов в воде и DIPE при наложении в ячейке электрического поля. Подвижность исследовалась при различной напряженности поля. В воде при увеличении напряженности подвижность после определенного значения напряженности начинает нелинейно увеличиваться, а в DIPE начинает уменьшаться и в итоге становится пренебрежимо малой.

## Литература:

- [1] Meng X. et. al // J. Chem. Eng. 2009. V. 54. P. 2353–2358.  
[2] Kashurin O. et. al // Russ. J. Phys. Chem. A. 2023. V. 97(6). P. 1183–1189

Устный доклад

# ХАРАКТЕРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ШИРОКОГО НАБОРА СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ, ДЛЯ ПОЛОСЫ КОЛЕБАНИЙ ВОДЫ $184\text{ см}^{-1}$ В СОПОСТАВЛЕНИИ С ТАКИМИ ЖЕ СВОЙСТВАМИ ДЛЯ МОДЕЛЬНЫХ НАБОРОВ

Крайский А.В.

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,  
119991 Москва Ленинский просп. 53, Россия  
e-mail: kraiskiev@lebedev.ru, kraiskiev2@gmail.com

Продолжены исследования характерных особенностей полученной с помощью КРС полосы собственных частот (СЧ) межмолекулярных колебаний воды для полосы растяжения водородной связи  $184\text{ см}^{-1}$  [1,2]. Метод определения СЧ подробно представлен в [1-5]. Диапазон полосы СЧ частот составил  $169\text{ см}^{-1}$  –  $208\text{ см}^{-1}$ . В работе рассматривался набор спектральных точек, полученных для 65 спектров КРС воды. Получение значений СЧ основывалось на разбиении массива точек на группы, тесно примыкающие к аппроксимирующим их прямым линиям в спектральных координатах: квадрат ширины полосы КР – квадрат положения ее максимума [1-5]. Разбиение проводилось в автоматическом режиме с помощью программы, основанной на разработанном нами алгоритме [2]. Для характеристики качества прилегания точек к прямой линии определялась ширина полосы, содержащей точки и плотность точек на единичный спектральный интервал, как отношение числа точек на ширину этой полосы. Подбор параметров алгоритма дает возможность отфильтровывать точки с высокими плотностями при различных распределениях ближайшего окружения соседних точек. Рассматривались ранговые последовательности собственных частот, ширин полученных полос и плотности точек на единичном частотном интервале. Было обработано три модельных набора, содержащих по 65 случайно разбросанных точек с теми же статистическими параметрами, что и исследованные спектральные точки воды: средними значениями и стандартными отклонениями по обеим координатам, и наклоном аппроксимирующей их прямой проведено сравнение характеристик распределений точек воды и этих реализаций.

Наиболее выразительные различия воды и моделей наблюдаются для характеристик на основе плотности точек. В воде наряду с довольно равномерным по СЧ распределением точек с низкой плотностью наблюдаются также группы со структурированными распределениями и с большими (почти до двух порядков) плотностями. В целом, на зависимости плотности числа точек в полосе от ее СЧ для воды видно расслоение по величине плотности на 3 слоя: верхний высокой плотности со значением более 1.0 в максимуме, на порядок оторванный по величине плотности от среднего слоя с максимальным уровнем около 0.1, и примыкающего к нему нижнего фоновой слоя с плотностью до 0.01 - 0.02. Плотности всех слоев спадают к высокочастотному краю и сближаются. Для модельных наборов подобного структурирования по величине плотности нет, можно увидеть лишь элементы такого структурирования и в сторону ВЧ края падения плотности не наблюдается, скорее видна тенденция к увеличению плотности.

Обнаруженное в воде такое поведение плотности точек с изменением СЧ дает основание для предположения о том, что это является следствием существования в воде каких-то структур.

## Литература:

- [1] А.В. Крайский и А.А. Крайский. О широком диапазоне собственных частот определенном в полосе колебаний воды  $183\text{ см}^{-1}$  из спектральных параметров комбинационного рассеяния воды и слабых растворов. 5-я Всероссийская конференция «ФИЗИКА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ», с.73, ИОФ РАН им. А.М. Прохорова 21-23 ноября 2022 г., Москва, Россия.
- [2] А.В. Крайский. Некоторые свойства собственных частот, полученных в широком диапазоне для полосы колебаний воды  $183\text{ см}^{-1}$  из спектральных параметров комбинационного рассеяния воды. Сб. тезисов докладов 6-ой Всероссийской конференции «ФИЗИКА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ», с.110, ИОФ РАН им. А.М. Прохорова 13-15 ноября 2023 г., Москва, Россия.
- [3] А.В. Крайский и Н.Н. Мельник, Низкочастотные спектры комбинационного рассеяния света в воде и слабых водных растворах. пространственная неоднородность в растворе перекиси водорода, Биофизика, т.57, №6, с.965–972, (2012).
- [4] А.В. Крайский и Н.Н. Мельник, Определение собственных частот и однородных ширин линий межмолекулярных колебаний в воде и в водных растворах перекиси водорода с помощью КРС, Оптика и спектроскопия, т.124, №5, с.628-634 (2018).
- [5] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник и А.А. Крайский, Особенности распределения спектральных параметров межмолекулярных колебаний в воде, полученных с помощью КРС, Оптика и спектроскопия, т.128, №2, с.195-203, (2020).

Устный доклад

# ПОВЕДЕНИЕ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНЫХ ЗОЛЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ

Саркисян В.К., Андрианова Я.В., Вишневецкий Д.В.

ФГБОУ ВО «Тверской Государственный Университет», г. Тверь, Садовый пер., д. 35

e-mail: vazgen.vazgen200120012001@gmail.com

Процессы самосборки с участием низкомолекулярных гелеобразователей, в результате которых образуются супрамолекулярные системы, в последнее время привлекают все больше внимания исследователей. Эти процессы самосборки с участием низкомолекулярных соединений представляют собой уникальное явление с точки зрения фундаментальной и прикладной наук. Ярким примером такой системы является водная система на основе L-цистеина и солей серебра (цистеин серебряный раствор - ЦСР). Не смотря на то, что недавно был выдвинут возможный механизм самосборки данной системы и её необычные свойства [1,2,3], всё ещё остается неизвестным строение частиц, которые формируются в результате процесса самосборки.

В данной работе нами исследовались водные растворы L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> и L-цистеин/AgNO<sub>2</sub>, служащие предшественниками геля. Целью исследования было уточнение структуры агрегатов, образующихся в этих растворах, с помощью различных физико-химических методов исследования: измерение дзета-потенциала, УФ-спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Также МТТ-тестом была исследована цитотоксичность ЦСР в отношении раковых клеток молочной железы MCF-7 и нормальных клеток фибропластов Wi-38, чтобы понять, как агрегаты взаимодействуют с клетками при разных значениях pH.

Для изменения уровня кислотности среды было добавлено различное количество гидроксида калия в исходный ЦСР. Данные, полученные методом турбидиметрического анализа показали, что система обладает изоэлектрической точкой и ведёт как полиэлектролит. Измерения дзета-потенциала подтвердили данный тезис. Дополнительно подтверждено и уточнено строение агрегатов результатами УФ-спектроскопии, показавшими значительные изменения в их структуре при переходе из кислой области pH в щелочную, что также подтверждают данные, полученные методом динамического светорассеяния и атомно-силовой микроскопии. В ходе этих физико-химических исследований была уточнена и подтверждена структура образовавшихся в ЦСР агрегатов.

Результаты МТТ-теста показали, что исследуемая система не обладает токсичностью по отношению к нормальным клеткам фибропластов линии Wi-38 и токсична для раковых клеток молочной железы линии MCF-7, при этом наибольшая активность в подавлении клеток карциномы наблюдается в кислой среде.

## Литература:

- [1] D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S. D. Khizhnyak, P.M. Pakhomov, Soft Matter, 2020, 16, 9669-9673.
- [2] D.V. Vishnevetskii, D.V. Averkin, A.A. Efimov, A.A. Lizunova, A.I. Ivanova, P.M. Pakhomov, E. Ruehl, Soft Matter, 2021, 17, 10416-10420.
- [3] D.V. Vishnevetskii, et al., Soft Matter, 2022, In Print.

*Работа выполнена в рамках гранта РНФ № 21-73-00134 на оборудовании ЦКП ТвГУ и ИБМХ  
им. В.Н. Ореховича.*



## Устный доклад

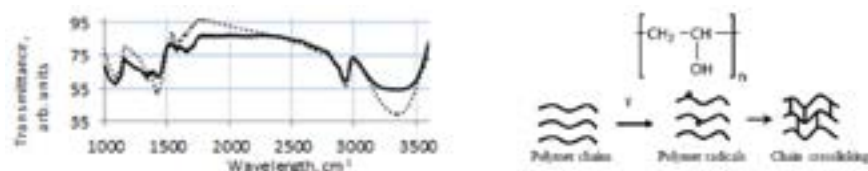
# ВЛИЯНИЕ ШИРОКОПОЛОСНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА ВОДЫ ПО ДАННЫМ РАДИАЦИОННО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА.

**Суворова О.В., Высоцкий В.В., Кабанова В.А.**

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ)  
119991 Москва, Ленинский просп., 31  
e-mail: office@lanacom.ru

Растворимость поливинилового спирта (ПВС) в воде во многом определяет широту его применения. ПВС-подложки и радиационно-сшитые гидрогели вызывают практический интерес при разработке новых лекарственных форм. Одновременно растворы ПВС являются удобной модельной системой для исследования воды и водорастворимых объектов. Современные методы позволяют фиксировать существенное изменение физических свойств водных растворов в результате воздействия факторов различной природы (электрического тока, электромагнитного излучения (ЭМИ), облучения, активного перемешивания). Так, в работе [1] с помощью активной радиотермометрии на характеристичной приемной частоте 61.2 ГГц были получены значения радиоярких контрастов для водных растворов пантовегина в ответ на действие сверхширокополосного ЭМИ малой интенсивности ( $1 \times 10^{-16} - 1 \times 10^{-14}$  Вт), определенного для набора частот 1.0, 42.25, 61.2, 98 и 150 ГГц, осуществлявшегося при помощи преобразователя фоновых излучений (патент РФ № 2154870). В результате воздействия было зарегистрировано изменение плотности и диэлектрических свойств водных растворов.

В настоящей работе исследована чувствительность воды к ЭМИ с параметрами [1] с использованием возможностей радиационной химии. Первоначально ЭМИ-воздействию подвергалась вода 1 кл. чистоты ( $\rho \approx 17.5$  МОм/см). В образцы обработанной и необработанной воды вводился ПВС (1% масс). Через трое суток растворение завершалось с дискретным увеличением температуры до 80°C. После барботирования аргоном, образцы герметизировались и подвергались гамма-облучению ( $\text{Co}^{60}$ , поглощенная доза 50 кГр).



**Рис.1.** ИК спектры пропускания радиационно-сшитых ПВС-гидрогелей на основе контрольной (пунктир) и обработанной (линия) воды, на вставке справа общая формула ПВС и схема гелеобразования под действием  $\gamma$ -облучения

Характеристики образцов обработанной и контрольной воды, а также модельных водных растворов ПВС до гамма-облучения фиксировались методами спектрофотометрии и динамического светорассеяния. С помощью ИК-спектроскопии исследовались гели, полученные в результате радиационно-индуцированной сшивки ПВС. В ИК спектрах образцов (Рис.1) проявились различия в полосах поглощения 3100–3600  $\text{cm}^{-1}$ , обусловленных валентными колебаниями О–Н-связей взаимодействующих гидроксильных групп, а также в полосах деформационных колебаний О–Н в составе С–О–Н (1125–1030  $\text{cm}^{-1}$ ) и структурно-чувствительных колебаний групп  $-\text{CH}_2-$  [2,3]. Зарегистрированные спектральные характеристики могут свидетельствовать о проявлении в конечном полимерном продукте последствий изменений свойств растворителя (воды) на стадии подготовки в результате воздействия широкополосного ЭМИ.

## Литература:

- [1] О. В. Суворова, А. А. Ревина, В. Г. Калашников и др. // Тезисы 5-й всероссийской конференции Физика водных растворов. — ООО Месол Москва, [https://physwatsol.ru/documents/abstracts\\_2022.pdf](https://physwatsol.ru/documents/abstracts_2022.pdf): 2022. — С. 39–39.
- [2] И.Ю. Просанов, А. А. Матвиенко // Физика твердого тела. — 2010. — том 52, вып. 10. — С. 2056–2059.
- [3] Chen, C.; Liu, X.; Wang, J.; Guo, H.; Chen, Y.; Wang, N. Research on the Thermal Aging Mechanism of Polyvinyl Alcohol Hydrogel. *Polymers* 2024, 16, 2486. <https://doi.org/10.3390/polym16172486>



Устный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НА МЕЖФАЗНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ ЭТТРИНГИТА И ТАУМАСИТА

Тарарушкин Е.

*Международная лаборатория суперкомпьютерного атомистического моделирования и  
многомасштабного анализа НИУ ВШЭ, Россия, г. Москва, ул. Таллинская, д. 34  
evgeny.tararushkin@yandex.ru*

Этtringит ( $\text{Ca}_6[\text{Al}(\text{OH})_6]_2[\text{SO}_4]_3 \cdot 26\text{H}_2\text{O}$ ) и таумасит ( $\text{Ca}_3[\text{Si}(\text{OH})_6](\text{CO}_3)(\text{SO}_4) \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ ) – природные минералы. Оба минерала имеют схожие столбчатые кристаллические структуры, которые ориентированы вдоль параметра с их элементарных ячеек. Столбики минералов представлены полиэдрами алюминия/кремния и кальция, а также молекулами  $\text{H}_2\text{O}$ :  $[\text{Ca}_3[\text{Al}(\text{OH})_6] \cdot 12\text{H}_2\text{O}]^{3+}$  – этtringит и  $[\text{Ca}_3\text{Si}(\text{OH})_6] \cdot 12\text{H}_2\text{O}]^{4+}$  – таумасит. Пространство (каналы) между столбиками этtringита заполнены анионами  $\text{SO}_4^{2-}$  и молекулами  $\text{H}_2\text{O}$ , а в случае с таумаситом каналы заполнены только анионами  $\text{SO}_4^{2-}$  и  $\text{CO}_3^{2-}$ .

Эти минералы представляют интерес с точки зрения химии строительных цементов и бетонов по той причине, что оба отвечают за сульфатную коррозию бетонов (ESA – ettringite sulfate attack и TSA – thaumasite sulfate attack) [1]. При этом остается не решенным вопрос, каким образом происходит формирование таумасита в порах строительных бетонов. Предложено несколько путей формирования таумасита: так называемый прямой путь – зарождение и последующий рост кристаллов таумасита без присутствия этtringита, либо таумасит формируется при наличии кристаллов этtringита и появляется твердый раствор этих минералов (вудфордит) [1]. В обоих случаях водные растворы необходимы в качестве питающей среды для роста кристаллов. В связи с этим возникает необходимость в знаниях различных свойств водных растворах в приповерхностных зонах этtringита и таумасита.

Для исследования свойств водных растворов в приповерхностных зонах этtringита и таумасита использовался метод классической молекулярной динамики. В качестве потенциала, описывающего взаимодействия между частицами, была применена модифицированная версия силового поля ClayFF-МОН [2, 3]. Ранее на примере моделирования этtringита и портландита [3, 4] было показано, что учёт в явном виде угловых взаимодействий Me-O-H между катионами металлов и гидроксильными группами позволяет значительно улучшить воспроизведение механических и колебательных свойств этих минералов.

В результате моделирования вычислены структурные и динамические свойства водных растворов в приповерхностных зонах этtringита и таумасита. Определены центры адсорбции на поверхностях обоих минералов. Показано, что как для этtringита, так и для таумасита наблюдается обмен молекулами  $\text{H}_2\text{O}$  между твердой фазой и водным раствором. Вычисленные межфазные (твердое тело – жидкость) энергии показали, что этtringит стабильнее при растворении по сравнению с таумаситом.

*Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.*

## Литература:

- [1] N. Crammond, The occurrence of thaumasite in modern construction – a review, *Cement and Concrete Composites*, 24, 393-402, (2002).
- [2] R. Cygan, J. Greathouse, and A. Kalinichev, Advances in ClayFF molecular simulation of layered and nanoporous materials and their aqueous interfaces, *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(32), p. 17573-17589, (2021).
- [3] E. Tararushkin, V. Pisarev and A. Kalinichev, Atomistic simulations of ettringite and its aqueous interfaces: Structure and properties revisited with the modified ClayFF force field, *Cement and Concrete Research*, 156, 106759, (2022).
- [4] E. Tararushkin, V. Pisarev and A. Kalinichev, Interaction of nitrite ions with hydrated portlandite surfaces: Atomistic computer simulation study, *Materials*, 16(14), 5026, (2023).

Устный доклад

# ДЕГИДРАТАЦИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ФТОРИДОВ ПРИ СИНТЕЗЕ ГНК МЕТОДОМ

**Юсим В.А.,<sup>1-3</sup> Саркисов С.Э.,<sup>2</sup> Кононенко Н.Е.,<sup>1</sup> Юсим Ф.А.,<sup>2</sup> Калимуллин Р.К.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> ФГБУН ФИЦ «Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН», Москва, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)», Долгопрудный, Россия  
e-mail: Yusim\_VA@nrcki.ru

Получение оптически совершенных монокристаллов фторидов является необходимым условием их практического использования. Так, преимущества монокристаллов фторидов проявляются только в монокристаллах исключительного качества, не содержащих различных фоновых примесей (в том числе содержащих  $H_2O$  и  $-OH$  группы).

Ввиду особенности технологии синтеза неорганических соединений фторидов методом ГНК из мелкодисперсного порошка, подготовка шихты для синтеза, используя традиционные способы [1], является весьма затруднительным и дорогостоящим процессом вследствие возникновения «кипящего слоя» при вакуумировании порошкообразной шихты, высокой усадки самой шихты при плавлении и т.д. [2]. С этой целью была разработана принципиально новая технология в виде сухого брикетирования порошков фторидов.

Разработанная технология получения твердого спека в АСБ включает две фазы, каждая из которой разделена на несколько этапов. В первой фазе процесса предварительно обезгаженную шихту, помещенную в печь с графитовым тепловым узлом, нагревали до температуры 200 – 250°C с последующей выдержкой в течение 3 – 4 часов в вакууме. Далее тигель с компонентами нагревали до температуры 700 – 750°C и выдерживали в течение 3 – 4 часов и последующей откачкой снова до форвакуума. Затем тигель нагревали до температуры 1000 – 1400°C в зависимости от спекаемого материала в избыточной атмосфере (202,7кПа) инертного газа аргона (Ar) или фтороводорода (HF), или тетрафторметана ( $CF_4$ ) и выдерживали в течение 6 – 8 часов. Во второй фазе процесса температуру на нагревателе делали чуть выше, чем в предыдущем шаге, тем самым позволяя расплавить часть шихты находящийся под нагревателем (в изначальной позиции носик тигля) и затем включали протяжку со скоростью 3-5мм/час, до достижения задней части тигля включали реверс и процесс повторялся до достижения носика. Тем самым реализовался процесс зонной чистки расплава. По мере реализации нескольких циклов чистки печь отключалась с последующим инерционным охлаждением полученного поликристалла до комнатной температуры.

Данная технология позволяет получить как готовый твердый безводный спек (без использования второго этапа), так и поликристалл высокого качества. Количество содержания воды в образцах полученных спеков или поликристаллах определяли с помощью дифференциального термoанализатора SDTQ600, а также с помощью спектрофотометра СФ-56.

Для достижения максимального эффекта (минимального содержания воды) предложено использовать чистку, включающую две фазы. В результате применения разработанной технологии получены материалы неорганических соединений фторидов с содержанием воды менее 0,05-0,06%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт»  
(приказ № 130 от 17.01.2024).*

## Литература:

- [1] Svilen M. Gechev, Jordan T. Mouhovski, Petar Tzvetkov “Fluoride crystals fabrication and processing – applicability and opto-mechanical characteristics” Materials, Methods & Technologies ISSN 1314-7269, Volume 9, 2015 326 – 340  
[2] Юсим В.А., Саркисов С.Э., “Способ приготовления шихты для выращивания монокристаллов фторидов” Патент РФ №2747503 05.05.2021.

Устный доклад

# ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РЕАКЦИОННЫХ СПЛАВОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С ВЛАГОСОДЕРЖАЩИМИ ГАЗОВЫМИ СРЕДАМИ

**Юсим В.А.,<sup>1-3</sup> Саркисов С.Э.,<sup>2</sup> Голуб С.М.,<sup>2</sup> Кононенко Н.Е.,<sup>1</sup> Кондратьев К.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> ФГБУН ФИЦ «Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН»,  
Москва, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)», Долгопрудный, Россия  
e-mail: Yusim\_VA@nrcki.ru

В качестве замены традиционным геттерным и криогенным технологиям [1], задача очистки многокомпонентной газовой-водонасыщенной среды от ее отдельных составляющих, решалась сочетанием химических и физико-химических (адсорбционно-диффузионных) методов сепарации с физическими методами их определения.

Таким образом, в работе изучалось взаимодействие частиц щелочноземельного сплава с газовыми компонентами воздуха ( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$  и т.д.). Поглотителем являлся полученный авторами Ca-Mg реакционный сплав (Рис.1), который адсорбирует влагу и прочие газообразные воздушные компоненты путем роста химических соединений на поверхности частицы металла.

Полученные результаты показали, что процесс проведения химических реакций в фильтрующем режиме (или режиме кипящего слоя) с использованием щелочноземельных металлов в качестве сорбционных материалов, является эффективным методом высокой очистки любых газов, в том числе инертных от нежелательных газообразных примесей. Этот метод является альтернативным по отношению к традиционным методам очистки газов, таким как геттерная очистка (где необходимо наличие химического сродства между сорбентом и сорбатом), а также криогенному способу.



**Рис. 1.** Полученные слитки Ca-Mg сплава

*Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 130 от 17.01.2024).*

## Литература:

[1] Espe, Werner; Max Knoll; Marshall P. Wilder (October 1950). "Getter Materials for Electron Tubes" (PDF). Electronics. McGraw-Hill: 80–86. ISSN 0883-4989. Retrieved 21 October 2013. on Pete Miller's Tubebooks

Постерный доклад

# ВЫСОКОПОРИСТЫЕ ОКСИГИДРОКСИДЫ АЛЮМИНИЯ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ И МАШИННОМ ОБУЧЕНИИ

Зиннуров Б.Д., Смирнов Г.С., Тарарушкин Е.В.

НИУ ВШЭ Россия, 101000, Москва, Мясницкая ул., 20  
e-mail: bzinnurov@hse.ru

Более 100 лет назад впервые были получены высокопористые оксигидроксидные структуры алюминия [1]. Материал характеризуется высокой механической прочностью при крайне низкой плотности, чем и по сей день привлекает исследователей [2, 3]. Большого прогресса достиг процесс синтеза соединения – нанопризмы выращивают в лабораторных условиях во влажной атмосфере. На данный момент стоит задача в построении строгой физико-химической модели роста структур.

В основу построения легла теория функционала электронной плотности. Использование метода, однако, ограничено вычислительными сложностями как со стороны высоких аппаратных требований, так и необходимостью моделировать длинные траектории атомов рассматриваемых структур. Литературные данные же демонстрируют применение метода в основном для статических расчётов [4].

Для решения проблемы было принято решение создать межатомные потенциалы Al-O-H на основе машинного обучения по данным квантовых расчётов. Использование таких потенциалов позволяет значительно расширить горизонты применения классических методов молекулярной динамики. В докладе будут представлены первые данные по использованию моделей для описания процессов роста наноструктур оксигидроксидов алюминия.

*Работа выполнена при финансовой поддержке по программе фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.*

## Литература:

- [1] H. Wislicenus, Zeitschrift für Chemie und Industrie der Kolloide (Steinkopff & Springer), 2, XI-XX (1908).
- [2] J-L. Vignes, L. Mazerolle, D. Michel, A Novel Method for Preparing Porous Alumina Objects, Key Engineering Materials, 132-136, 432-435 (1997).
- [3] П. Мартынов, Р. Асхадуллин, П. Юдинцев, А. Ходан, Новый метод синтеза наноматериалов на основе контролируемого селективного окисления жидкометаллических фаз, Новые промышленные технологии, 4, 48-52 (2008).
- [4] S. Iijima, T. Yumura, Z. Liu, One-dimensional nanowires of pseudoboehmite (aluminum oxyhydroxide  $\gamma$ -AlOOH), Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 113(42), 11759–11764 (2016).

## Постерный доклад

# ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ ВАКУУМНЫМ УЛЬТРАФИОЛЕТОМ

**Некрасова Н.В., Хлебникова О.А., Ломовской В.А., Высоцкий В.В., Крот А.А.**

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН  
119071, Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4.  
Natalianek@yandex.ru*

Используя различные способы структурирования растворов ПВС можно получить материалы с заданными свойствами. Удобными способами структурирования являются физические методы: УФ-облучение, гамма-облучение, облучение электронами и нейтронами, благодаря легкости управления, отсутствию необходимости добавления сшивающих агентов, а также одновременной стерилизации материала.

Достаточное количество работ посвящено влиянию ближнего ультрафиолета на структурирование растворов поливинилового спирта, так как конечные свойства материалов зависят от структуры макромолекул и в растворе, и на ранних стадиях гелеобразования) [1-5].

В меньшей степени изучено влияние на структуру поливинилового спирта вакуумного ультрафиолета (ВУФ). В основном это работы по влиянию такого излучения на шероховатость поверхности твердых пленок полимеров [6,7]. Возможно, это связано с быстрым поглощением ВУФ в воздушной атмосфере и в воде.

При облучении 5% водного раствора поливинилового спирта ВУФ с длиной волны 172 нм обнаружено, что происходит изменение дисперсности раствора с образованием крупных частиц, хотя озон, возникающий при облучении в воде и атмосфере, влияет на ПВС в растворе, приводя к его окислению и деструкции. [8,9]

Изменение дисперсности раствора отслеживалось при помощи вискозиметрии и динамического светорассеяния (ДРС). Изменение структуры образующихся макрочастиц исследовалось при помощи ИК-спектроскопии.

Обнаружено, что при облучении 5% водного раствора поливинилового спирта вакуумным ультрафиолетовым излучением (ВУФ) длиной 172 нм, что при временах облучения выше 90 минут происходит изменение структуры и дисперсности раствора с последующим образованием сшитых фрагментов, невзирая на то, что глубина проникновения ВУФ является незначительной.

## Литература:

- [1] Пахомов П.М., Хижняк С.Д., Nierling W., Nordmeier E., Lechner M.D. Процессы структурообразования в водных растворах поливинилового спирта. Высокомолекулярные соединения, Серия А, 1999, Т.41, С. 1035-1039.
- [2] Асулян Л.Д., Гавриков А.С., Арляпов В.А., Алферов В.А. Модификация поливинилового спирта УФ-облучением для получения рецепторных элементов биосенсоров. Известия ТулГУ. Естественные науки. 2017. Вып.1С.12-23.
- [3] S. P. Vijayalakshmi, Giridhar Madras/Journal of applied polymer sciens.V102.Issue 2. pp958-966 Photodegradation of poly(vinyl alcohol) under UV and pulsed-laser irradiation in aqueous solution. <https://doi.org/10.1002/app.23736>
- [4] Kaczmarek H., Podgorski A. The effect of UV-irradiation on poly(vinyl alcohol)composites with montmorillonite // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2007 V. 191 № 2–3. P. 209–215.
- [5] Chia-Chang Lin, Li-Ting Lee. Degradation of polyvinyl alcohol in aqueous solutions using UV-oxidant process. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 21 (2015) p.568-574.
- [6] Митрофанов А.В., Карбань О.В., Сугоняко А., Любомска М. Исследование поверхности плен из полиэтиленфталата, модифицированных вакуумно-ультрафиолетовым облучением на воздухе. Поверхность.Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2009, №7, С 30-38
- [7] Гасанов С.К., Ястребинский Р.Н., Павленко В.И. Использование вакуумного ультрафиолета для уменьшения шероховатости поверхности полимерных композитов. Успехи современного естествознания. – 2015. – № 10 – С. 11-14.
- [8] Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Мустафин А.Г. Окисление и деструкция поливинилового спирта при совместном воздействии озон-кислородной смеси и пероксида водорода.Журнал физической химии , 2018, Т.92, С.374-378
- [9] Валиева А.Ф. Кинетика и механизм окисления поливинилового спирта в водной среде . Автореферат диссертации кандидата химических наук. Уфа, 2007. С. 23



Постерный доклад

## ДВОЙНЫЕ СЛОИСТЫЕ ГИДРОКСИДЫ КАК АДсорбЕНТЫ АНИОНОВ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Смирнов Г.С., Глушак А.А., Тарарушкин Е.В.

НИУ ВШЭ Россия, 101000, Москва, Мясницкая ул., 20

e-mail: gsmirnov@hse.ru

Природные глинистые минералы широко используются в качестве адсорбентов для очистки воды от катионных радионуклидов. В то же время остается актуальной задача поиска эффективных адсорбентов радионуклидов в анионной форме. Двойные слоистые гидроксиды и, в частности, цементные AFm-фазы являются одним из основных кандидатов на эту роль. В работе с использованием метода классической молекулярной динамики с силовым полем ClayFF [1] изучено взаимодействие хлор-, иод- и селен-содержащих AFm-фаз с водными растворами [2–4]. Вычислена диффузионная подвижность и свободная энергия адсорбции анионов радионуклидов в поровом и межслоевом пространстве. Рассматривалась базальная поверхность (001) AFm-фаз на границе с растворами CsCl и CsI. Показано, что анионы хлора и иода при адсорбции образуют внутрисферные комплексы с образованием водородных связей с поверхностными гидроксильными группами. Вычисленные свободные энергии адсорбции анионов хлора и иода составляют  $-2,75$  и  $-1,58$  ккал/моль соответственно. Также анионы хлора имеют меньший коэффициент поверхностной диффузии по сравнению с анионами иода, что свидетельствует о их более высокой аффинности связывания.

Для изучения диффузии оксианионов селена с использованием метода молекулярной динамики разработан классический потенциал взаимодействия, позволяющий изучать его свойства как в водных растворах, так и в структуре отдельных минералов. Потенциал основан на квантово-химических расчетах в модели с неявным растворителем и совместим с силовым полем ClayFF. Колебания углов и связей описываются гармоническим потенциалом, межчастичное взаимодействие описывается потенциалами Леннарда-Джонса и Кулона. Для верификации модели рассчитаны свободные энергии сольватации селенат- и селенит-анионов, а также их коэффициенты диффузии в водном растворе. Указанные параметры хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

*Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.*

### Литература:

- [1] R. Cygan, J. Greathouse, and A. Kalinichev, Advances in ClayFF molecular simulation of layered and nanoporous materials and their aqueous interfaces, The Journal of Physical Chemistry C, 125(32), p. 17573–17589, (2021).
- [2] A. Glushak., E. Tararushkin, G. Smirnov, A.G. Kalinichev, Molecular dynamics simulation of hydrocalumite as adsorbent for anionic radionuclides, Applied Geochemistry, 170, 106089, (2024).
- [3] A. Glushak, G. Smirnov, Partial proton ordering during phase transition in Friedel's salt, Applied Clay Science, 243, 107072, (2023).
- [4] А. А. Глушак, Е. В. Тарарушкин, А. Г. Калинин, Атомистическое компьютерное моделирование гидрокальюмита как адсорбента радиоактивных анионов из водных растворов, Журнал физической химии, 96(4), 535—537 (2022).

# ВОДНЫЕ РАСТВОРЫ В ФАРМАЦИИ



Приглашенный доклад

# ЖИДКОСТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР В ИССЛЕДОВАНИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Васильев В.Г., Шеремета А., Ивлев В., Горяинов С.

ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы»  
г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6  
e-mail: vasilyev\_vg@pfur.ru

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является распространенным методом исследования строения органических молекул, а также состава сложных смесей органического происхождения. Спектроскопия ЯМР бывает твердотельной и жидкостной. В твердотельной спектроскопии ЯМР образцы анализируются в нативном виде, а в случае жидкостной – в жидком, т.е. образец твердого агрегатного состояния необходимо растворить в соответствующем растворителе. Чаще всего используют жидкостную спектроскопию ЯМР, поскольку данным подходом можно получать спектры более высокого разрешения вследствие однородности растворов. В жидкостной спектроскопии ЯМР для растворения исследуемого образца используются дейтерированные растворители, что необходимо для настройки магнитного поля. Наиболее часто используемыми полярными и неполярными дейтерированными растворителями являются: тяжелая вода- $d_2$ , диметилсульфоксид- $d_6$ , хлороформ- $d$ , ацетон- $d_6$ , хлористый метилен- $d_2$ , метанол- $d_4$  и многие другие. Для исследования полярных соединений чаще всего используют тяжелую воду- $d_2$ . Данный растворитель обладает рядом преимуществ и недостатков в использовании. Одним из преимуществ является то, что вода является универсальным растворителем, и в ней растворяется большинство полярных соединений. Одним из недостатков – то, что, являясь протонным растворителем, она способствует обмену кислых протонов (таких как гидроксильные, карбоксильные, аминные и другие группы) в органических соединениях, что приводит к исчезновению сигналов протонов этих групп в протонных спектрах ЯМР. Несмотря на недостатки, тяжелая вода- $d_2$  широко используется для исследований органических веществ вследствие своей дешевизны относительно других полярных дейтерированных растворителей.



Рисунок 1. Спектрометр ЯМР Bruker Avance NEO 700.

## Приглашенный доклад

# ГИДРОФИЛЬНОСТЬ И ЛИПОФИЛЬНОСТЬ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ В ЛЕЧЕНИИ ПАЦИЕНТОВ С АРТЕРИАЛЬНОЙ ГИПЕРТЕНЗИЕЙ И ОЖИРЕНИЕМ

**Васильева И.Н., Осадчук М.А.**

*ФГАОУ ВО Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет), 119991, Москва, ул. Трубецкая, д.8, стр. 2;  
e-mail: inniva77@mail.ru*

Несмотря на достижения последних лет в отечественной и мировой медицине, заболеваемость артериальной гипертензией (АГ) остается на высоком уровне [1]. Прогностическую значимость имеет достижение целевого артериального давления (АД) в случаях, где особого внимания заслуживают пациенты с АГ, ожирением и метаболическими нарушениями. Жировая ткань является метаболически активной, способной участвовать в регуляции АД [2]. Именно стойкие метаболические нарушения у лиц с ожирением (гиперурикемия, гипергликемия, гиперлипидемия) определяют низкую приверженность к проводимой лекарственной терапии; успех ее эффективности связан с особенностями фармакокинетики и фармакодинамики лекарственных препаратов (ЛП). Фармакокинетическая классификация антигипертензивных препаратов (АП) заключается в способности ЛС растворяться в липидсодержащих или водных средах с последующим их разделением. У гидрофильных лекарственных средств почечная экскреция выше, что способствует быстрому и легкому выведению их из организма, не подвергаясь биотрансформации. В противоположность этому, липофильные ЛП (с учетом особенностей фильтрации липофильных ионизированных веществ почками) быстро реабсорбируются обратно в почечные каналы, где подвергаются дальнейшей трансформации и метаболизму, превращаясь в более полярные водорастворимыми метаболиты. Эти особенности растворимости, вероятно, и является ключевым фактором, определяющим фармакологические различия ЛП в терапии пациентов с ожирением. Поскольку у пациентов с АГ и ожирением имеет место увеличение объема жировой ткани, то при выборе конкретного АП необходимо учитывать его липофильность, поскольку высокий уровень липофильности определяет более значительную тканевую аффинность препарата к адипоцитам. Липофильные ЛП путем пассивной диффузии легко проникают в клетки, что способствует их широкому распределению в различных тканях, особенно в жировой. Жировая ткань, обладая собственной ренин-ангиотензин-альдостероновой системой (РААС), может активно продуцировать ангиотензин I из ангиотензиногена, влияющий на повышение уровня АД. Кроме этого, тканевая РААС жировой ткани поддерживает на высоком уровне факторы системного воспаления в адипоцитах, способствуя поражению органов-мишеней и развитию сердечно-сосудистых осложнений у пациентов с ожирением. Поэтому в лечении пациентов с АГ и метаболическими нарушениями важная роль отводится блокаторам РААС – ингибиторам ангиотензин превращающего фермента (ИАПФ) и антагонистам рецепторов АТ II (АРА II /сартанам), оказывающим влияние на ключевые звенья патогенеза АГ, ожирения, сахарного диабета и др. [3]. Липофильные представители этих двух групп ЛП способны снижать высокую активность тканевой и плазменной РААС, гиперсимпатическое влияние нервной системы, уменьшать инсулинорезистентность и массу жировой ткани. Высокой липофильностью обладают ИАПФ (периндоприл, рамиприл и др); АРА II (телмисартан); умеренной липофильностью – каптоприл, эналаприл (ИАПФ); ирбесартан, эпросартан (АРА II); лизиноприл (ИАПФ), валсартан, лозартан (АРА II) относятся к гидрофильным соединениям. Высокая липофильность предопределяет предпочтительный выбор ЛП при сочетании АГ и ожирения, учитывая, однако их НПЭ, связанные с их профилем растворимости. Гидрофильность и липофильность антигипертензивных ЛП является определяющим аспектом при выборе антигипертензивной терапии у пациентов с ожирением и метаболическими нарушениями.

## Литература:

- [1] Баланова Ю.А., Шальнова С.А., Имаева А.Э. и др. Распространенность артериальной гипертензии, охват лечения и его эффективность в Российской Федерации (данные наблюдательного исследования ЭССЕ-РФ-2). Рациональная Фармакотерапия в Кардиологии. 2019;15(4):450-466.
- [2] Ковалева Ю.В. Гормоны жировой ткани и их роль в формировании гормонального статуса и патогенезе метаболических нарушений у женщин. Артериальная гипертензия. 2015;21(4):356-370.
- [3] Васильева И.Н., Осадчук М.А., Солоденкова К.С. Артериальная гипертензия в амбулаторно-поликлинической практике. УДК:612.143:616.12-008.331.1(075. 8), 120 стр. 2021. Глава 5

Приглашенный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОФИЛЯ МЕТАБОЛИТОВ ПОЛИНЕНАСЫЩЕННЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ КАК НОВЫЙ ПОДХОД К ИЗУЧЕНИЮ ДЕЙСТВИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ И ДИАГНОСТИКИ ЗАБОЛЕВАНИЙ, АССОЦИИРОВАННЫХ С ВОСПАЛЕНИЕМ

**Горяинов С.В., Чистяков Д.**

*Российский университет дружбы народов им. П. Лумумбы,  
г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6  
e-mail: goryainov\_sv@pfur.ru*

Одним из ключевых факторов патогенеза широкого спектра заболеваний, включая онкологические и неврологические, является воспаление. Наряду с цитокинами, широко известными белковыми маркерами воспаления, особый интерес представляют низкомолекулярные соединения оксипинов – окисленные метаболиты полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК). Изменения в концентрации и соотношении отдельных оксипинов наблюдаются при различных заболеваниях и активно применяются для изучения их патогенеза. Мишенью широко известных лекарственных средств (ЛС) противовоспалительного действия, таких как аспирин, ибупрофен, индометацин и др. является именно регуляция биосинтеза оксипинов [1], при этом и новые препараты, разрабатываемые как регуляторы процессов воспаления при различных заболеваниях, также влияют на состав оксипинов. Постоянно открываются новые низкомолекулярные медиаторы липидного обмена, предназначение и биологическую активность которых еще предстоит изучить в будущем. Количественный анализ как отдельных оксипинов, так и их совокупности (профиля оксипинов), долгое время был затруднен из-за низких концентраций этих соединений в биологических объектах. Однако в последние годы развитие масс-спектрометрических подходов к анализу оксипинов открыло возможности для изучения их биологической активности как в контексте установления механизмов действия ЛС, так и их рассмотрения в качестве потенциальных биомаркеров широкого спектра заболеваний [2]. Использование твердофазной экстракции наряду с изотопно-меченными соединениями в качестве внутренних стандартов обеспечивает высокую специфичность и точность количественного определения оксипинов в сложных матрицах. Представлялось интересным разработать подходы к количественному определению оксипинов в различных водных биологических матрицах и оценить возможность практического применения полученных результатов в экспериментах *in vivo* и *in vitro* для исследования различных патологий и для оценки эффективности действия ЛС различных классов в модельных экспериментах на первичных клеточных культурах и животных.

**Литература:**

- [1] M. Gabbs, S. Leng, J.G. Devassy, M. Monirujjaman, H.M. Aukema, *Advances in Our Understanding of Oxylipins Derived from Dietary PUFAs*, *Advances in Nutrition*, V.6., №5, P.513–540, (2015).  
[2] D.V. Chistyakov, A.A. Astakhova, M.G. Sergeeva, *Exp Mol Pathol*, V.105. №2. P.190–201, (2018).



Приглашенный доклад

# ИЗОТОПНЫЙ РЕЗОНАНС В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Зубарев Р.А.

*Кафедра медицинской биохимии и биофизики, отделение Биомедицины,  
Каролинский институт 17177 Стокгольм, Швеция  
e-mail: rzubarev1963@gmail.com*

Изотопный резонанс - феномен нелинейного изменения кинетики химических, биохимических и биологических реакций при определенных взаимосвязанных изотопных составах химических элементов.

Изотопный резонанс для аминокислот, пептидов и белков (элементы С, Н, N и О) был предсказан теоретически [1], проверен на литературных данных [2], а затем валидирован экспериментально на росте бактерий [3]. Для воды теория предсказывает резонанс при удвоении до 250-350 ppm содержания дейтерия и нормальном изотопном составе кислорода, что и было подтверждено в опытах [4]. Экспериментальные данные также показывают возможные резонансы на уровне плотности воды.

Дейтерий в воде в диапазоне концентраций 80-350 ppm оказался регулятором роста человеческих клеток [5], что может быть использовано в биологии и медицине.

**Литература:**

- [1] Zubarev, R. A.; Artemenko, K. A.; Zubarev, A. R.; Mayrhofer, C.; Yang, H.; Fung, E. Y. M. Early life relict feature in peptide mass distribution, Cent. Eur. J. Biol., 5, 190-196, (2010).
- [2] Zubarev, R. A. Role of Stable Isotopes in Life - Testing Isotopic Resonance Hypothesis, Genomics, Proteomics & Bioinformatics, 9, 15-20, (2011).
- [3] Xie, X.; Zubarev, R. A. Isotopic Resonance Hypothesis: Experimental Verification by Escherichia coli Growth Measurements, Scientific Reports, 5, article number: 9215, (2015).
- [4] Rodin, S.; Rebellato, P.; Lundin, A.; Zubarev, R.A. Isotopic resonance at 370 ppm deuterium negatively affects kinetics of luciferin oxidation by luciferase, Sci. Rep., art. 16249, (2018).
- [5] Zhang, X.; Wang, J.; Zubarev, R. A. Slight deuterium enrichment in water acts as an antioxidant: is deuterium a cell growth regulator? Mol & Cell Proteomics, 19, 1790-1804. DOI:10.1074/mcp.RA120.002231, (2020).

Приглашенный доклад

# ДЕЙТЕРИЙ-ЗАВИСИМЫЕ ХИРАЛЬНЫЕ ПЛОТНОСТНЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Плетенева Т.В., Успенская Е.В., Левицкая О.В., Казымова И.В., [Сыроешкин А.В.](#)

Медицинский институт РУДН, Москва, Миклухо-Маклая, 6

e-mail: [syroeshkin-av@rudn.ru](mailto:syroeshkin-av@rudn.ru)

В фармацевтической промышленности вода для инъекций должна иметь pH в диапазоне 5-7, электропроводность при 20 °C должна быть не выше 1,1 мкСм/см, также ограничивается максимальная концентрация ряда растворенных веществ и предписывается микробиологическая чистота, чтобы не вызвать ни токсических реакций, ни пирогенного эффекта ([pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/2/2-2/voda-dlya-inektsiy](http://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/2/2-2/voda-dlya-inektsiy)). Предполагается, что при двойной дистилляции или иным способом получения высокоомной воды будут отсутствовать частицы взвешенного вещества, субмикронные частицы и наночастицы. Даже если пренебречь примесями в воде для инъекций, концентрация которых ниже предела обнаружения современных методов элементного анализа и анализа органических веществ, то и тогда состав воды для инъекций не описывается формулой  $H_2O$ . В высокоомной воде присутствуют следующие виды молекул и ионов:  $HOD$  (16 мМ),  $OH\cdot(H_2O)_n$ ,  $H^+(H_2O)_n$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $HCO_3^-$ ,  $CO_3^{2-}$ , Ag, солюбилизированные e-, кинетически захваченные n и наночастицы, органические и силикатные [1]. Такой сложный минерал демонстрирует эффект Тиндаля [2]. Оказалось, что в светорассеяние высокоомной воды главный вклад оказывает содержание дейтерия. Обоеднение по дейтерию воды со значения  $H/D=140$  ppm (геохимическая норма для восточно-европейской равнины) до 5 ppm приводит к значительному снижению концентрации плотностных неоднородностей, равно как и при замене протия на дейтерий [3]. Эффект Тиндаля может быть количественно описан при использовании лазерных методов малоуглового светорассеяния или динамического светорассеяния. В светорассеяние дают вклад субмикронные частицы, описанные по модели бабстонов, и гигантские дейтерий-зависимые гетерофазные кластеры (или эмулоны, или супранадмолекулярные комплексы [1]) с размерами от нескольких микрон до 100 мкм, описанные по модели диссипации Колмогорова-Жуховицкого. Обоеднение высокоомной воды по содержанию дейтерия приводит к снижению почти на порядок времени спин-спиновой релаксации протонов, что указывает на распределение  $HOD$  по поверхности гигантских кластеров [4]. Между внутренней фазой ГГК и континуальной водой формируется градиент  $H^+$  так, что  $\Delta\mu_{H^+} > 100$  мВ. Нами обнаружено, что при изменении соотношения  $H/D$  драматическим образом меняется оптическая активность D- и L-аминокислот так, что в зависимости от pH можно управлять хиральностью раствора, переключая его с минуса на плюс [5], подобно закону Твердислова в клеточных биосистемах. Этот эффект хорошо описан в органической химии, когда хиральность энантиомеров управляется с помощью растворителя. Для объяснения таких явлений придуман оригинальный механизм «сержант-солдат». Согласно этой концепции, следовало бы ожидать, что внутри гигантских микронных кластеров или на поверхности виноградных гроздей бабстонов молекулы воды укладываются в упорядоченные хиральные структуры. Действительно, при длительных измерениях оптической активности в высокоомной воде медленно формируются динамические хиральные структуры. Анализ спектров частоты встречаемости таких структур за 70-80 часов 3-минутных измерений показывает, что в воде с  $D/H=140$  ppm около 70% гигантских кластеров оптически неактивны, 30% - оптически активны, а в воде с  $D/H=3$  ppm более кластеров 90% оптически активны [5]. Существование хиральных кластеров в воде хорошо объясняет индукцию субмиллиметровых плотностных неоднородностей наночастицами [5], которые выступают в качестве начальной точки роста протяженной хиральной среды.

## Литература:

- [1] А.Н. Смирнов, А.В. Сыроешкин, Супранадмолекулярные комплексы воды, Российский химический журнал (Журнал Российского химического общества им. Д.И. Менделеева). Т. XLVIII, №2, С. 125-135, (2003).
- [2] В.В. Гончарук, А.Н. Смирнов и др., Структура воды: гигантские гетерофазные кластеры воды, Химия и технология воды, №2, С. 11-37, (2005).
- [3] V.V. Goncharuk, V.B. Lapshin et al., Physicochemical Properties and Biological Activity of the Water Depleted of Heavy Isotopes, Journal of Water Chemistry and Technology, V. 33, No.1, P. 8-13, (2011).
- [4] V.V. Goncharuk, A.V. Syroeshkin et al., On the possibility of chiral structure-density submillimeter inhomogeneities existing in water, Journal of Water Chemistry and Technology, V. 39(6), P. 319-324, (2017).
- [5] A. Syroeshkin, T. Pleteneva et al., D/H control of chemical kinetics in water solutions under low deuterium concentrations, Chemical Engineering Journal, V. 377, P. 119827, (2019).

## Приглашенный доклад

# ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И БИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СУБСТАНЦИЙ: ОТ МИКРОНИЗАЦИИ ДО МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ

Успенская Е.В., Кузьмина Е.С.

ФГАОУ ВО "Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы"  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 8  
e-mail: [Uspenskaya75@mail.ru](mailto:Uspenskaya75@mail.ru)

Механическое активирование приводит к изменению структурных и физико-химических свойств твердого тела: электрических, оптических, фотоэмиссионных, магнитных. Для подобных систем с развитой дефектной структурой и накопленной избыточной свободной энергией нарушается состояние термодинамического равновесия, что обеспечивает ей повышенную реакционную способность. Данный факт особенно привлекателен для достижения задач медицинской механохимии - снижение дозы, увеличение эффективности и широты терапевтического окна для лекарственных средств после произведенного высокоинтенсивного механического воздействия. *Цель данной работы* - изучение свойств *in situ* (поверхностных, динамических, дисперсных, химических, биологических) модифицированного порошка лако-самида после трибохимического цикла в режиме механического нагружения с применением комплекса аналитических подходов для возможности управления фармацевтическими свойствами лекарственного вещества. Фармацевтическая субстанция лакосамид (Lcs) противоэпилептического действия (Jiangsu China); ножевая мельница со щётчным двигателем Stegler LM-250 роторного типа; сканирующая электронная микроскопия (LYRA3, Tescan; ИК-Фурье (Agilent Technologies, USA); динамическое (DLS) и статическое (SLS) лазерное светорассеяние (Malvern, UK); *Spirotox*-биотестирование; сравнительный тест кинетики растворения (СТКР). «Размерные спектры» распределения ансамблей частиц лакосаида в водном растворе в интервале от 1 до 120 ~ м демонстрируют феномен дисперсности, заключающийся в увеличении диаметра (d, мкм) и объемной доли (%) при продолжающемся процессе микронизации [1,2]. Предшествующее феномену дисперсности распространение волн напряжений, приводит к дефектной структуре кристалла, накоплению избыточной свободной поверхностной энергии  $F_s$  дисперсной системы и стремлению самопроизвольно уменьшить этот параметр за счет агрегации твердых частиц порошков и уменьшению площади поверхности в процессе воздействия. Метод DLS позволяет проанализировать изменения в конформации коллоидных частиц в растворах Lcs, как функцию от времени воздействия: наибольшие изменения среднего диаметра частиц, индекса полидисперсности и, как следствие, увеличение средней скорости счета и изменения дзета-потенциала происходит в первые 30-50 минут. Данный факт может указывать на набухание нанодисперсных биконтинуальных частиц в водном растворе Lcs. Исследования кинетики растворения с привлечением оригинального подхода, основанного на изменении во времени индикатрисы лазерного светорассеяния, демонстрирует 3-х кратное увеличение скорости растворения, обусловленное увеличением числа дислокаций и появлению точки перегиба при  $t_{ML} \sim 20$  мин соответствует равновесному времени механической активации субстанции и активации процесса гибели клеточного биосенсора в водных растворах Lcs. Результаты СТКР продемонстрировали преимущества свойств субстанции после механоактивации: 92% вещества извлекается в среду растворения за 10 минут, что составляет 7% различий с исходным образцом.

Проведенное исследование может иметь перспективное практическое значение в управлении улучшенными фармацевтическими свойствами, в повышении прочности лекарственных матриц путем предварительного деформационного упрочнения вследствие структурных перестроек при механическом нагружении.

**Литература:**

- [1] A. Michalis, E. Kalarakis et al, Mesoscopic modeling of flow and dispersion phenomena in fractured solids, Comput. Math. Appl., 55, 1525–1540, (2008).
- [2] E. Uspenskaya, E. Kuzmina et al., Exploring the Effects of Cramped-Impact-Type Mechanical Action on Active Pharmaceutical Ingredient (Levofloxacin)—Prospects for Pharmaceutical Applications, Powders, 2, 464–483, (2023).

## Устный доклад

# ДИСПЕРСНОСТЬ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ И МЕХАНОТРАНСДУКЦИЯ БИОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**Галкина Д.А., Левицкая О.В., Плетенева Т.В.**

ФГАОУ ВО "Российский университет дружбы народов  
им. Патриса Лумумбы"; 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 8  
e-mail: skretti@hotmail.com

Наночастицы в лекарственных средствах, попадая в организм, могут быть источником механического стимулирования биологических сигналов, известного как механотрансдукция [1]. Например, их присутствие в отдельных компартментах организма может приводить к высвобождению химических трансмиттеров и возникновению нейронных импульсов [2,3]. Как оказалось, биомеханические воздействия не менее важны, чем традиционно исследуемые эндогенные биохимические показатели жидких сред организма (рН, окислительно-восстановительные потенциалы, кинетический изотопный эффект, хиральные превращения, катализ) или экзогенная стимуляция (электромагнитные поля, температура, ультразвук). Положительные и отрицательные черты биомеханической стимуляции частицами дисперсной фазы экзогенного и эндогенного происхождения исследуются всё с большей активностью. Особое значение приобретают изучение физико-химических механизмов возможных механотрансдукционных процессов, вызываемых частицами разного иерархического уровня [3], которые должны сопровождаться разработкой методик контроля дисперсности жидких лекарственных средств.

В докладе обобщены данные по оценке дисперсности вакцин нового поколения на основе VLP-частиц и водных растворов лекарственных растительных препаратов антибактериального и противовоспалительного действия.

Рассмотрены тандемные подходы, объединяющие спектральные (ИК-Фурье НПВО, РФА, МС) и фармакокинетические (аррениусовская кинетика) с хемометрической обработкой (количественная корреляция «структура-активность» - QSAR и метод главных компонент - PCA) экспериментальных результатов.

## Литература:

- [1] Weaver VM. Cell and tissue mechanics: the new cell biology frontier. Mol Biol Cell. 2017 Jul 7;28(14):1815-1818. doi: 10.1091/mbc.E17-05-0320. PMID: 28684606; PMCID: PMC5541832.
- [2] Metze FK, Klok HA. Mechanoresponsive Micro-and Nanoparticles. Chimia (Aarau). 2019 Feb 27;73(1-2):35-38. doi: 10.2533/chimia.2019.35. PMID: 30813994.
- [3] Liu Y, Gao J, Peng M, Meng H, Ma H, Cai P, Xu Y, Zhao Q, Si G. A Review on Central Nervous System Effects of Gastrodin. Front Pharmacol. 2018 Feb 2;9:24. doi: 10.3389/fphar.2018.00024. PMID: 29456504; PMCID: PMC5801292.
- [4] Petrov GV, Galkina DA, Koldina AM, Grebennikova TV, Eliseeva OV, Chernoryzh YY, Lebedeva VV, Syroeshkin AV. Controlling the Quality of Nanodrugs According to Their New Property-Radiothermal Emission. Pharmaceutics. 2024 Jan 26;16(2):180. doi: 10.3390/pharmaceutics16020180. PMID: 38399241; PMCID: PMC10891502.
- [5] Syroeshkin AV, Petrov GV, Taranov VV, Pleteneva TV, Koldina AM, Gaydashev IA, Kolyabina ES, Galkina DA, Sorokina EV, Uspenskaya EV, Kazimova IV, Morozova MA, Lebedeva VV, Cherepushkin SA, Tarabrina IV, Syroeshkin SA, Tertyshnikov AV, Grebennikova TV. Radiothermal Emission of Nanoparticles with a Complex Shape as a Tool for the Quality Control of Pharmaceuticals Containing Biologically Active Nanoparticles. Pharmaceutics. 2023 Mar 16;15(3):966. doi: 10.3390/pharmaceutics15030966. PMID: 36986826; PMCID: PMC10059067.
- [6] Petrov GV, Galkina DA, Koldina AM, Grebennikova TV, Eliseeva OV, Chernoryzh YY, Lebedeva VV, Syroeshkin AV. Controlling the Quality of Nanodrugs According to Their New Property-Radiothermal Emission. Pharmaceutics. 2024 Jan 26;16(2):180. doi: 10.3390/pharmaceutics16020180. PMID: 38399241; PMCID: PMC10891502.

Устный доклад

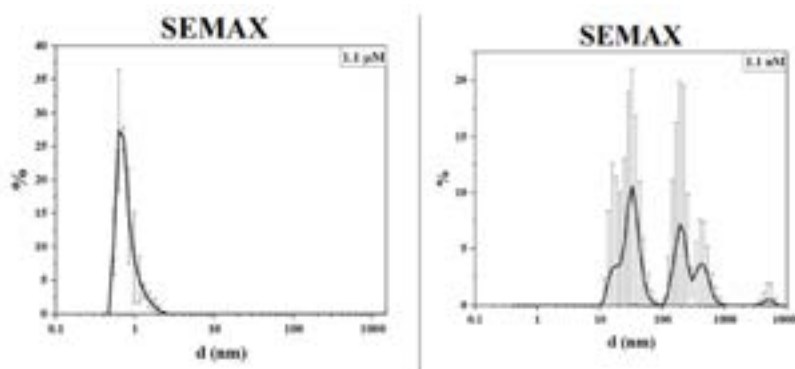
# СПЕЦИФИЧЕСКАЯ ИНДУКЦИЯ ПЛОТНОСТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ ВОДНЫМИ РАСТВОРАМИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПЕПТИДНЫХ СРЕДСТВ

Леденев О.В.,<sup>1,2</sup> Скрипников А.Ю.,<sup>1</sup> Сыроешкин А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Кафедра биоорганической химии, Биологический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 12

<sup>2</sup> Кафедра ФиТХ, Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6  
e-mail: ya@olegledenev.ru

Безопасные и эффективные – этими словами можно описать современные пептидные препараты, за счёт своей многопрофильности в отношении терапии различных заболеваний. Готовая лекарственная форма пептидных средств, представленных на российском рынке – водные растворы. При изучении физико-химических свойств водных растворов препаратов на пептидной основе была обнаружена специфическая индукция плотностных неоднородностей, которая позволяет предложить новый экспресс-метод контроля качества водных растворов пептидов. Цель исследования заключается в разработке нового экспресс-метода контроля качества водных растворов пептидов. Были исследованы лекарственные препараты на полипептидной основе (Кортексин, Церебролизин, Ретиналамин, Ренобрейн СМ), препараты монопептидов (DSIP, Семакс, Меланотан-2). Метод, с помощью которого наблюдали специфическую индукцию плотностных неоднородностей – динамическое лазерное светорассеяние, прибор Zetasizer Nano ZSP (Malvern Panalytical, Worcestershire, UK) [1]. Радиотепловое излучение водных растворов пептидов фиксировалась при измерении эмиссии с помощью оборудования TES-92 (TES Electrical Electronic Corp., Taipei, Taiwan) [2]. Было показано, что добавление пептидных комплексов в раствор вызывает специфическое (для биомолекул) формирование плотностных неоднородностей различного размера (рисунок 1), среди них можно выделить три условные группы: гидродинамический радиус пептида (до 10 nm), бобстоны (10-1000 nm), гигантские гетерофазные кластеры (более 1000 nm).



**Рисунок 1.** Специфическая индукция плотностных неоднородностей водного раствора монопептидного препарата Семакс.

Причина наблюдаемого радиотеплового излучения водных растворов пептидов в миллиметровой области спектра – присутствие наноразмерных частиц пептидов неправильной формы [3], дополнительным активированных нагревом при  $T=34^{\circ}\text{C}$ . Эмиссия электромагнитного излучения водными растворами наблюдалась и при разведении в соотношении 1:1000, сила сигнала при пМ концентрациях водных растворов составляла  $\approx 49\%$  (от исходного раствора). Показатели радиотеплового излучения воспроизводимы с 10% погрешностью.

Обнаруженное радиотепловое излучение водных растворов пептидных лекарственных средств позволяет предложить новый экспресс-метод контроля качества по показателю подлинность без вскрытия упаковки.



**Устный доклад****Литература:**

- [1] A.V. Syroeshkin, D.D. Ogotoeva, D.A. Galkina, E.V. Uspenskaya, T.V. Pleteneva. POLARIMETRY AND DYNAMIC LIGHT SCATTERING IN QUALITY CONTROL OF CARDIOTONIC AND HYPOTENSIVE TINCTURES, International Journal of Applied Pharmaceutics. pp.114-119.(2022).
- [2] G.V. Petrov, D.A. Galkina, A.M. Koldina, T.V. Grebennikova, O.V. Eliseeva, Y.Y. Chernoryzh , V.V. Lebedeva, A.V. Syroeshkin. Controlling the Quality of Nanodrugs According to Their New Property-Radiothermal Emission. Pharmaceutics;16(2): pp.180, (2024).
- [3] A.V. Syroeshkin, G.V. Petrov, V.Taranov, T.V. Pleteneva, A.M. Koldina, I.A. Gaidashev, E.S. Kolyabina, D.A. Galkina, E.V. Sorokina, E.V. Uspenskaya, I.V. Kazimova, M.A. Morozova, V.V. Lebedeva, S.A. Cherepushkin, I.V. Tarabrina, S.A. Syroeshkin, A.V. Tertyshnikov, T.V. Grebennikova. Radiothermal Emission of Nanoparticles with a Complex Shape as a Tool for the Quality Control of Pharmaceuticals Containing Biologically Active Nanoparticles, Pharmaceutics. 15. Pp.966. (2023)

## Устный доклад

# О ПРИРОДЕ ДЕЙСТВИЯ СЛАБЫХ И СВЕРХСЛАБЫХ ПОЛЕЙ И ИЗЛУЧЕНИЯ В МИКРОВОЛНОВОМ ДИАПАЗОНЕ НА БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ

Офицеров Е.Н., Урядов В., Коверда М., Дудкин И.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева  
Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов,  
Москва, Россия  
e-mail: ofitser@mail.ru*

Не вызывает сомнения, что использование устоявшихся воззрений и используемых теорий реакционной способности органических соединений, базирующихся, в первую очередь, на теории активированного комплекса, не позволяет адекватно описать природу взаимодействия электромагнитного излучения с молекулами органического вещества. Долгие годы основным препятствием к развитию адекватного подхода в данной области было игнорирование вращения молекул в жидкой фазе и роли энтропийного фактора. Ранее нами было предложено рассматривать реакционный комплекс из реагентов и молекул растворителя как диссипативную структуру Пригожина (ДСП) с соответствующими потоками энтропии [1]:

$$d^2(\Delta S)/dt^2 + 2\lambda d(\Delta S)/dt + \omega_o^2(\Delta S) = F_{\text{вн}} \cos(\omega_{\text{вн}} t + \varphi_{\text{вн}}) \quad (1)$$

Одним из факторов, обеспечивающих существование ДСП, является действие внешней возмущающей силы, обеспечивающий поток энтропии. Её действие должно распространяться как на молекулы реагентов, так и на молекулы растворителя сольватной оболочки. Из уравнения следует резонансный механизм поглощения энергии электромагнитного поля. Слабые поля расположены в микроволновом диапазоне и хорошо известно использование микроволновой спектроскопии в структурном анализе. Однако взаимодействуют только молекулы, имеющие дипольный момент и реализующие вращательную степень свободы [2].

Вода состоит из орто- и пара-изомеров [3] и только вращающийся изомер способен взаимодействовать с электромагнитным излучением в микроволновом диапазоне (резонансное изменение вращательных уровней). К чему это приводит в природе в докладе рассмотрено на примере транспорта воды через мембраны белками аквапоринов.

Мембрана пропускает (пассивный транспорт) только не полярные молекулы, независимо от их размера: кислород, диоксид углерода, стероиды, антибиотики. В литературе не обсуждаются причины такой избирательности. Можно полагать, что избирательность обусловлена защитой мозга от слабых электромагнитных излучений, в первую очередь, космического происхождения и в микроволновом диапазоне и выполняют эту защиту белки аквапорины. В последние 20 лет нами была проведена большая работа по взаимосвязи характеристик вращательного движения со свойствами вещества. Было показано, что молекулы в жидком агрегатном состоянии вращаются и при этом полярные молекулы поглощают энергию в микроволновом диапазоне [2]. Таким образом, через белок идут последовательно не отдельные молекулы воды, а идет цепочка, образованная за счёт ВС одного из изомеров (не вращающегося) молекул воды (пара-изомер), тем самым ликвидируется вероятностная конкуренция, снижающая скорость трансляции. В противном случае таких скоростей транспорта достичь невозможно, когда каждую приближающуюся молекулу необходимо ориентировать и одновременно отбирать энергию вращательного движения.

К чему это приводит? Это приводит к тому, что в мозг проникают только не вращающиеся молекулы одного из двух изомеров воды, которые не взаимодействуют со слабыми электромагнитными полями.

## Литература:

1. V.Uryadov, E.Ofitserov. Entropy oscillations and an isokinetic ratio. Mendelev Comm. 2003. №1. P.39. Е.Офицеров, В.Урядов. Механизм активации реакции диенового синтеза в растворе. Докл. РАН. 2007. Т.416. №3. С.344-347.
2. В.Урядов, Е.Офицеров. Механизм активации реакции циклоприсоединения в растворе. Монография. 2009. Казань.: КГТУ. 432 стр.
3. Першин С.М. Препринт ИКИ РАН № 1976, 1997. Бункин А.Ф., Першин С.М. Патент России, № 98 103249, 1997. Першин С.М. и Бункин А.Ф. Спектроскопия. 1988. 85(2), с. 190.

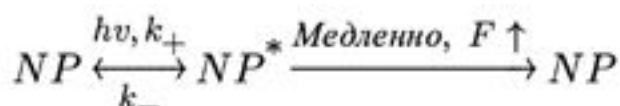
Устный доклад

# ФЕНОМЕН РАДИОТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НАНОЧАСТИЦ

**Петров Г.В., Сыроешкин А.В.**

*Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы,  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6  
e-mail: petrov\_gv@pfur.ru*

Феномен радиотепловой эмиссии наночастиц (НЧ) в фармации позволил создать новые экспресс-методы контроля качества лекарственных препаратов (ЛП) [1,2]. Нами предложена модель, в которой на наночастицах неправильной формы формируется градиент электрического потенциала со сверхвысокой напряженностью электрического поля: более 105 В/см. Это способствует формированию плазмоподобной структуры на участках поверхности наночастиц. Плазмоподобные образования наночастиц излучают в диапазоне от 75 ГГц, используя энергию тепловых колебаний. Плотность потока радиоизлучения в мм-диапазоне можно усилить не только при повышении температуры, но и при возбуждении белковых наночастицы в видимом диапазоне. Для растворов полипептидов можно описать переход наночастиц в возбужденное состояние можно при помощи следующей кинетической схемы:



где NP – невозбужденная наночастица, NP\* - наночастица с плазмоподобным участком, время релаксации равновесного перехода - менее 1 мс, константа скорости медленного перехода > 1 с, а F плотность потока радиотепловой эмиссии.

Данная кинетическая схема указывает на то, что именно медленные супрамолекулярные переходы НЧ являются источником радиотепловой эмиссии. Представленная выше схема реализуема при соблюдении двух условий: 1) НЧ способна к обратимым конформационным переходам, стимулированным источником энергии, а медленный переход к плазмоподобному объекту может быть сравним с аналогом немонотонных переходов у микроволновых излучателей [3]; 2) обязательным условием также является форма НЧ, она должна быть сложной и несферической, что будет способствовать стабилизации плазменного участка.

Излучение наночастиц в мм-диапазоне позволило разработать дистанционные методы контроля качества лекарственных препаратов, в том числе, без вскрытия первичной упаковки [4,5]. Новые методы также позволили контролировать качество по показателю «Подлинность» новой группы лекарственных препаратов, полученных на основе градуальной технологии, в частности, при помощи вибрационных итераций, для которых введена в Государственной Фармакопее новая статья (ОФС.1.7.0001).

## Литература:

- [1] Syroeshkin A.V., Petrov G.V., Taranov V.V., Pleteneva T.V., Koldina A.M., Gaydashev I.A., et al. Radiothermal Emission of Nanoparticles with a Complex Shape as a Tool for the Quality Control of Pharmaceuticals Containing Biologically Active Nanoparticles. *Pharmaceutics*, 15(3):966, (2023).
- [2] Petrov G. V., Galkina D.A., Koldina A.M., Grebennikova T.V., Eliseeva O.V., Chernoryzh Y.Yu., et al. Controlling the Quality of Nanodrugs According to Their New Property—Radiothermal Emission. *Pharmaceutics*, 16(2):180, (2024).
- [3] Chen X., Lendley-Hatcher H., Stantchev R.I., Wang J., Li K. Hernandez Serrano A. et al. Terahertz (THz) Biophotonics Technology: Instrumentation, Techniques, and Biomedical Applications. *Chemical Physics Reviews*, 3(1): 011311, (2022).
- [4] Petrov G.V., Gaidashev I.A., Syroeshkin A.V. Physical and Chemical Characteristic of Aqueous Colloidal Infusions of Medicinal Plants Containing Humic Acids. *International Journal of Applied Pharmaceutics*, 16(1): 76-82, (2024).
- [5] Petrov G.V., Taranov V.V., Syroeshkin A.V. Express Method For Quality Control Of Products After The Fluidized Bed Aerosol Chamber By Detecting Radio Thermal Emission Of Nanoparticles. *European Chemical Bulletin*, 12(6): 3035-3041, (2023).

## Постерный доклад

# СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ АКИЛИРУЮЩЕГО ЦИТОСТАТИКА ПРОСПИДИЯ ХЛОРИДА

Кладиев А.А.,<sup>1</sup> Кладиев А.А.,<sup>2</sup> Успенская Е.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ФГАОУ ВО "Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы";  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 8

<sup>2</sup> Белорусский государственный медицинский университет, Республика Беларусь,  
Минск, 220083, г. Минск, пр-т Дзержинского 83, 1-й корпус  
e-mail: 1132237275@pfur.ru

Проспидин (проспидия хлорид, *Prospidii chloridum*,  $\text{PrsCl}_2$ ) – алкилирующее антинеопластическое химиотерапевтическое средство, характеризующееся цитостатическим, противовоспалительным, иммуносупрессивным действием. Применяется наружно и внутрь для лечения новообразований кожи и слизистых оболочек, различных видов плоскоклеточного рака, системной красной волчанки, рефрактерного (труднолечимого) ревматоидного артрита [1]. В связи с длительностью терапевтического лечения пациентов актуальным вопросом остается снижение токсичности терапии проспидия хлорида, а также разработка экспрессного и доступного метода качественного и количественного анализа на основе формально запрещенных  $n \rightarrow \sigma^*$  электронных переходов с участием молекулярных орбиталей.

Цель работы – оценка токсичности и способы ее снижения на примере клеточной культуры *Spirostomum ambiguum*, а также разработка метода УФ-СФ для идентификации и количественного определения действующего вещества  $\text{PrsCl}_2$ .

Объект исследования – лекарственная субстанция проспидия хлорид («УНИТЕХПРОМ БГУ», содержание действующего вещества 99,0 – 102,0%); водные растворы с концентрацией от 0,05 до 0,2 моль/л для УФ-СФ анализа. Спектры поглощения с определением аналитической длины волны ( $\lambda_{\text{max}}$ , нм) в интервале от 200 до 400 нм получены с использованием УФВ-спектрофотометра Agilent Cary 60 (США). Валидационные параметры определены в соответствии с регламентом Общей фармакопейной статьи ОФС.1.1.0012 «Валидация аналитических методик». Для исследования токсичности водных растворов был применен метод *Spirotox*, основанный на определении времени жизни ( $\tau_L$ , мин) и энергии активации ( $\sigma^{\text{bcs}}E_a$ , кДж/моль) клеточных переходов. Для снижения токсичности применялась вода, обедненная по содержанию дейтерия (Cambridge Isotope Lab, Inc, ddw, 4 ppm).

Проведено исследование токсичности водных растворов проспидия хлорида методом *Spirotox*. Величина энергии активации клеточных переходов в состоянии гибели составила  $\sigma^{\text{bcs}}E_a = 91,5 \pm 4,0$  (кДж/моль). При приготовлении раствора  $\text{PrsCl}_2$  в воде, обедненной по дейтерию, энергия активации составила  $\sigma^{\text{bcs}}E_a = 155,5 \pm 38$  (кДж/моль).

Спектр поглощения водных растворов  $\text{PrsCl}_2$  в интервале от 200 до 400 нм в диапазоне концентраций от 0,05 моль/л до 0,2 моль/л представлен характерным максимумом при 282 нм и минимумом при 254 нм. Рассчитанное значение коэффициента молярной экстинкции составляет  $\varepsilon = 3,89 \pm 0,24$  (л·моль<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>) ( $n = 35$ ). Оценка грубых промахов проведена с использованием Q-критерия. Правильность методики подтверждена по оценке свободного члена «а» ( $0,092 \pm \Delta 0,127$ ) в уравнении линейности  $A = f(C, \text{моль/л})$ ; доказаны прецизионность методики при определении коэффициента экстинкции ( $3,89 \pm 0,24$ ) и внутрилабораторная воспроизводимость с оценкой ошибки среднего ( $\varepsilon, \% = 2,1$ ).

При оценке токсичности методом *Spirotox* было показано, что в водных растворах с пониженным соотношением D/H, токсичность снижается в 1,7 раза. Разработана и валидирована методика УФ-СФ определения проспидия хлорида в водных растворах. Результаты исследования могут быть применены в фармацевтической практике для определения действующего вещества в субстанции и готовых лекарственных формах.

## Литература:

[1] A. Kladiev, E. Stepanova, E. Solomko, et al, Anti-angiogenic properties of prospidin in vitro, Russian Biotherapeutic Journal, 3(8), 45–50, (2009).

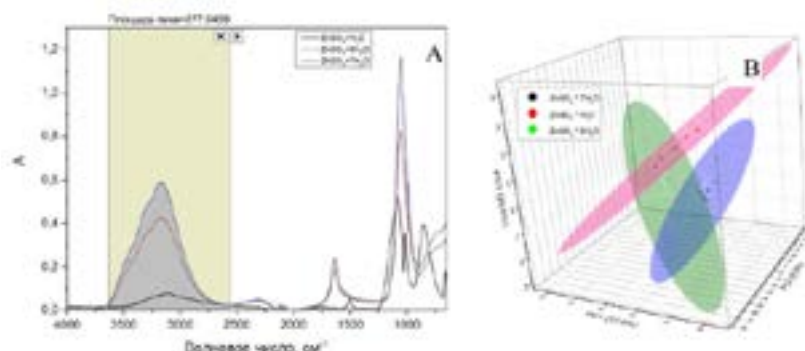
Постерный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ СУЛЬФАТА ЦИНКА С ПОМОЩЬЮ ИК-СПЕКТРОМЕТРИИ: КАЧЕСТВЕННЫЙ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

Кузьменко Е.Е., Колдина А.М.

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы,  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6  
e-mail: kuzmenko\_ee@pfur.ru

В работе представлена новая методика количественного определения содержания воды в неорганических субстанциях с использованием ИК-спектроскопии. Метод с приставкой нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) обеспечивает быструю и высококачественную оценку исследуемого образца, не нарушая его целостности. В данном исследовании были изучены субстанции сульфата цинка с различным количеством кристаллогидратной воды. По инфракрасным спектрам возможно определить количественное содержание воды в образцах цинка сульфата, используя математическую обработку, включая расчет площади под кривой и анализ результатов с применением метода главных компонент [1,2]. Цель исследования заключается в определении содержания воды в различных формах кристаллогидрата сульфата цинка с применением ИК-спектроскопии. В работе использовались порошки гидратов сульфата цинка (моно-, гекса- и гептагидрат), ИК-спектрофотометр Cary 630, сушильный шкаф Binder FD23, а также программное обеспечение OriginPro 2021 для статистической обработки данных. На рисунке 1 А представлены результаты определения содержания воды в субстанциях, основанные на расчёте площади под кривой пика и результаты 3D-обработки методом главных компонент (МГК) для образцов после высушивания в сушильном шкафу при температуре 105 °С в течение 3 ч (Рисунок 1В).



**Рисунок 1.** А: Расчёт площади пика под кривой образца  $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ . В: 3D-МГК для области ИК-спектров, соответствующей колебанию гидроксильной группы (3635 - 2568  $\text{cm}^{-1}$ ).

Содержание воды имеет прямую зависимость от интенсивности колебаний гидроксильной группы. Поэтому данный метод может быть применен для количественной оценки содержания воды в кристаллогидратных формах неорганических фармацевтических субстанций. Результаты хемометрической обработки открывают возможность применения ИК-спектроскопии для качественного анализа образцов уже после высушивания, когда состав фармацевтических субстанций становится равнозначным по количеству кристаллогидратной воды, но сохраняется история пробоподготовки, позволяющая различать образцы методом главных компонент.

Новые подходы к качественной и количественной оценке открывают возможность оперативного контроля качества фармацевтических субстанций одинаковой неорганической природы, но различной кристаллогидратной формы.

## Литература:

1. G. H. Jeffrey, J. Bassett, J. Mendham, *Análise Química Quantitativa* (LTC Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro), 741-57, (1992).
2. H. Yan, X. Song, K. Tian, Y. Chen, Y. Xiong, S. Min, Quantitative determination of additive Chlorantraniliprole in Abamectin preparation: Investigation of bootstrapping soft shrinkage approach by mid-infrared spectroscopy, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 191, 296-302, (2017).

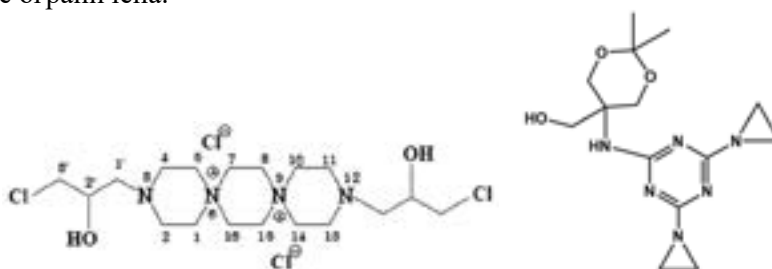


## Постерный доклад

**ЭНТАЛЬПИИ И ТЕПЛОЕМКОСТИ ГИДРАТАЦИИ  
ЦИТОСТАТИКОВ «ПРОСПИДИН» И «ДИОКСАДЕТ»****Кустов А.В., Смирнова Н.Л.**

ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН,  
153045 Иваново, ул. Академическая, д. 1  
e-mail: kustov26@yandex.ru

«Проспидин» и «Диоксадет» являются отечественными цитостатическими препаратами и находят применение для лечения ряда неопластических состояний. Однако экспериментальная информация о гидратации данных соединений и взаимодействии между молекулами растворенных веществ при конечных концентрациях в водных растворах крайне ограничена.



**Рисунок.** Структурные формулы «Проспидина» (вверху) и «Диоксадета» (справа)

Калориметрическим методом определены энтальпии растворения обоих цитостатиков в воде в физиологическом температурном интервале, а также давление паров в газовой фазе для расчета энтальпии сублимации «Диоксадета». Установлено, что при высоком разбавлении энтальпии растворения «Диоксадета» не зависят от концентрации растворенного вещества (неэлектролит), а в растворах «Проспидина» (1:2 электролит) обнаруживается выраженная концентрационная зависимость, которая удовлетворительно описывается в рамках второго приближения Дебая-Хюккеля. Показано, что отклонение от предельного закона вызвано взаимодействием катион-анион. Энтальпии и теплоемкости растворения обоих препаратов положительны, при этом теплоемкость растворения «Диоксадета» значительно больше вследствие высокой гидрофобности молекулы «Диоксадета». Установлено, что энтальпия сублимации «Диоксадета» при 298 К равна  $158.5 \pm 3.7$  кДж/моль, а энтальпия гидратации –  $154.6 \pm 3.7$  кДж/моль.

## Постерный доклад

# ОСОБЕННОСТИ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ ГРУППЫ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ПРИМЕРЕ ДЕКСТРАНА

Марченкова Л.А., Сафдари А., Успенская Е.В.\*

ФГАОУ ВО "Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы";  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 8  
e-mail: 1132233178@rudn.ru

Декстран – инертный полисахарид для применения *in vivo*, состоящий из глюкозы, соединенной  $\alpha$ -1,6-гликозидными связями, с возможными боковыми цепями. Продуцентом субстанции, используемой в фармацевтической промышленности для восстановления гемодинамических нарушений, выступает культура *Lactobacillaceae* и *Weissella*. Наиболее востребованы водные растворы декстрана с молекулярной массой 30–40 кДа и 70 кДа, обладающие волемиическим, диуретическим, детоксикационным и антитромботическим действиями. Контроль качества субстанции и водных растворов на основе действующей НД, включает различные физико-химические методы, подтверждающие подлинность вещества. Однако, определение численного и объёмного распределения частиц, а также их электрокинетической устойчивости, имеет важное значение при оценке стабильности, растворимости, безопасности, биологической активности и биодоступности лекарственных средств декстрана. *Цель работы* - разработка новых подходов на основе методов лазерного рассеяния к контролю качества водных растворов декстрана для дополнения существующих НД. В качестве источника декстрана выступил лекарственный препарат Реополиглюкин (Rpg) 10%, а также в разведении 1:100. Анализ размера частиц проводился методом динамического лазерного светорассеяния (DLS) с помощью лазерного наносайзера Zetasizer Nano ZSP. Для характеристики ширины гранулометрического распределения частиц по размерам применяли индекс полидисперсности (PDI). Статистическая обработка данных осуществлялась с использованием t-теста Стьюдента и однофакторного дисперсного анализа (ANOVA). Различия считались значимыми при  $p < 0,05$ .

Из-за изменения протекания химических реакций в среде, обедненной дейтерием, появляется кинетический изотопный эффект [1]. В связи с этим были проведены испытания свойств коллоидных систем в различных водах. Результаты метода DLS демонстрируют унимодальные, узкие пики распределения коллоидных частиц в растворе декстрана 10%, как в единицах интенсивности (I, %), так и единицах объемной концентрации (V,%):  $D_{I,Mean} = 7,6 \text{ нм}$  и  $D_{V,Mean} = 5,6 \text{ нм}$ . Монодисперсность образца подтверждается индексом  $PDI = 0,22$ , значения которого чувствительны к присутствию агрегатов в растворах: однородность частиц в популяции приводит к узкому результирующему распределению по размерам и небольшим значениям PDI, что определяет монодисперсность образца. Значение PDI в разбавленном (1:100) образце снижается ( $PDI = 0,20$ ), что указывает на большую однородность коллоидного раствора (табл. 1).

**Таблица 1.** Характеристика дисперсности образцов коллоидного кровезаменителя по данным метода DLS.

| Исследуемый образец     | Размер $\pm$ SD, нм |               | PDI  | $\zeta$ , mV |
|-------------------------|---------------------|---------------|------|--------------|
|                         | Intensity, %        | Volume, %     |      |              |
| Реополиглюкин 10%       | 7,6 $\pm$ 2,6       | 5,6 $\pm$ 1,9 | 0,22 | -0,7         |
| Разведение 1:100 (0,1%) | 10,7 $\pm$ 4,0      | 7,4 $\pm$ 2,7 | 0,20 | -0,6         |

В работе впервые представлены результаты исследования дисперсных наноразмерных свойств Реополиглюкина водного раствора, содержащего декстран с молекулярной массой 30–40 кДа (Dex35). Полученные результаты могут представлять интерес для разработки дополнительных норм и критериев оценки качества жизненно важных лекарственных веществ группы коллоидного кровезаменителей.

## Литература:

[1] Uspenskaya, E.V.; Pleteneva, T.V.; Kazimova, I.V.; Syroeshkin, A.V. Evaluation of Poorly Soluble Drugs' Dissolution Rate by Laser Scattering in Different Water Isotopologues. *Molecules*; 26: 601. (2023)

Постерный доклад

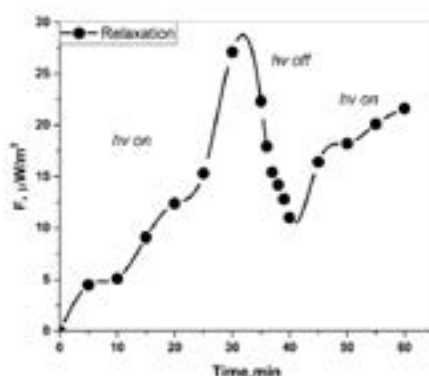
# МЕТОД НЕИНВАЗИВНОГО КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ

Назаров А.А., Петров Г.В.

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы,  
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6  
e-mail: 1032200520@pfur.ru

Нanomатериалы обладают уникальными физико-химическими свойствами. Именно такие свойства, как повышенное значение удельной площади поверхности и локализованный поверхностный плазмонный резонанс, открыли путь для инновационных применений в области медицины, химии и фармации [1,2]. В современной фармацевтической промышленности все более значимыми становятся лекарственные препараты (ЛП) на основе биологически активных наночастиц (НЧ) в виде жидких лекарственных форм, где растворителем, зачастую, является вода. Несмотря на их потенциал, немаловажной задачей для провизоров остается контроль качества данных ЛП. Обращая внимание на современные подходы к исследованию и контролю качественных характеристик нанопрепаратов, стоит учесть не только трудоемкость и длительную пробоподготовку, но и отсутствие возможности неинвазивного анализа ЛП на основе НЧ [3]. В представленной работе исследован современный нано-ферментный препарат на основе модифицированной гиалуронидазы, направленный на терапию и профилактику воспалительных заболеваний. Основной целью исследования было показать возможность неинвазивного контроля наноструктурных препаратов без вскрытия первичной упаковки.

В водных растворах НЧ вступают в Ван-Дер-Ваальсовы взаимодействия поверхность к поверхности или же диполь-дипольные взаимодействия [4]. Также для них характерны повышенные значения напряженности электрического поля, что способствует формированию квазиплазменных объектов из супрамолекулярных электронов [5]. Было замечено, что при «активации» НЧ путем нагревания или же световой активации при длине волны 412 нм, наблюдается их излучение в миллиметровом диапазоне длин волн. Именно регистрация собственного радиотеплового излучения от поляризованных биологически активных НЧ является новым методом их контроля качества [6].



**Рисунок 1.** Кинетика возрастания и релаксации собственного радиотеплового излучения НЧ модифицированной гиалуронидазы.

Для исследования данного феномена использовались датчики детекции электромагнитного излучения TES-92 (TES Electrical Electronic Corp., Тайбэй, Тайвань), настроенные на анизотропное измерение вдоль оси Z. Измерения проводились без вскрытия первичной упаковки при активации путем нагревания до 37 °C при помощи твердотельного термостата с элементами Пельте (Термо 24-15, Россия). Фоновое излучение не превышало 1 мкВт/м². Измерения проводились не менее 7 раз. Контроль изменения размерного спектра исследуемых образцов осуществлялся при помощи метода динамического лазерного светорассеяния ZetasizerNano ZSP (DLS)

### Постерный доклад

(MALVERN Instruments, Малверн, Великобритания). Измерения каждого образца проводились не менее 7 раз. Результаты обрабатывались с помощью пакета программного обеспечения Origin ProLab (США). Представленные на рисунке 1 результаты исследования собственного радиотеплового излучения НЧ модифицированной гиалуронидазы, демонстрируют необходимость активации образцов при измерении, что подтверждает описанную ранее квазиравновесную кинетическую схему [7]. На графике показана кинетика возрастания плотности потока электромагнитного сигнала и его релаксации при присутствии или же отсутствии активации светом с длиной волны 412 нм.

Новый подход к контролю качества ЛП на основе биологически активных НЧ открывает широкий спектр возможностей для стандартизации подобных препаратов без вскрытия первичной упаковки.

#### Литература:

- [1] Johny J., van Halteren C.E.R., Cakir F., Zwiehoff S., Behrends C., Bäumer C., et al. Surface Chemistry and Specific Surface Area Rule the Efficiency of Gold Nanoparticle Sensitizers in Proton Therapy. *Chemistry – A European Journal*, 29(50), (2023).
- [2] Fu L., Lin C.T., Karimi-Maleh H., Chen F., Zhao S. Plasmonic Nanoparticle-Enhanced Optical Techniques for Cancer Biomarker Sensing. *Biosensors (Basel)*, 13(11), P. 977, (2023)
- [3] Joudeh N., Linke D. Nanoparticle classification, physicochemical properties, characterization, and applications: a comprehensive review for biologists. *J Nanobiotechnology*, 20(1):262, (2022).
- [4] Luo D., Yan C., Wang T. Interparticle Forces Underlying Nanoparticle Self-Assemblies. *Small*, 11(45), pp. 5984–6008, (2015).
- [5] Gao Y., Li M., Sun C., Zhang X. Microbubble-enhanced water activation by cold plasma. *Chemical Engineering Journal*, 446:137318, (2022).
- [6] Petrov G. V., Galkina D.A., Koldina A.M., Grebennikova T.V., Eliseeva O.V., Chernoryzh Y.Yu., et al. Controlling the Quality of Nanodrugs According to Their New Property—Radiothermal Emission. *Pharmaceutics*, 16(2):180, (2024).
- [7] Syroeshkin A.V., Petrov G.V., Taranov V.V., Pleteneva T.V., Koldina A.M., Gaydashev I.A., et al. Radiothermal Emission of Nanoparticles with a Complex Shape as a Tool for the Quality Control of Pharmaceuticals Containing Biologically Active Nanoparticles. *Pharmaceutics*, 15(3):966, (2023).

# МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ





Приглашенный доклад

# ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ АЦЕТОНИТРИЛА С ПОМОЩЬЮ DFT РАСЧЕТОВ КЛАСТЕРОВ $(\text{CH}_3\text{CN})_m \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$

**Богдан Т.В., Абрамович А.И., Фирсов Д.А., Черткова В.П.**

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
Российская Федерация, 119991, Москва, Ленинские Горы, д.1 стр. 3  
e-mail: chemist2014@yandex.ru

Для водных растворов характерно появление микрогетерогенности, что объясняется полным или частичным разрушением сетки водородных связей в воде и образованием различных по структуре агломератов. В области малых концентраций неэлектролитов наблюдаются аномалии концентрационных зависимостей ряда физических свойств, и эта область наиболее хорошо изучена. Область средних и больших концентраций изучена относительно слабо.

В докладе представлены результаты экспериментального изучения водных растворов ацетонитрила (АЦН) во всей области концентраций. Взаимодействие между молекулами воды и АЦН при образовании растворов приводит к перестройке структуры обоих компонентов. В растворах вода – АЦН возможны различные виды взаимодействий: вода–вода, АЦН–вода, АЦН–АЦН. На основе анализа ряда физических свойств вся область существования водных растворов АЦН была разделена на 5 различающихся по структуре интервалов:  $x = 0-0.1$ ,  $0.10-0.35$ ,  $0.35-0.60$ ,  $0.6-0.9$ ,  $0.9-1.0$  м.д. АЦН [1]. Особенности структуры в каждом из них были объяснены образованием различающихся по структуре молекулярных агломератов.

Для анализа строения молекулярных агломератов в водных растворах АЦН мы исследовали межмолекулярные взаимодействия в кластерах вода-ацетонитрил конечного размера, полагая, что агломераты в растворах сопоставимы по размеру и структуре с исследованными нами кластерами. Строение кластеров  $(\text{CH}_3\text{CN})_m \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$  было рассчитано методом теории функционала плотности с функционалом B3LYP/cc-pvdz с учетом дисперсионной поправки Гримме D3 [2].

Полученные данные о взаимном расположении молекул воды и АЦН в кластерах использованы для интерпретации экспериментальных данных и построения модели водных растворов ацетонитрила.

Данный подход к описанию строения водных растворов представляется перспективным для описания межмолекулярных взаимодействий и структуры растворов различного состава. Следует отметить, что подобный подход ранее был использован для описания структуры водных растворов электролитов [3].

*Работа выполнена в рамках темы «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов» (121031300090-2).*

## Литература:

- [1] А. И. Абрамович и Л. В. Ланшина, Анализ структуры водных растворов ацетонитрила на основе изучения объемно-упругих свойств, Журнал физической химии, 88, 815-821 (2014).
- [2] Т.В. Богдан, Д.А. Фирсов, В.П. Черткова, и А.И. Абрамович, Расчет строения кластеров  $(\text{CH}_3\text{CN})_n$  и  $(\text{CH}_3\text{CN})_{n-1} \cdot \text{H}_2\text{O}$  методом теории функционала плотности, Журнал структурной химии, 65 (11), 134865 (2024).
- [3] А.К. Лященко, А.Ю. Засецкий, Изменения структурного состояния, динамики молекул воды и свойств растворов при переходе к электролитно-водному растворителю, Журнал структурной химии, 39(5), 851-863 (1998).

## Приглашенный доклад

# РОСТ КРИСТАЛЛОВ ИЗ ПЕРЕСЫЩЕННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫЕ МИКРОЧАСТИЦЫ; ВЛИЯНИЕ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА ЖИДКОСТИ И ОБЛУЧЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКОМ

**Болоцкова П.Н.,<sup>1</sup> Бункин Н.Ф.,<sup>1,2</sup> Воронов В.В.,<sup>2</sup> Нагаев Е.И.,<sup>2</sup> Новаковская Ю.В.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> *Московский Государственный Технический Университет им. Н.Э. Баумана,  
ул. 2-я Бауманская, 5, 105005, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,  
ул. Вавилова, 38, 119991, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Ленинские горы, 1/3, 119991, Москва, Россия*

*e-mail: bolotskova@inbox.ru; nbunkin@mail.ru; voronov@lst.gpi.ru;  
nagaev\_e@kapella.gpi.ru; jvnovakovskaya@gmail.com*

В экспериментах по Рентгеновской дифрактометрии была изучена специфика кристаллообразования из пересыщенных водных растворов  $\text{CuSO}_4$  на гладких стеклянных подложках; при этом в водный раствор добавлялась суспензия субмикронных частиц Наффона. Как известно, из пересыщенных водных растворов  $\text{CuSO}_4$  могут быть выращены пентагидраты  $\text{CuSO}_4 \times 5\text{H}_2\text{O}$  с триклинной сингонией и тригидраты  $\text{CuSO}_4 \times 3\text{H}_2\text{O}$  с моноклинной сингонией. При этом для данного кристалла энергетически более выгодной кристаллической структурой является триклинная сингония, т.е. на гладких подложках будут вырастать именно пентагидраты. Как было показано ранее, в растворах, приготовленных на основе обычной природной воды с содержанием дейтерия 157 ppm в процессе набухания Наффона происходит разматывание полимерных цепочек в объем жидкости перпендикулярно поверхности полимера; этот процесс влияет на сингонию выращиваемого кристалла  $\text{CuSO}_4$ . Именно, при выращивании кристалла из пересыщенного раствора на основе природной воды осадок на полимерной подложке представляет собой тригидрат  $\text{CuSO}_4 \times 3\text{H}_2\text{O}$ . В то же время, если пересыщенный раствор приготовлен на основе обедненной по дейтерию воды (содержание дейтерия 3 ppm; в этом случае эффект разматывания отсутствует), то кристаллический осадок на полимерной подложке представляет собой пентагидрат  $\text{CuSO}_4 \times 5\text{H}_2\text{O}$ . Показано, что добавление в водный раствор суспензии субмикронных частиц Наффона также влияет на структуру кристаллического осадка на гладкой стеклянной подложке. Именно, если раствор приготовлен на основе природной воды, то кристаллический осадок представляет собой смесь тригидрата и пентагидрата, а если раствор приготовлен на основе обедненной по дейтерию воды, осадок на гладкой подложке является пентагидратом. Показано, что облучение ультразвуком суспензии частиц Наффона в процессе выращивания кристалла приводит к тому, что кристаллический осадок из растворов на основе обычной и обедненной по дейтерию воде является пентагидратом  $\text{CuSO}_4 \times 5\text{H}_2\text{O}$ . В экспериментах по динамическому светорассеянию было получено, что субмикронные частицы Наффона в природной воде способны формировать микронные агрегаты за счет эффекта разматывания полимерных волокон, а в обедненной по дейтерию воде такие агрегаты не образуются, т.е. в этом случае размеры частиц Наффона порядка 100 – 200 нм. В этих экспериментах было также показано, что ультразвук разрушает агрегаты частиц Наффона в суспензии на основе природной воды; в результате размеры частиц Наффона в суспензиях на основе природной и обедненной по дейтерию воды становятся одинаковыми. Можно утверждать, что разница в кристаллических структурах осадка на гладкой подложке для растворов на основе природной и обедненной по дейтерию воды с добавлением суспензии субмикронных частиц Наффона обусловлена разматыванием / отсутствием разматывания полимерных волокон с поверхности этих частиц.

Приглашенный доклад

# РЕЗОНАНСНЫЕ КОЛЕБАНИЯ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ИОНАМИ ГАЗОВЫХ НАНОПУЗЫРЬКОВ КАК ВОЗМОЖНЫЙ ИСТОЧНИК ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ГИГАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ

**Бункин Н.Ф., Герасимов Р.Ю.**

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,  
ул. 2-я Бауманская, д. 5, Москва, 105005, Россия  
e-mail: nbunkin@mail.ru r\_guerassimov@mail.ru

В эксперименте по облучению образцов высокоразбавленного водного раствора NaCl и деионизованной воды электронным пучком с энергией 6 MeV с длительностью импульса  $\tau = 1.5$  мс было обнаружено, что ряд свойств облученного образца дистанционно “переносится” на необлученный образец той же жидкости (эффект инкубирования). Этот перенос осуществляется при погружении стеклянного флакона с необлученным (инкубируемым) образцом внутрь облученного образца в течение часа. Эффективность инкубирования оценивалась по величине коэффициента поглощения на длине волны  $\lambda = 600$  нм для необлученного образца. Как известно, вода не поглощает на этой длине волны, но на этой длине волны центрирована полоса поглощения гидратированных электронов, т.е. в облученных электронами образцах такое поглощение есть. Оказалось, что в инкубируемых образцах также появляется поглощение на этой длине волны, причем этот эффект проявляется при интенсивном встряхивании образцов. Для объяснения была разработана теоретическая модель, основанная на концепции бабстонов (аббревиатура *bubble, stabilized by ions*). Бабстон с радиусом  $R \approx 100$  нм стабилизирован за счет адсорбции анионов, т.е. его оболочка отрицательна. Пучок электронов индуцирует неоднородную силу Кулона вдоль поверхности бабстона, что приводит к возникновению радиальных колебаний на собственной частоте в гигагерцовом диапазоне. Поскольку бабстон заряжен отрицательно, эти колебания должны сопровождаться излучением электромагнитной волны. Для мощности излучения электромагнитной волны отдельного бабстона получена теоретическая оценка  $I \approx 6 \cdot 10^{-15}$  Вт, т.е. такая мощность очень мала. Показано, что в результате встряхивания объемная плотность бабстонов может увеличиться на 4 порядка по сравнению с находящимися в покое жидкими образцами. При этом интегральная мощность излучения ансамбля бабстонов в объеме 100 мл достигает 1 мВт. Излучение с такой мощностью может приводить к эффектам инкубации: бабстоны в инкубируемом образце резонансно возбуждаются электромагнитной волной от облученного электронами образца, в результате чего возникает поглощение на длине волны 600 нм. Модель, основанную на излучении бабстонами электромагнитной волны в гигагерцовом диапазоне, можно использовать для объяснения эффектов дистанционного воздействия водных растворов друг на друга [1-4].

**Литература:**

- [1] Penkov N. Antibodies processed using high dilution technology distantly change structural properties of IFN  $\gamma$  aqueous solution // *Pharmaceutics*. – 2021. – Vol.13, №11. – P.1864. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13111864>
- [2] Jerman I. et al. Molecular signal transfer of highly diluted antibodies to interferon-gamma regarding kind, time, and distance of exposition // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2024. – Vol.25, №1. – 656. <https://doi.org/10.3390/ijms25010656>
- [3] Novikov V.V. and Yablokova E.V. Interaction between highly diluted samples, protein solutions and water in a controlled magnetic field // *Applied Sciences*. – 2022. – Vol.12, №10. – 5185. <https://doi.org/10.3390/app12105185>
- [4] Petrova A. et al. Phenomenon of post-vibration interactions // *Symmetry*. – 2024. – Vol.16, №8. – 958. <https://doi.org/10.3390/sym16080958>

Приглашенный доклад

# ЛАЗЕРНАЯ УЛЬТРАМИКРОСКОПИЯ НАНОЧАСТИЦ В ВОДНЫХ СРЕДАХ: РЕАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ, ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЙ

Вайнер Ю.Г.,<sup>1</sup> Силаев Г.О.,<sup>1,2</sup> Верещагин Ф.В.,<sup>1</sup> Шайдулин А.Т.,<sup>2</sup>  
Тытик Д.Л.,<sup>3</sup> Орловская Е.О.,<sup>2</sup> Орловский Ю.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт спектроскопии РАН, 108840, г. Москва, Троицк, ул. Физическая, д.5.

<sup>2</sup> Высшая школа экономики, Национальный исследовательский университет, 101000, Москва,

<sup>3</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 ГСП-1,  
г. Москва, ул. Вавилова, д.38,

<sup>3</sup> Институт физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН,  
119071, г. Москва, Ленинский проспект, 31.

e-mail: [vainer@isan.troitsk.ru](mailto:vainer@isan.troitsk.ru)

Разработка и совершенствование методов оптической микроскопии наночастиц разной природы, в том числе биологической, является одним из актуальных направлений современной фотоники. Это объясняется наличием ряда принципиальных преимуществ методов оптической микроскопии, таких как высокие оперативность и информативность, простота и малое время подготовки образца, большая, по сравнению с электронной и зондовой микроскопией, доступность аппаратуры, а также, что чрезвычайно важно, возможность проводить измерения в водных средах, в частности, изучать нанообъекты биологической природы в нативных условиях. Не менее важным достоинством оптической микроскопии является возможность достижения чувствительности достаточной для надежной визуализации одиночных частиц сверхмалых размеров (до единиц нанометров и менее, включая одиночные атомы и молекулы).

Основной целью доклада является демонстрация реальных возможностей разработанного в коллективе лазерного ультрамикроскопа “светового полотна”, работающего в режиме регистрации сигналов упругого рассеяния, в разных применениях. Показано, что помимо визуализации одиночных наночастиц и определения их гидродинамического радиуса, созданный микроскоп позволяет получать информацию о процессах агрегации изучаемых наночастиц и особенностях внутренней структуры возникающих на их основе агрегатов, в частности, оценивать плотность упаковки наночастиц в наблюдаемых агрегатах.

Обсуждаются возможности применения методов оптической микроскопии для изучения в водных растворах наночастиц биологической природы, в том числе для целей медицинской диагностики. В частности, приводятся примеры применения созданного микроскопа для характеристики наночастиц в сыворотке крови человека (агрегаты альбуминов, липопroteины и др.)

Приглашенный доклад

# ЭИС И ЯМР АНАЛИЗ ДВИЖЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ В СТЕБЛЕ РАСТЕНИЙ

**Кернбах С.В.,<sup>1</sup> Першин С.М.<sup>2</sup>**<sup>1</sup> CYBRES GmbH, Research Center of Advanced Robotics and Environmental Science,  
Штутгарт, Германия<sup>2</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва  
e-mail: serge.kernbach@cybertronica.de.com

В докладе рассматривается применение электрохимической импедансной спектроскопии (ЭИС) и ядерного магнитного резонанса (ЯМР) для анализа движения жидкостей (сока) в тканях флоэмы и ксилемы стебля растений и корневой системы при выращивании в условиях гидропоники. Особое внимание уделяли методике измерений ЭИС и мобильными ЯМР [1] сенсорами, их новому применению для решения задач метабомики [2] с целью ранней диагностики стресса и патогенов растений. Отдельный интерес здесь представляет магнитная и гидродинамическая обработки воды [3] для ирригации, а также спонтанное формирование контактного слоя воды с повышенной адгезией, обнаруженное ранее [4]. Представлены результаты экспериментов по биологической детекции патогенов и поллютантов окружающей среды, в частности сверхнизкой концентрации (10-15ppb) O<sub>3</sub>, путем измерения динамики жидкостной среды в стебле растений *Nicotiana tabacum* и *Solanum lycopersicum*. Лабораторные и полевые испытания показали высокую устойчивость подобных биосенсоров в естественных и городских экосистемах. Основным применением полученных результатов являются научно-обоснованные технологии высокой продуктивности в точном сельском хозяйстве, в перспективных вертикальных гидропонных фермах. Более чем 200-кратное превышение урожайности над традиционным выращиванием и использование различных грунтовых субстратов ставит этот подход в ряд высокоперспективных технологий для использования в пилотируемых космических комплексах в виде автономных искусственных агроэкосистем, особенно в условиях длительных миссий к другим планетам и иных космических приложениях [5].

## Литература:

- [1] Windt Carel W., Nabel Moritz, Kochs Johannes, Jahnke Siegfried, Schurr Ulrich, A Mobile NMR Sensor and Relaxometric Method to Non-destructively Monitor Water and Dry Matter Content in Plants, *Frontiers in Plant Science*, 12, 2021, DOI:10.3389/fpls.2021.617768
- [2] Nagana Gowda GA, Raftery D. NMR-Based Metabolomics. *Adv Exp Med Biol*. 2021, 1280:19-37. DOI:10.1007/978-3-030-51652-9\_2.
- [3] Kernbach, Serge & Pershin, Sergey, 2023, Dynamics of capillary effects in spin conversion of water isomers. DOI:10.21203/rs.3.rs-2578255/v1.
- [4] С. Першин, Е. Степанов, Д. Артёмова, Экспериментальное исследование вариаций адгезии молекул воды в поверхностном слое, Сборник тезисов докладов, VI Всероссийская конференция «Физика водных растворов», с.86, 13-15 ноября 2023, Москва, ООО "МЕКОЛ", 2023 © Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН. DOI: 10.24412/cl-35040-2023-86-86
- [5] Clauw, H.; Van de Put, H.; Sghaier, A.; Kerkaert, T.; Debonne, E.; Eeckhout, M.; Steppe, K. The Impact of a Six-Hour Light–Dark Cycle on Wheat Ear Emergence, Grain Yield, and Flour Quality in Future Plant-Growing Systems. *Foods* **2024**, 13, 750. DOI:10.3390/foods13050750



## Приглашенный доклад

**ФРАКЦИОНИРОВАНИЕ ВОДЫ  
В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ****Артёмова Д.Г.,<sup>1</sup> Першин С.М.,<sup>1</sup> Степанов Е.В.,<sup>1,2</sup> Кацнельсон Б.Г.<sup>3</sup>**<sup>1</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, ул. Вавилова, 38<sup>2</sup> Российский университет дружбы народов, Москва, ул. Орджоникидзе, 2<sup>3</sup> Университет г. Хайфа, Израиль

e-mail: pershin@kapella.gpi.ru

Кавитационная обработка воды сопровождается обогащением орто-Н<sub>2</sub>O спиновыми изомерами на 12-15% по данным 4-фотонной спектроскопии [1] и МРТ [2], а также увеличением высоты подъёма мениска в капилляре [3]. Важно лечебное свойство такой воды: быстро растворяет почечные камни оксалата кальция [4]. Известно, что вода фракционируется и выталкивает наносферы суспензии от поверхности на десятки микрон [5], а также продлевает фазу молодости и продолжительность жизни мышей [6]. Контактный (гидратный) слой воды с макромолекулами или наночастицами SiO<sub>2</sub> проявляет структуру льда на спектрах КР и ВРМБ в водных суспензиях SiO<sub>2</sub> [7]. Оставалось неясным как фракционирование воды в контакте с воздухом влияет на коэффициент адгезии и на высоту подъёма мениска в капилляре. Для изучения адгезии поверхностного слоя воды мы использовали тонкие стеклянные капилляры с внутренним диаметром 300 мкм. Капилляры длиной 100 мм поставляли партией из 1000 шт с после разлома капилляра. Скол неровных торцов капилляров под 900 снизил разброс высоты подъёма мениска до ~0.1 мм. После сортировки капилляров по группам с одинаковой высотой подъёма мениска из-за естественного разброса внутреннего диаметра мы проводили измерения одновременно на 2-4 капиллярах, установленных с интервалом 5-8 мм с погружением или касанием поверхности у стенок кюветы и отдалённо от них. Обнаружено устойчивое увеличение высоты мениска дистиллированной воды при касании поверхности (51-53 мм), тогда как высота мениска с глубины 5-10 мм составляла (44-46 мм). Касание поверхности около плёнки нафiona [5] увеличивает высоту мениска на 2-3 мм. Обсуждается механизм обнаруженного фракционирования воды на две составляющие, которые «теряют» устойчивое отличие при перемешивании и требуют время (~4 часов) для восстановления.

*Данные исследования проводились в рамках проекта РНФ 23-42-10019***Литература:**

1. S.M. Pershin, A.F. Bunkin, Temperature Evolution of the Relative Concentration of the H<sub>2</sub>O ortho/para Spin Isomers in Water Studied by Four-Photon Laser Spectroscopy, *Laser Phys.* **19**(7), 1410-1414, (2009)
2. S.M. Pershin, A.F. Bunkin, N.V. Anisimov, and Yu.A. Pirogov, Water Enrichment by H<sub>2</sub>O ortho-Isomer: Four-Photon and NMR Spectroscopy, *Laser Phys.*, **19**(3), pp. 410–413 (2009)
3. S. Kernbach, S.Pershin, Dynamics of capillary effects in spin conversion of water isomers, arXiv:2302.03753v1 (28 Dec 2022)
4. N.V. Gvozdev, E.V. Petrova, T.G. Chernovich, O.A. Shustin, L.N. Rashkovich, Atomic-force microscopy of growth and dissolution of calcium oxalate monohydrate (COM) Crystals, *Journal of Crystal Growth*, 261, 539–548 (2004).
5. J. Zheng and Gerald H. Pollack, *Phys. Rev. E* **68**, 031408, (2003)
6. С.Е. Постнов и др. Труды 6-й конференции «Физика водных растворов», с.101, Москва, 13-15 ноября 2023; <https://awoda.info/>
7. С. Першин, А.Бункин, М.Давыдов, А.Фёдоров, М. Гришин, Структура льда гидратных слоёв макромолекул и наночастиц, данная конференция.

Приглашенный доклад

# ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ВОДНЫХ РАЗБАВЛЕННЫХ СИСТЕМ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ – КЛЮЧ К СОЗДАНИЮ НОВЫХ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ И ПРИРОДОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Рыжкина И.С.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ  
Казанский научный центр РАН, Россия, 420088, Казань, ул. Акад. Арбузова, 8.  
e-mail: irina.s.ryzhkina@mail.ru*

Рассмотрены результаты исследований, в которых на основе изучения комплексом экспериментальных методов установлены и описаны ключевые физико-химические закономерности водных систем биологически активных веществ (БАВ) низких расчетных концентраций, полученных методом десятичных разбавлений и выдержанных в условиях естественного и пониженного уровней внешних физических полей [1-10]. С помощью разработанного алгоритма выявлена взаимосвязь немонотонных концентрационных зависимостей размера, дзета-потенциала наноассоциатов, интенсивности флуоресценции, УФ-поглощения, физико-химических характеристик и найденных с использованием экотоксикологических тестов биологических свойств разбавленных систем практически важных БАВ (пестицидов, регуляторов роста и развития растений, лекарственных препаратов). Согласованность немонотонного изменения параметров наноассоциатов, физико-химических и биологических свойств систем в интервале низких концентраций обеспечивает прогноз биоэффектов разбавленных БАВ на основе их физико-химического скрининга. Разработанный подход, обладающий интерпретационными и прогностическими возможностями, и установленные закономерности обосновывают немонотонные вариации свойств водных растворов БАВ и влияние гипомангнитных условий на функционирование организмов. Выявленные закономерности закладывает основу новых технологий в сельском хозяйстве, охране экосистем и других областях жизнедеятельности человека.

## Литература:

- [1] A. I. Konovalov, I. S. Ryzhkina, Formation of nanoassociates as a key to understanding of physicochemical and biological properties of highly dilute aqueous solutions. Russ. Chem. Bull., 63(1), 1-14, (2014). <https://doi.org/10.1007/s11172-014-0388-y>.
- [2] A. Konovalov, I. Ryzhkina, E. Maltzeva., L. Murtazina, Yu. Kiseleva., V. Kasparov, N. Palmina, Nanoassociate formation in highly diluted water solutions of potassium phenosan with and without permalloy shielding. Electromagn. Biol. Med., 34, 2, 141-146, (2015).
- [3] I. S. Ryzhkina, L. I. Murtazina, S. Yu. Sergeeva, L. A. Kostina, D. A. Sharapova, M. D. Shevelev and A. I. Konovalov, Fluorescence characteristics of aqueous dispersed systems of succinic acid as potential markers of their self-organization and bioeffects in low concentration range, Environmental Technology & Innovation, 101215, (2021). <https://doi.org/10.1016/j.eti.2020.101215>.
- [4] I. S. Ryzhkina, L. I. Murtazina, L. A. Kostina, D. A. Sharapova, M. D. Shevelev, E. R. Zainulgabidinov, A. M. Petrov, A. I. Konovalov, Interrelation of physicochemical, spectral, and biological properties of self-organized multi-component aqueous systems based on N-(phosphonomethyl)glycine in the low concentration range, Russ. Chem. Bull., 70, 81-90, (2021). <https://doi.org/10.1007/s11172-021-3060-3>
- [5] I. S. Ryzhkina, L. I. Murtazina, L. A. Kostina, I. S. Dokuchaeva, T. V. Kuznetsova, A. M. Petrov and A. I. Konovalov, Physicochemical and biological properties of aqueous herbicide compositions based on N-(phosphonomethyl)glycine and succinic acid in a range of low concentrations, Russ. Chem. Bull., 70, 8, 1499-1508, (2021). <https://doi.org/10.1007/s11172-021-3245-9>
- [6] I.S. Ryzhkina, S.Yu. Sergeeva, L.I. Murtazina, L.R. Akhmetzyanova, T.V. Kuznetsova, I.V. Knyazev, A.M. Petrov, I.S. Dokuchaeva, A.I. Konovalov, Features of self-organization and biological properties of solutions of citric and succinic acids in low concentrations, Russ. Chem. Bull., 68, 334-340, (2019). <https://doi.org/10.1007/s11172-019-2389-3>
- [7] I. Ryzhkina, L. Murtazina, L. Kostina, I. Dokuchaeva, S. Sergeeva, K. Meleshenko, M. Shevelev, A. Petrov, Doxorubicin aqueous systems at low concentrations: Interconnection between self-organization, fluorescent and physicochemical properties, and action on hydrobionts, Front. in Chem., 10, 1063278 (2022). DOI:10.3389/fchem.2022.1063278
- [8] I.S. Ryzhkina, L.I. Murtazina, L.A. Kostina, D.A. Sharapova, I.S. Dokuchaeva, S.Yu. Sergeeva, K.A. Meleshenko, A.M. Petrov, L-Tryptophan Aqueous Systems at Low Concentrations: Interconnection between Self-Organization, Fluorescent and Physicochemical Properties, and Action on Hydrobionts, Nanomaterials, 12, 1792-1806 (2022). <https://doi.org/10.3390/nano12111792>
- [9] I. Ryzhkina, L. Murtazina, Kh. Gainutdinov, A. Konovalov. Diluted Aqueous Dispersed Systems of 4-Aminopyridine: the Relationship of Self-organization, Physicochemical Properties and Influence on the Electrical Characteristics of Neurons, Front. in Chem. 9, 623860 (2021). <https://doi.org/10.3389/fchem.2021.623860>
- [10] I. Ryzhkina, Yu. Kiseleva, L. Murtazina, T. Kuznetsova, E. Zainulgabidinov, I. Knyazev, A. Petrov, S. Kondakov, A. Konovalov. Diclofenac Aqueous Systems at Low Concentrations: Interconnection between Physicochemical Properties and Action on Hydrobionts, J. of Environmental Sciences, 88, 177-186 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jes.2019.08.013>

Приглашенный доклад

# УВЕЛИЧЕНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОГО СОДЕРЖАНИЯ МОЛЕКУЛ ОРТО-Н<sub>2</sub>О В ПАРАХ НАД КИПЯЩЕЙ ВОДОЙ

**Степанов Е.В.,<sup>1,2</sup> Першин С.М.<sup>1</sup>**<sup>1</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва*<sup>2</sup> *Российский университет дружбы народов, Москва**e-mail: EugeneStepanov@yandex.ru*

Впервые, насколько нам известно, обнаружена спиновая селективность процессов, происходящих в парах над поверхностью кипящей воды, приводящая к значительному увеличению в парах доли молекул орто-Н<sub>2</sub>О. Нами наблюдалось возрастание относительного содержания орто/пара-изомеров воды от определяемого квантовой статистикой равновесного значения 3:1 до 5:1. Для анализа содержания спиновых изомеров молекулы Н<sub>2</sub>О в парах над поверхностью воды был использован перестраиваемый диодный лазер. Спектральный анализ содержания, орто- и пара-Н<sub>2</sub>О проводился с использованием линий поглощения этих молекул, принадлежащих колебательно-вращательной полосе 101-000 и имеющих частоты центров 7355,557 см<sup>-1</sup> и 7354,599 см<sup>-1</sup>, соответственно. При нагревании воды от комнатной температуры (20С) до второй фазы кипения (~80С) наблюдалось отношение содержания орто- и пара-изомеров ~3:1, характерное для нормальных условий. Во время второй и третьей фаз кипения (80-90С) орто/пара отношение увеличилось до 5:1. Возможный механизм увеличения доли орто-Н<sub>2</sub>О в парах, образуемых при кипении, может быть связан с обеднением равновесной смеси изомером пара-Н<sub>2</sub>О за счет его более высокой активности в конденсации и образовании микрокапель, димеров и тримеров воды.

Устный доклад

# MICROWAVE DIELECTRIC RELAXATION OF UNIVALENT AND BIVALENT ELECTROLYTE SOLUTIONS

[Galindo C.](#), Feldman Yu.

*The Hebrew University of Jerusalem, Institute of Applied Physics,  
Edmond J. Safra Campus, Jerusalem 91904, Israel*

The microwave dielectric relaxation of aqueous solutions of univalent (KCl, NaCl, NaI) and bivalent ( $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$ ) electrolytes at concentrations between 0.1 and 1 M at 25 °C was investigated using a vector network analyzer ( $0.5 \leq \nu \leq 40$  GHz). The spectra of these electrolyte systems are characterized by a symmetrical broadening of the main relaxation peak and were fitted using the Cole–Cole equation. In our analysis, we provide insights into the underlying physics of the relaxation events at microscopic and mesoscopic scales by using a 3D phase space trajectory that is based on the interactions of the relaxing dipole units with their surroundings and Frohlich's B function. The effect of the solutes on the H-bond network of water with increasing concentration is evident in the microwave dielectric spectra through decreasing dielectric strengths and relaxation times. It was found that the number of perturbed water molecules is higher in the case of bivalent electrolytes and appears to be proportional to the ionic radius. In our approach, the particular dependence between the broadening parameter  $\alpha$  and the relaxation times  $\tau$  reflects the rate of interactions between the elementary dipole units and their surroundings. We provide a quantitative analysis of the level of perturbation caused by the presence of ions in the hydrogen-bond network of water. It was found that the H-bonded network of water is highly perturbed in univalent systems compared to bivalent systems due to weaker bonded hydration shells. Finally, we found significant differences between the dielectric response of NaCl and NaI. The differences, originating in the counterions  $\text{Cl}^-$  and  $\text{I}^-$ , which are characterized by large ionic radii and consequently weaker electric fields in their vicinity, confirm that the effect of weakly hydrated ions should not be neglected in microwave dielectric spectra analysis.

## Устный доклад

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВНУТРИ И МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОЛЕБАНИЙ В МАЛЫХ КЛАСТЕРАХ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

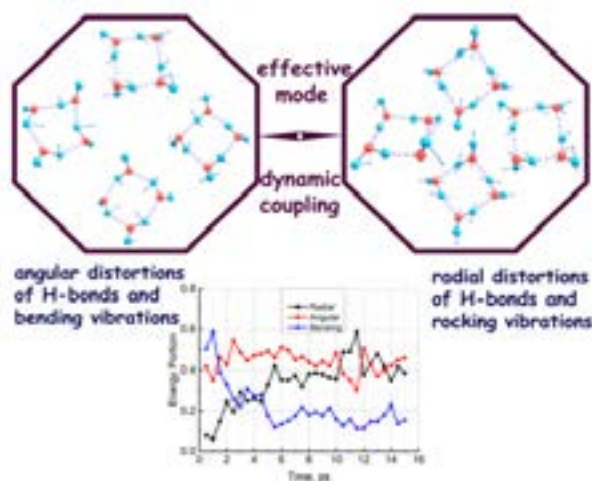
**Белега Е.Д., Новаковская Ю.В.**

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет  
e-mail: EDBelega@gmail.com, jvn@phys.chem.msu.ru

Кластеры молекул воды остаются объектами интенсивных исследований в связи с попытками найти ключи к необычным свойствам воды в жидком и твердом состояниях. Несмотря на то, что изолированные кластеры воды не могут рассматриваться как модели для долговременной динамики в жидкой воде, они являются удобными объектами для анализа динамики сеток водородных связей на коротких временных интервалах [1]. В данном докладе будут представлены результаты моделирования коллективной динамики малых кластеров молекул воды (от тримера до пентамера). Целью работы было исследование путей релаксации энергии с начально возбужденных конкретных типов движения в кластере. При этом энергия начального возбуждения кластера варьировалась в пределах от 1.2 до 4.6 ккал/моль в расчете на молекулу. Траектории движения длительностью до 100 пс были построены в рамках неэмпирической молекулярной динамики в приближении Борна-Оппенгеймера с шагом 0.3–0.5 фс. Силы, действующие на ядра были рассчитаны на основании решения электронной задачи методом MP2 (второй порядок теории возмущений Меллера-Плессета) с расширенным двухэкспонентным базисом. Для анализа спектральных характеристик динамики был применен метод эффективных мод. Этот метод является модификацией метода главных компонент и позволяет выделять и описывать коллективные движения в атомных и молекулярных системах с сильной ангармоничностью потенциала взаимодействия [2]. Спектральный состав ведущих эффективных мод был определен с помощью Фурье-преобразования, а энергия, сосредоточенная на модах определенного типа, – интегрированием по соответствующим спектральным диапазонам.

В докладе будут представлены следующие результаты:

1. Основные каналы релаксации начальной энергии возбуждения кластера.
2. Перераспределение начальной энергии возбуждения кластера по эффективным модам в зависимости от длительности динамической эволюции.
3. Активация низкочастотных движений молекул, а именно либрационных и межмолекулярных колебаний, при начальном возбуждении деформационных колебаний.
4. Оценки времен перераспределения энергии возбуждения кластера между колебаниями в разных спектральных интервалах (20–350, 400–1000 и 1200–1700  $\text{cm}^{-1}$ ).



## Литература:

- [1] Frank N. Keutsch and Richard J. Saykally, Water clusters: Untangling the mysteries of the liquid, one molecule at a time, PNAS, vol. 98, 10533–10540, (2001).
- [2] E. D. Belega, M. N. Zakirov, A. I. Chulichkov, D. N. Trubnikov, and Yu. V. Novakovskaya. Effective-mode analysis of the dynamics of weakly bound molecular systems by an example of hydrogen-bonded water clusters. Phys. Rev. A 107, 032812 (2023).



Устный доклад

# РЕОЛОГИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ В ПРИСУТСТВИИ МЕМБРАНЫ НАФИОН

Задорожный Е.Н.,<sup>1,2</sup> Тимченко С.Л.,<sup>1</sup> Новаковская Ю.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская, 5 стр.1, 10505 Москва, Россия;

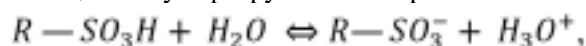
<sup>2</sup> Центр Прикладной физики, 2-я Бауманская, 5 стр.1, 10505 Москва, Россия;

<sup>3</sup> МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1/3, Москва, 119991 Россия

e-mail: [eugenezador@gmail.com](mailto:eugenezador@gmail.com) (E.N.Z.), [svtimchenko@yandex.ru](mailto:svtimchenko@yandex.ru) (S.L.T.),

[jvnovakovskaya@gmail.com](mailto:jvnovakovskaya@gmail.com) (Yu.V.N.)

Экспериментально исследовано влияние протонообменной полимерной мембраны Нафион на коэффициент поверхностного натяжения (КПН) водных растворов, двух форм метиленового синего (МС) и аскорбиновой кислоты (АСК), приготовленных на деионизованной воде. Свойства мембраны Нафион при ее взаимодействии с водными растворами подробно исследованы в работах [1-3]. Главная перфторуглеродная цепь мембраны является гидрофобной частью полимера. Боковые цепи с сульфогруппами обладают гидрофильными свойствами и способны адсорбировать молекулы воды. Внутри мембраны, при ее вымачивании в воде формируется структура типа цилиндрических мицелл с заполненными водой каналами с размером (2...3) нм [1,2]. На поверхности этих каналов происходит диссоциация концевых сульфогрупп полимера по схеме:



и внутренняя поверхность становится отрицательно заряженной. Внутри каналов эффективно втягиваются катионы [1,2], что используется для пространственного разделения ионов  $H^+$  и  $OH^-$  в установках по водородной энергетике. С одной стороны, протонная проводимость полимера зависит от концентрации воды в нем, и проводимость полимера растет с увеличением количества воды внутри мембраны [1]. С другой стороны, морфология и ионообменные свойства мембраны Нафион позволяют использовать ее в качестве матрицы для создания композиционных структур за счет внедрения в нее различных химических элементов [4], для выращивания кристаллов [5].

Экспериментально установлено, что значение КПН деионизованной воды, окисленной ( $Mc^+$ , раствор голубого цвета) и восстановленной форм МС ( $McH^0$ , бесцветный раствор) резко уменьшается на начальном этапе вымачивания мембраны в данных растворах. По сравнению с деионизованной водой, растворы МС, образовавшиеся в процессе диффузии их компонентов в мембрану, имеют меньший КПН: на 20% для  $Mc^+$  и на 24% для  $McH^0$ . Для раствора АСК (5 г/л) происходит увеличение значения КПН на 15 %.

Наличие узкого временного интервала для процесса существенного изменения значения КПН растворов связано с активными диффузионными переносами ионов в приповерхностной к мембране области и с реорганизацией сетки водородных связей воды. Модельные неэмпирические квантовохимические расчеты подтверждают влияние частичного раскручивания боковых цепей полимера, координирования ими содержащихся в растворе ионов, а также объемного соотношения гидрофильных и гидрофобных фрагментов в молекулярной структуре на реологию водных растворов вблизи поверхности мембраны [5]. При контакте мембраны с достаточным количеством молекул воды энергетически выгодным оказывается раскручивание, в пределах 15 Å, боковых цепочек Нафiona, которые заканчиваются сульфогруппами  $-SO_3H$ , а также диссоциации этих групп с формированием ионов гидроксония и структурных анионных остатков  $-SO_3^-$ , причем ионные пары  $SO_3^- \dots H_3O^+$  способны координировать как протонодонорные, так и протоноакцепторные частицы.

## Литература:

- [1] Mauritz, K.A.; Moore, R.B. State of understanding of Nafion. Chem. Rev. 2004, 104, 4535–4585. DOI: 10.1021/cr0207123.
- [2] Binghua Chai, Hyok Yoo, and Gerald H. Pollack Effect of Radiant Energy on Near-Surface Water//J. Phys. Chem. B 2009, No. 42, 113, 13953–13958. DOI.org/10.1021/jp908163w.
- [3] Ninham, B.W.; Battye, M.J.; Bolotskova, P.N.; Gerasimov, R.Yu.; Kozlov, V.A.; Bunkin, N.F. Nafion: New and Old Insights into Structure and Function. Polymers 2023, 15, 2214. <https://doi.org/10.3390/polym15092214>
- [4] Nikolai F. Bunkin; Polina N. Bolotskova; Yana V. Gladysheva; Valeriy A. Kozlov; Svetlana L. Timchenko. Adsorption of Methylene Blue on the Surface of Polymer Membrane; Dependence on the Isotopic Composition of Liquid Matrix//Polymers 2022, Volume 14, Issue 19, 4007/ <https://doi.org/10.3390/polym14194007>
- [5] Nikolai F. Bunkin 1, Polina N. Bolotskova, Sergey V. Gudkov, Minh T. Khuong, Valeriy A. Kozlov, Svetlana L. Timchenko, Valeriy V. Voronov and Yulia V. Novakovskaya. Nafion: A Flexible Template for Selective Structuring//Polymers 2024, 16, 744. <https://doi.org/10.3390/polym16060744>.

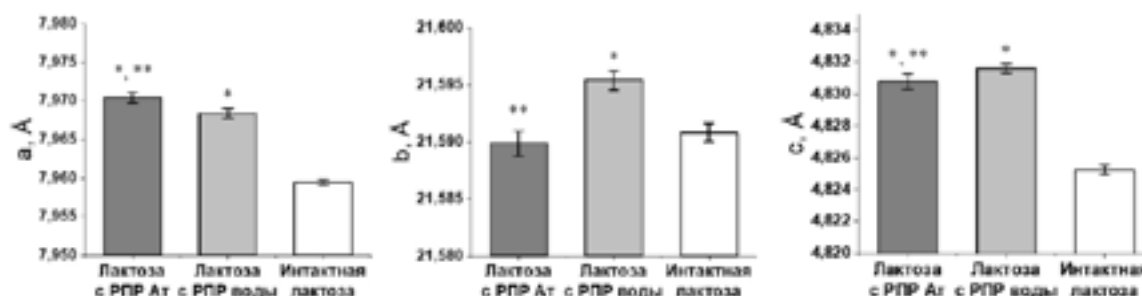
## Устный доклад

# ВЛИЯНИЕ ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПО ТЕХНОЛОГИИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ РАЗВЕДЕНИЙ, НА ЛАКТОЗУ

Константинов Р.Р., Родионова Н.Н., Петрова А.О., Химич Е.О., Тарасов С.А.

ООО «НПФ «Материа Медика Холдинг»  
e-mail: konstantinovrr@materiamedica.ru

Нами были получены данные о влиянии растворов, полученных по технологии последовательных разведений (РПР) антител, включающую вибрационное воздействие при каждом разведении, на структурные свойства лактозы [1]. Изменения были обнаружены на всех уровнях строения: размеры гранул лактозы после насыщения уменьшались (отличия до 51%, согласно ситовому анализу), размеры кристаллитов лактозы также изменялись (полуширина пиков рентгеноструктурного анализа отличалась до 13%), менялись размеры кристаллической решетки (Рисунок), Рамановские спектры рассеяния образцов лактозы отличались в диапазонах торсионных колебаний лактозы (увеличение интенсивности до 33% около  $761\text{см}^{-1}$  и до 16% около  $783\text{см}^{-1}$ ). Эти результаты позволяют утверждать, что насыщение растворами, полученными по технологии последовательных разведений, необратимо меняет кристаллы лактозы.



**Рисунок.** Параметры кристаллической решетки (a, b, c) лактозы различных образцов, определенные методом РСА. \* – отличие от интактной лактозы ( $p < 0.05$ ), \*\* – отличие от лактозы, насыщенной РПР воды ( $p < 0.05$ ).

Возможным механизмом, который бы объяснял подобное изменение свойств лактозы, является влияние нанопузырьков и иных флотирующих супрамолекулярных систем, возникающих при интенсивных вибрационных воздействиях, являющихся неотъемлемой составляющей РПР. Приповерхностные слои жидкости вокруг нанопузырьков с возможными флотирующими частицами могут являться как зонами неравномерного растворения и рекристаллизации лактозы. Различия в форме и строении данных супрамолекулярных систем, возникающие из-за различных изначальных субстанций, могут приводить к их специфическим воздействиям. Однозначно можно утверждать, что показанное в нашей работе влияние растворов на кристаллическую структуру лактозы позволяет связать необычные свойства растворов после вибрационных воздействий [2] и биологическую активность препаратов, полученных из РПР, подтвержденную в клинических исследованиях [3].

## Литература:

- [1] R.R. Konstantinov, et al. Changes of unit cell parameters in lactose saturated by substances technologically processed by dilution. Current Nanotechnology. 2025; 21(1). In Press.
- [2] Don E.S., Stepanov G.O., Tarasov S.A. The effects of physical treatment on physicochemical and biological properties of water and aqueous solutions. Fine Chemical Technologies. 2023;18(5):426-445. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2023-18-5-426-445>
- [3] Parfenov VA, Bogolepova AN, Mkhitarian EA. Meta-analysis of randomized controlled trials of the effectiveness of Prospekta in the treatment of vascular cognitive impairment of varying severity. S.S. Korsakov Journal of Neurology and Psychiatry. 2024;124(6):62-69. (In Russ.) <https://doi.org/10.17116/jnevro202412406162>

Устный доклад

# СОЛЬВОФОБНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ВОДНЫХ И НЕВОДНЫХ РАСТВОРАХ ТЕТРАМЕТИЛМОЧЕВИНЫ

**Кустов А.В., Иванов Е.В., Батов Д.В.**

*ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН,  
153045 Иваново, ул. Академическая, д. 1  
e-mail: kustov26@yandex.ru*

Проблема понимания и количественного описания сольвофобных или, в частном случае водных растворов, гидрофобных эффектов затрагивает важнейшие области естествознания, включающие физическую и коллоидную химию, молекулярную биологию, биофизику и т.д. Считается, что формирование газовых гидратов, агрегация амфифилов, конформации макромолекул, образование мицелл и двухслойных мембран в значительной степени контролируются эффектами гидрофобной гидратации и связанного с ней гидрофобного взаимодействия [1, 2]. Ряд теоретических и экспериментальных исследований указывают на наличие сольвофобных эффектов (СЭ) в растворителях с сетками Н-связей, однако не может однозначно ответить на вопрос об идентичности наблюдаемых явлений имеющим энтропийную природу эффектам гидрофобной гидратации и гидрофобного взаимодействия в воде. В работе методами калориметрии, изотермического насыщения, денситометрии, динамического рассеяния света и молекулярной динамики проведены обширные термодинамические и структурные исследования сольватации и взаимодействия растворов гидрофильной мочевины (Мч) и преимущественно гидрофобной тетраметилмочевины (ТММч) в воде, этиленгликоле (Эг) и формамиде (ФА) в широком температурном интервале. Экспериментально показано, что сольвофобное взаимодействие между молекулами ТММч усиливается с ростом температуры и убывает в ряду вода > ФА >> Эг. Во всех трех растворителях в области малых добавок ТММч по данным динамического рассеяния света наблюдается образование наноразмерных кластеров, размер которых значительно увеличивается с ростом концентрации неэлектролита, что находится в согласии с данными компьютерного моделирования водных растворов ТММч.

**Литература:**

- [1] D. Chandler. Interfaces and the driving force of hydrophobic assembly. *Nature*, 437, 640–647 (2005).
- [2] А.В. Кустов. Гидрофобные эффекты - структурные, термодинамические и прикладные аспекты. Достижения последних лет. М: Красанд. 2013. 224 с.
- [3] R. Gupta, G.N. Patey. Structure and aggregation in model tetramethylurea solutions. *J. Chem. Phys.*, 141: 064502 (2014)

Устный доклад

# ДИНАМИКА ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ВОДЫ ПРИ ДЛИТЕЛЬНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ГИПОГЕОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

**Мойса С.С., Маркина И.С.***ИМБП РАН, Россия, Москва,  
e-mail: butalana07@list.ru*

На модельной системе – воде высокой очистки исследовали влияние длительного воздействия гипогеомагнитного поля на ее окислительно-восстановительные свойства: окислительно-восстановительный потенциал, водородный показатель и электрические токи. Пробы воды (40 мл) в стеклянных бюксах с притертой крышечкой помещали на 50 сут в гипогеомагнитную камеру (опыт) - открытую с одной стороны цилиндрическую трубу диаметром 10 см и длиной 50 см, стенки и дно которой покрыты изнутри изолирующим магнитное поле пермаллоем. В центральных областях камеры геомагнитное поле было понижено в 40 раз ( $\sim 1$  мкТл). Аналогично опытным исследованиям в такую же трубу без пермаллоя - камеру с геомагнитным полем (контроль) в центральную область помещали пробы воды. Измерение величин изучаемых параметров производили с помощью иономера И160МИ со специальными измерительными электродами один раз в неделю в одно и то же время. Одновременно с этим в пробах воды производилась круглосуточная регистрация электрических токов. По истечении 50 сут пробы воды из гипогеомагнитного поля помещали в геомагнитное поле и исследовали свойства воды еще 30 суток (восстановительный период). Показано повышение величины ОВП на 30 мВ, снижение рН на 0,3 и амплитуды токов на 5 мкА под влиянием гипогеомагнитного поля. В период магнитных бурь во всех пробах воды наблюдалось повышение величин ОВП и рН и снижение амплитуды токов в пробах воды в гипогеомагнитном поле. Магнитные бури ослабляли воздействие гипогеомагнитного поля на воду. В восстановительном периоде сохранялась возникшая в гипогеомагнитном поле разница величин изучаемых параметров, снижалась электропроводность и восприимчивость воды к вариациям внешней среды. Измененные свойства воды способны длительно сохраняться в геомагнитном поле. Полученные результаты позволяют прогнозировать реакции живых систем.

Устный доклад

# СТРУКТУРА ЛЬДА ГИДРАТНЫХ СЛОЁВ МАКРОМОЛЕКУЛ И НАНОЧАСТИЦ

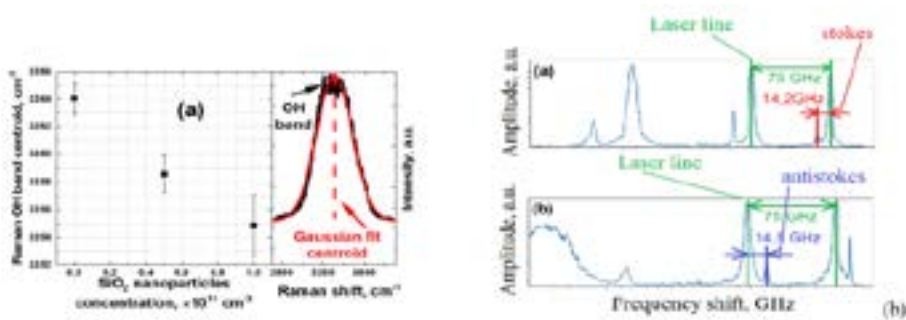
**Першин С.М.,\* Бункин А.Ф.\*\* Давыдов М.А., Фёдоров А.Н., Гришин М.Я.**

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

*e-mail: pershin@kapella.gpi.ru*

Известно [1], гидратные слои антифризных белков имеют структуру гексагонального льда, что позволяет провести зимнюю спячку без укрытия от мороза. Отметим [2], что в спектрах ОН полосы комбинационного рассеяния (КР) в кристаллах белков лизоцима и тауматина доминирует характеристическая частота  $3200\text{ см}^{-1}$  гексагонального льда Ih тем выше, чем совершеннее структура кристалла. Напротив, вклад этой компонента,  $3200\text{ см}^{-1}$ , в низкочастотном крыле ОН полосы КР спектров водных растворов многоатомных спиртов [3] уменьшается с повышением температуры вплоть до исчезновения при  $60^\circ\text{C}$ . При этом R. Shen установил [4], что параметр порядка воды контактом слое вода-воздух выше, чем в квазиджидком слое на поверхности монокристалла льда. Позднее этот вывод подтвердился измерением структуры льда в тонком слое воды при комнатной температуре [5]. Отсюда следует ожидать, что контактный слой гидратной оболочки наночастиц может иметь структуру льда Ih. Это требует экспериментального обоснования, что является предметом настоящей работы.

Впервые, насколько нам известно, обнаружен сдвиг гравитационного центра ОН-полосы комбинационного рассеяния в водной суспензии наночастиц  $\text{SiO}_2$  (диаметром  $350\text{ нм}$ ) до  $10\text{ см}^{-1}$  в сторону характерной частоты льда  $3200\text{ см}^{-1}$  низкочастотного крыла при увеличении концентрации наночастиц до  $4 \times 10^{11}\text{ см}^{-3}$ . Предположение о формировании льдоподобной структуры в гидратной оболочке наночастиц подтверждено регистрацией новой стоковой компоненты спектра вынужденного рассеяния Мандельштама-Бриллюэна в водной суспензии наночастиц  $\text{SiO}_2$  диаметром  $350$  и  $100\text{ нм}$  с концентрацией  $3 \times 10^8$  и  $2 \times 10^{11}\text{ см}^{-3}$ , соответственно, со сдвигом  $14.3\text{ ГГц}$ , как в обратном направлении, так и, впервые, вперёд. Установлено, что сдвиг  $14.3\text{ ГГц}$  соответствует скорости звука  $2900\text{ м/с}$  и заметно больше известного сдвига  $7.5\text{ ГГц}$  в воде комнатной температуры. Существенно, что измеренная скорость звука совпадает с ожидаемым значением во льдах при экстраполяции линейного снижения скорости звука с повышением его температуры.



**Рис.1.** (а) - сдвиг центра ОН полосы от концентрации  $\text{SiO}_2$  в сторону компоненты льда и (b) – спектр ВРМБ с линией  $\sim 14.3\text{ ГГц}$

*Данные исследования проводились в рамках проекта РНФ 23-42-10019*

## Литература:

- [1] Y.-Ch. Liou, A. Tocilj, P. L. Davies & Z. Jia, Mimicry of ice structure by surface hydroxyls and water of a b-helix antifreeze protein, *Nature*, V. 406, 20 JULY (2000)
- [2] A.B. Kudryavtsev, G. Christopher, C.D. Smith, S.M. Mirov, W.M. Rosenblum, L.J.DeLucas, The effect of ordering of internal water in thaumatin and lysozyme crystals as revealed by Raman method, *J. of Cryst. Growth*, 219, 102-114 (2000).
- [3] J.G. Davis, K.P. Gierszal, P.Wang & Dor Ben-Amotz, Water structural transformation at molecular hydrophobic interfaces, *Nature*, V.491, 582-585, (2012)
- [4] X.Wei, P.B. Miranda, and Y.R. Shen, Surface Vibrational Spectroscopic Study of Surface Melting of Ice, *Phys. Rev. Lett.*, V. 86 (19), 1554-1558 (2001)
- [5] K.B. Jinesh and J.W.M. Frenken, Experimental Evidence for Ice Formation at Room Temperature, *Phys. Rev. Lett.*, 101, 036101(4) (2008)



Устный доклад

# КВАНТОВЫЕ ОТЛИЧИЯ ОРТО-ПАРА-Н<sub>2</sub>O И ФОТОМОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭФФЕКТ ИСПАРЕНИЯ

Першин С.М.

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

e-mail: pershin@kapella.gpi.ru

Недавно [1] открыто новое явление в физике воды: «фотомолекулярный эффект» – увеличение скорости испарения открытой поверхности воды *без её термического нагрева* при непрерывном освещении светодиодом в видимом диапазоне (максимум в зелёном диапазоне). Получено 3-4 кратное превышение скорости теоретического предела испарения: 1.45 kg/(m<sup>2</sup>h) при постоянной Солнца:  $q = 1 \text{ kW/m}^2$ . Авторы использовали 14 разных методов проверки явления и получили подтверждение. Несмотря на тщательность измерений, механизм явления остаётся пока неясным. Авторы оперировали с мономерами Н<sub>2</sub>O без учёта их спиновых отличий, а также новых свойств поверхности, которые мы взяли за основу в нашем поиске механизма из первых принципов повышения скорости испарения без увеличения энергии.

Мы обнаружили [2], что вода содержит орто- (имеет магнитный момент и всегда вращается) и пара- (не магнит и часть молекул не вращается) изомеры Н<sub>2</sub>O. Более того, вода - неравновесная жидкость (по спиновой температуре) с отношением орто/пара=1:1 [2], что соответствует температуре ~30 К (т.е. глубокому «переохлаждению»), поэтому вода стремится к равновесному отношению (о/п=3:1) при любых воздействиях неё с конверсией пара-орто (поворотом спина протона). Известно [3], что закон сохранения спина запрещает поворот спина протона в Н<sub>2</sub>O, но катализатор (ионы, молекулы триплетного О<sub>2</sub> с неоднородным магнитным полем) снимает запрет, особенно в смешанных квантовых состояниях близко расположенных уровней обоих изомеров. В воде всегда есть катализатор: растворённый триплетный кислород с магнитным полем спинов двух электронов на разных орбитах, который обеспечивает конверсию изомеров Н<sub>2</sub>O в воде.

Спин-конверсия без затрат энергии [3], квантовые отличия спиновых изомеров Н<sub>2</sub>O и условия фотомолекулярного эффекта [1] дают новый механизм повышения скорости испарения воды без её нагрева с учётом новых свойств поверхности воды. Так (1) - у поверхности воды образуется слой льдоподобных структур [4-6] с орто и пара изомерами Н<sub>2</sub>O [7] и равновесным отношением 3:1; (2) - фотоны (длина волны 532 нм, ~18 797 см<sup>-1</sup>) обеспечивают условия резонансной накачки молекулы Н<sub>2</sub>O на высокий уровень (~18 796 см<sup>-1</sup>), который релаксирует по переходам составных колебаний  $\nu_1$ - $\nu_2$ - $\nu_3$  с разным числом фотонов ~ 0-8<sup>-2</sup>; (3) – некоторые из этих уровней одного изомера Н<sub>2</sub>O близко расположены к уровню другого изомера и образуют с ним смешанное квантовое состояние с конверсией спина в сторону равновесного отношения о/п=3:1 [7]; (4) – увеличение числа всегда вращающихся орто-Н<sub>2</sub>O в поверхностном слое льдоподобных структур увеличивает вероятность испарения без потребления дополнительной энергии.

*Данные исследования проводились при поддержке гранта РНФ 23-42-10019*

## Литература:

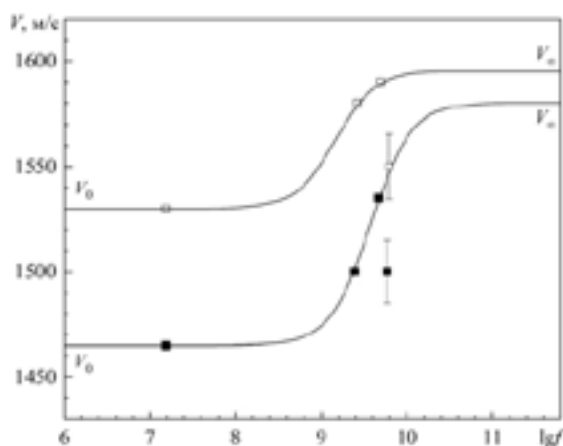
- [1] Y. Tu, J. Zhou, Sh. Lin, M. Alshrah, X. Zhao, and G. Chen, Plausible photomolecular effect leading to water evaporation exceeding the thermal limit, PNAS, 120(45) e2312751120 (2023). doi.org/10.1073/pnas.2312751120
- [2] Pershin S.M. and Bunkin A.F., "Temperature Evolution of the Relative Concentration of the H<sub>2</sub>O ortho/para Spin Isomers in Water Studied by Four-Photon Laser Spectroscopy, Laser Phys. 19(7), 1410-1414 (2009).
- [3] Xavier Michout Anne-Marie Vasserot, Luce Abouaf-Marguin, (2004) "Temperature and time effects on the rovibrational structure of fundamentals of H<sub>2</sub>O trapped in solid argon: hindered rotation and RTC satellite," Vibr. Spectros., 34, 83-93. Chen, G., Lv, G., Tu, Y., & Zhang, J. "Discovery of the photomolecular effect in hydrogels" (2023).
- [4] X.Wei, P.B. Miranda, and Y.R. Shen, Surface Vibrational Spectroscopic Study of Surface Melting of Ice, Phys. Rev. Lett., V. 86 (19), 1554-1558 (2001)
- [5] K.B. Jinesh et. al., Experimental Evidence for Ice Formation at Room Temperature, Phys. Rev. Lett., 101, 036101(4) (2008)
- [6] H. Yui, H. Fujiwar, T. Sawad, Spectroscopic analysis of total-internal-reflection stimulated Raman scattering from the air/water interface under the strong focusing condition, Chemical Physics Letters, 360, 53–58 (2002)
- [7] E. V. Stepanov, V. K. Konyukhov, and S. M. Pershin, Laser Analysis of the Evaporation Dynamics of Water Spin Isomers, J. Phys. of Wave Phenomena, 32(3), 81-88 (2024). DOI: 10.3103/S1541308X24700225
- [8] Я.Б. Зельдович, А. Л. Бучаченко, Е. Л. Франкевич, Магнитно-спиновые эффекты в химии и молекулярной физике, УФН, 155(1), 3-45 (1988)

Устный доклад

# ОБЪЕМНАЯ ВЯЗКОСТЬ И ОТРИЦАТЕЛЬНАЯ ДИСПЕРСИЯ СКОРОСТИ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЗВУКА В ОКРЕСТНОСТИ ОСОБОЙ ТОЧКИ СОСТОЯНИЯ ВОДНОГО РАСТВОРА 4-МЕТИЛПИРИДИНА

Бункин Н.Ф.,<sup>1</sup> [Сабилов Л.М.](#),<sup>2</sup> Семенов Д.И.<sup>2</sup><sup>1</sup> Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская ул., 5, 105005, Москва, Россия<sup>2</sup> Институт инженерной физики, Самаркандский государственный университет им. Ш. Рашидова, Университетский бульвар, 15, 140104, Самарканд, Узбекистан  
e-mail: [leonard.sabirov@gmail.com](mailto:leonard.sabirov@gmail.com)

Водные растворы метилпроизводных пиридина (пиколинов) с концентрацией 0.06–0.08 мольной доли (МД) при нормальном давлении воздуха и температуре  $t_0 \approx 70^\circ\text{C}$  имеют минимум термодинамической устойчивости (так называемую особую точку на фазовой диаграмме температура–концентрация) и поэтому удобны для изучения структурных превращений в окрестности особой точки. Продуктивным методом изучения структурных процессов в жидкостях и растворах является широкополосная акустическая спектроскопия, в частности дисперсия скорости звука.



сии в этом диапазоне температур далее не обсуждается.

Зависимость скорости звука  $V$  (м/с) от логарифма частоты  $f$  (Гц) в растворе 4МП-вода:

■ –  $t > 70^\circ\text{C}$ , □ –  $t < 45^\circ\text{C}$ .

кости) адекватно описывает зависимость  $V(f)$  в диапазоне частот от 15.4 МГц до 4.8 ГГц. При этом параметры релаксационного процесса различны в интервалах температур  $t < 45^\circ\text{C}$  и  $t > 70^\circ\text{C}$ . В интервале  $t < 45^\circ\text{C}$  объемная вязкость  $\eta = 22$  сП и время релаксации  $\tau = 10.8 \times 10^{-11}$  с, в интервале  $t > 70^\circ\text{C}$   $\eta = 14$  сП и  $\tau = 4.14 \times 10^{-11}$  с (соответствующие релаксационные кривые и экспериментальные данные показаны на рисунке). Различие значений  $\tau$  и  $\eta$  обусловлено, очевидно, различной локальной структурой раствора при температурах ниже и выше  $t_0$ . Особенности структурной организации компонентов раствора приводят к проявлению интересного физического явления – отрицательной дисперсии скорости звука на частоте 6.1 ГГц. Оценка масштаба пространственной неоднородности  $r$ , приводящей к отрицательной дисперсии, дает  $r \approx 10$  нм, и эта величина примерно одинакова при  $t < 45^\circ\text{C}$  и  $t > 70^\circ\text{C}$ .

В данной работе экспериментально исследована дисперсия скорости звука в растворе 4-метилпиридина (4МП) в воде с концентрацией 0.06 МД в диапазоне частот от 15.4 МГц до 6.1 ГГц. Скорость ультразвука измерялась акустооптическим методом, основанным на явлении дифракции лазерного излучения на ультразвуковых волнах. Гиперзвук изучался по спектрам рассеяния Мандельштама-Бриллюэна при углах 45, 90 и 135°, что соответствовало частотам  $\sim 2.6$ , 4.8 и 6.1 ГГц.

Основные результаты исследований: 1) в диапазоне частот от 15.4 МГц до 4.8 ГГц наблюдается положительная дисперсия ( $dV/df > 0$ ); 2) в узком диапазоне частот от 4.8 до 6.1 ГГц наблюдается отрицательная дисперсия ( $dV/df < 0$ ); 3) в диапазоне температур от 45 до 70 °C зависимость  $V(t)$  на частоте 2.6 ГГц имеет сложный характер и по этой причине характер диспер-

Совокупность экспериментальных данных при температурах  $t < 45^\circ\text{C}$  и  $t > 70^\circ\text{C}$  была проанализирована с точки зрения релаксационной теории. Оказалось, что простой вариант теории с одним временем релаксации  $\tau$  (релаксация объемной вяз-

## Устный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ЛЬДА С ПОМОЩЬЮ АННИГИЛЯЦИИ ПОЗИТРОНОВ

Будаева Л.И., Степанов И.С., Разницын О.А., Карпов М.В., [Степанов С.В.](#)

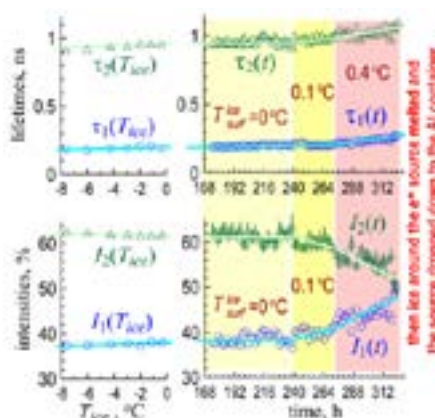
НИЦ Курчатовский институт – ККТЭФ, Москва, Россия

e-mail: [stepanov@itep.ru](mailto:stepanov@itep.ru)

Традиционная точка зрения на плавление состоит в следующем. По мере нагревания твердого тела в области температур ниже точки плавления, молекулы все больше и больше увеличивают амплитуду своих колебаний относительно равновесных положений. Поступление каждой новой порции тепла приводит к росту температуры тела. Однако при приближении к точке плавления приток тепла расходуется уже в большей степени не на увеличение амплитуды колебаний молекул, а на разрывы межмолекулярных связей, на накопление в кристаллической решетке структурных дефектов различных типов. Чтобы обеспечить подвод тепла, на поверхности твердой фазы должен существовать градиент температуры, иначе процессы дефектообразования и плавления протекать не будут. В условиях термодинамического равновесия, например, при постоянной температуре, равной температуре плавления, твердая и жидкая фазы будут сосуществовать сколь угодно долго при любом исходном соотношении объемов твердой фазы и жидкости. Плавление – неравновесный процесс, чтобы его запустить, нужно создать перегрев поверхность твердого тела (нагреть ее выше температуры плавления), при этом возникнет тепловой поток, в приповерхностном слое твердой фазы начнется процесс дефектообразования, сопровождающийся поглощением скрытой теплоты плавления.

Метод позитронной аннигиляционной спектроскопии позволяет обнаружить накопление дефектов вакансионного типа в твердых телах. Дело в том, что позитроны локализуются в таких дефектах, причем время жизни  $e^+$  зависит от типа присутствующих дефектов.

В данной работе проведены измерения временных аннигиляционных спектров во льду, начиная от  $-7.6\text{ }^{\circ}\text{C}$  и выше. При  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  спектры измерялись в течение трех суток в условиях, максимально приближенных к равновесным. При этом согласно параметрам аннигиляционных спектров процесс плавления льда отсутствовал. Затем был создан перегрев поверхности льда  $+0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$  (спектры измерялись в течение 30 ч) и далее  $+0.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Спустя двое суток, лед вокруг источника  $e^+$  растаял, и эксперимент закончился. Параметры аннигиляционных спектров показывают, что накопление структурных дефектов, связанных с поглощением скрытой теплоты плавления при отрицательных температурах не происходит. Также теплота плавления не поглощается и при температуре плавления. Скрытая теплота плавления начинает поглощаться решеткой льда только при небольшом перегреве поверхности льда.



**Рис.1.** Параметры двухэкспоненциального разложения временных аннигиляционных спектров льда: слева – интенсивности и времена жизни  $e^+$  в зависимости от температуры льда, а справа – в зависимости от времени измерения при разных перегревах поверхности льда.

Устный доклад

# РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ВОДЕ ПРИ НАЛИЧИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА

Тимченко С.Л.,<sup>1</sup> Александров К.Т.,<sup>1</sup> Задорожный Е.Н.,<sup>1,2</sup>  
Юрасова И.И.,<sup>1</sup> Новаковская Ю.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская, 5 стр.1, 10505 Москва, Россия;

<sup>2</sup>Центр Прикладной физики, 2-я Бауманская, 5 стр.1, 10505 Москва, Россия;

<sup>3</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1/3, Москва, 119991 Россия  
e-mail: svtimchenko@yandex.ru (S.L.T), Alexandrov.kiril111@gmail.com (K.T.A),  
eugenezador@gmail.com (E.N.Z), yurasovaii@bmstu.ru (I.I.Y),  
jvnovakovskaya@gmail.com (Yu.V.N.)

С применением методов ИК-Фурье-спектроскопии в инфракрасном диапазоне (1000 - 5000 см<sup>-1</sup>) и спектроскопии поглощения в ультрафиолетовом, видимом и ближнем ИК диапазонах (190...1100 нм) была исследована кинетика насыщения/обеднения молекулярным водородом открытой и закрытой водных систем. Насыщение деионизованной воды молекулярным водородом осуществляли с помощью водородного генератора, в состав которого входил водородный элемент [1,2], содержащий протонообменную мембрану Нафийон N117 толщиной 175 мкм [3,4]. В системе «H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>» обнаружен колебательный процесс, проявляющийся как в режиме генерации H<sub>2</sub> в объеме H<sub>2</sub>O, сопровождающийся внедрением молекул водорода в дистиллированную воду, так и при диффузии молекул водорода в объеме воды после генерации в закрытой системе. Максимальные изменения в значении коэффициента пропускания ИК излучения наблюдаются в области полос пропускания с минимумами при длинах волн 1643 см<sup>-1</sup> и 3410 см<sup>-1</sup>, которые соответствуют фундаментальным колебательным переходам. Наблюдаемое уширение полос свидетельствует о реорганизации сетки водородных связей, при которой возникают как более, так и менее прочные связи между молекулами воды, причем локальные стерические ограничения подвижности их ядер также могут как ослабевать, так и усиливаться. В среднем уменьшение коэффициента пропускания дистиллированной воды, насыщенной молекулярным водородом, составляет 15 %.

В диапазоне длин волн 190...1100 нм интенсивность поглощения дистиллированной воды, содержащей растворенный молекулярный водород, снижается, причем наиболее существенно в области 195—205 нм.

Присутствие молекулярного водорода влияет на реологические свойства воды, которые зависят от количества растворенного в ней молекулярного водорода. Коэффициент поверхностного натяжения (КПН) воды уменьшается при увеличении времени генерации водорода в растворе. Уменьшение КПН свидетельствует о снижении энергии связи молекул в сетке водородных связей воды и, соответственно, увеличении способности водного раствора абсорбировать посторонние частицы. Реорганизация сетки водородных связей при внедрении молекулярного водорода отражается также на изменении водородного показателя системы «H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>».

## Литература:

1. Xu, T. Ion exchange membranes: State of their development and perspective, J. Membr. Sci. 2005, 263, 1–29. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2005.05.002>.
2. Wang, Y.; Chen, K.S.; Mishler, J.; Cho, S.; Adroher, X.C. A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research, Appl. Energy 2011, 88, 981–1007. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2010.09.030>
3. Mauritz, K.A.; Moore, R.B. State of Understanding of Nafion. Chem. Rev. 2004, 104, 4535–4586.
4. Ninham, B.W.; Batty, M.J.; Bolotskova, P.N.; Gerasimov, R.Y.; Kozlov, V.A.; Bunkin, N.F. Nafion: New and Old Insights into Structure and Function. Polymers 2023, 15, 2214. <https://doi.org/10.3390/polym15092214>

Постерный доклад

# ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ И СВЕТОРАССЕЯНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Ломовской В.А.,<sup>1</sup> [Абатурова Н.А.](#),<sup>1</sup> Акимова А.А.,<sup>2</sup> Ломовская Н.Ю.<sup>1</sup><sup>1</sup> Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН<sup>2</sup> МТУ, Институт тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова

e-mail: Lomovskoy@phycha.ac.ru

Поливиниловый спирт имеет широкое практическое применение (биомедицинские материалы, сорбенты, газоразделительные и ультрафильтрационные мембраны, упаковочные материалы).

Проведенные исследования вязкостных характеристик водных растворов поливинилового спирта (ПВС) показали, что данная система ведет себя, как неньютоновская жидкость. Исследования проведены на ротационном реометре Physica MSR 501 (Anton Paar) с рабочими узлами «конус – плоскость» и «плоскость – плоскость» в диапазоне постоянных скоростей сдвига от  $\dot{\gamma} = \text{const}$  в интервале  $10^{-2} \leq \dot{\gamma} \leq 10^3, \text{c}^{-1}$  двух режимах течения:

1 – однонаправленная постоянная скорость сдвига от  $\dot{\gamma} = \text{const}$ ;2 – колебательный периодический процесс сдвига  $\gamma = \gamma_0 \sin \omega t$  при частоте  $\omega = \text{const}$  в интервале  $10^{-2} \leq \omega \leq 10^3, \text{c}^{-1}$ ;

Исследования показали, что полученные экспериментальные зависимости  $\eta = f(\dot{\gamma})$  для систем ПВС-вода ( $C_{\text{ПВС}} = 4 \text{ об.}\%$ ) с  $M_w = 2.1 \cdot 10^4$  и  $M_w = 8.1 \cdot 10^4$  качественно, в самом общем виде, аналогичны друг-другу. Эти реологические зависимости могут быть условно разделены на три частотных интервала, в которых наблюдается существенное различие по вязкостным характеристикам всех исследованных систем и их изменения при изменении скорости сдвига.

Использование метода динамического светорассеяния (Zetasizer Nano ZS), в интервале температур от 10 °C до 70 °C, что соответствует области мета стабильности на диаграмме, состояния показали, что в этой температурной области в водном растворе ПВС могут присутствовать структуры ПВС, которые изменяют свой размер при изменении температуры. Полученные результаты показывают определенную зависимость размера молекулярного клубка. Размер зависит не только от температуры, но и от молекулярной массы  $M_w$  ПВС. Чем выше молекулярная масса, тем большего размера молекулярные клубки обнаруживаются в дисперсной системе. Можно предположить, что увеличение размера дисперсных частиц при повышении температуры связано с разворачиванием клубка макромолекул ПВС при переходе дисперсной системы к гомогенному раствору.

При рассмотрении диффузионного уравнения перемещения гибкой макромолекулы в растворе проводилось последовательное введение сил внутреннего трения, как при растяжении цепи макромолекулы, так и при возможной заторможенности вращения каждой отдельной цепи макромолекулы относительно соседних цепей. Это позволяет предположить, что для плоской многосегментной цепи должна проявляться квадратичная зависимость силы сопротивления течению как от скорости растяжения цепи макромолекулы по направлению течения, так и от угла ориентации сегмента по отношению к направлению течения, что может привести к аномальным областям на температурной зависимости кажущегося увеличения размеров дисперсных частиц в растворе.



Постерный доклад

## ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ВОДЫ

**Барбин Н.М.<sup>1,2</sup> Бурумбаев А.,<sup>2</sup> Куанышев В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС РФ,  
Мира 22, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики,  
Уральский технический институт связи и информатики, Репина 15, Екатеринбург, Россия  
e-mail: nmbarbin@mail.ru

Вода с добавками углеродных наночастиц (фуллерены, нанотрубки, графен) может быть использовано в солнечных коллекторах прямого поглощения солнечного излучения [1], а также как вода затворения цементного камня и бетона [2]. В работе [3] изучалась удельная электропроводность и изменение pH такой воды.

В нашей работе изучено поведение ОВП воды и воды с добавлением углеродных нанотрубок таунит. Измерения проводились с помощью профессионального измерителя качества воды WMM 97 при температуре 21°C. Полученные результаты приведены на рисунках 1 и 2.

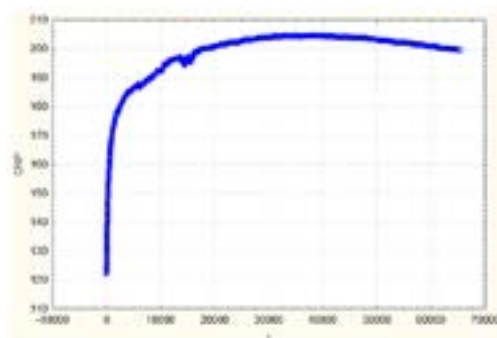


Рис. 1. Зависимость ОВП воды от времени измерения

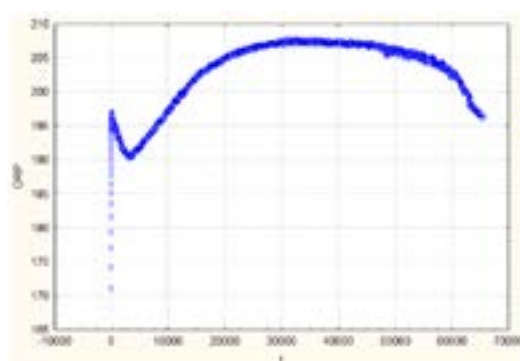


Рис. 2. Зависимость ОВП вода + таунит от времени измерения

Различие в результатах, по нашему мнению, связано с изменением ионного произведения воды, вызванного сорбцией активных частиц на поверхности углеродных нанотрубок.

### Литература:

- [1] М. Морозова, А. Зайковский, Наножиждкости на основе углеродных наноматериалов для коллекторов прямого сбора солнечной энергии, письма в ЖТФ, 50, №13, с. 43-46 (2024).
- [2] Ю. Пухаренко, И. Аубакирова, В. Старовёртов, Эффективность активации воды затворения углеродными наночастицами, инженерно-строительный журнал, №1, с.40-45 (2009).
- [3] Д. Летенко, А. Иванов, М. Мазуренко, В. Никитин, Ю. Пухаренко, Н. Чарыков, Физико-химические свойства водных дисперсий смешанного наноуглеродного материала фуллероидного типа (часть 2), Вестник гражданских инженеров, №3, с.117-122 (2010).

## Постерный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУР МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ $\gamma$ -ПИКОЛИНА

Бункин Н.Ф.,<sup>a</sup> Сабилов Л.М.,<sup>b</sup> Семенов Д.И.,<sup>b</sup> Джурев Ю.Т.,<sup>b</sup>  
[Кадиров Ш.А.](#),<sup>c</sup> Умарова Г.Н.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Московский государственный технический университет, Москва, Россия.*

<sup>b</sup> *Самаркандский государственный университет, Самарканд, Узбекистан*

<sup>c</sup> *Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан*

*e-mail: rasullobar@mail.ru*

Водные растворы неэлектролитов малых концентраций образуют определенный класс растворов, которые обладают физическими свойствами, нехарактерными для большинства бинарных жидких смесей. Прежде всего это необычный рост интенсивности молекулярного рассеяния света в узком интервале малых концентраций, причиной которого считается структурные процессы. Максимум интенсивности в разы превышает интенсивность светорассеяния из-за флуктуаций концентрации [1].

Для исследования размеров, динамики и температурного поведения этих структур использован многоугловый анализатор размеров частиц Photocor Complex, работающий на основе метода динамического рассеяния света. Технические характеристики и методика измерения описано в [2].

В исследованных растворах зарегистрировано наличие структурных образований на двух существенно различающихся пространственных масштабах - 150-300 нм и 1.5-2.5 нм, - которых будем называть *L*-структуры (*large structures*) и *S*-структуры (*small structures*), соответственно. В растворе с концентрацией  $x=0.06$  м.д. средний размер *L*-структур 155 нм и не зависит от температуры. Размер *S*-структур увеличивается от 1.7 до 2.4 нм с ростом температуры от 18 до 55°C. В области температур 25< $t$ <40 °C *L*-структуры в растворе не регистрируются. В растворе с концентрацией  $x=0.08$  м.д. зарегистрированы только *S*-структуры со средним размером 2 нм, постоянным в исследованном температурном интервале. В растворе с концентрацией  $x=0.1$  м.д. имеются *L*-структуры со средним размером 260 нм и *S*-структуры со средним размером 1.9 нм. Оба размера слабо зависят от температуры. В растворе с концентрацией  $x=0.2$  м.д. регистрируются *L*-структуры со средним размером 240 нм, слабо зависящим от температуры. В растворе зарегистрированы также и *S*-структуры, но только лишь при температуре 18°C (1.7 нм).

**Выводы:** Высокая интенсивность светорассеяния в окрестности особой точки наблюдается вследствие дополнительного (наряду с термодинамическими флуктуациями концентрации) механизма светорассеяния – наличие оптических неоднородностей, отражающих особенности локальной структуры раствора (*L*-структуры и *S*-структуры). Очевидно, что для выяснения вклада от каждого типа структур в общую интенсивность светорассеяния необходимы дальнейшие исследования.

Распространение звука в пространственно-неоднородной среде приводит к проявлению пространственной дисперсии, сопровождающейся при определенных условиях уменьшением скорости звука с ростом его частоты в узком интервале гиперзвуковых частот. Основной вклад в экспериментально наблюдаемую дисперсию гиперзвука дает взаимодействием звуковых волн с *S*-структурами в растворе.

## Литература:

1. M.F. Vuks. Light scattering in gases, liquids, and solutions (Leningrad State Univ., 1977) (in Russian).
2. Л.М.Сабилов, 2Л.Л.Чайков, 1Ш.Э.Каршибоев, 3Ш. А. Кадиров, 3М.Е.Вафаев. Методические указания по изучению динамики наноструктурных явлений в жидкостях методом динамического рассеяния света. “Интеграция образования, науки и производства”, Сборник материалов научно-практической конференции, Карши, 22-23 сентябрь 2020 г. С.310-314.
3. M.A. Anisimov, Critical phenomena in liquids and liquid crystals (Gordon and Breach Science Publishers, Philadelphia, 1991).
4. Schnider G.M. Phase behavior and critical phenomena in fluid mixtures under pressure // Ber. Bunsenges. Phys.Chem. 1972 V. 76, №3/4. С.325-331
5. Кривохижа С.В., Сабилов Л.М., Туракулов Я., Утарова Т.М. Изучение спектра рассеяния света и распространения ультра и гиперзвука в растворе  $\gamma$  - пиколин - вода // Письма ЖЭТФ, 1980. - Т.31(2). - С.746-749.

Постерный доклад

# ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА УЛЬТРАМИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

**Курьяков В.Н.**

ООО «НП ВИЖН», 119261 Москва, Ленинский пр-т 78

e-mail: [Vladimir.kuryakov@ipng.ru](mailto:Vladimir.kuryakov@ipng.ru)

Метод ультрамикроскопии позволяет при помощи специального освещения жидкости мощным лучом света визуально детектировать наличие и движение нанообъектов в ней. При этом сами объекты не видны, наблюдается рэлеевское рассеяние на отдельных наноразмерных объектах. Данный экспериментальный метод известен уже давно. В 1925 году за разработку и исследования данным методом Рихард Зигмонди был удостоен Нобелевской премии по химии. Характерный вид поля зрения ультрамикроскопа представлен на Рисунке 1. В сфокусированном горизонтальном луче лазера, в центре кадра, видно рассеяние от отдельных частиц, вне луча – не видно. Ограничений, связанных с дифракционным пределом здесь нет, поскольку, видны не сами частицы, а рассеяние от них [1].



**Рис. 1.** Характерный вид поля зрения ультрамикроскопа при наблюдении наночастиц ( $R=55$  нм) в воде

Благодаря возможности визуализации частиц таким способом становится возможным подсчитать их число в единице объема – измерить численную концентрацию, а также исследовать поведение частиц в реальном времени при воздействии на них различных физических полей, например, магнитного.

Минимальный размер частиц, которые можно детектировать данным методом определяется мощностью и длиной волны освещения (лазер), чувствительностью цифровой камеры, используемой для детектирования изображения и материалом частиц. Металлические частицы достаточно хорошо рассеивают свет, что позволяет легко детектировать такие частицы размером до 10 нм. Для наночастиц  $\text{SiO}_2$  или латексных наночастиц, при одинаковых параметрах прибора, минимальный детектируемый размер будет около 90 нм.

В работе представлены результаты исследования различных образцов высокочистой воды, прошедшей предварительную очистку (фильтры, обратный осмос) [2], на содержание наноразмерных примесей. Экспериментально показано, что процесс ультразвукового диспергирования (УЗД) чистой воды с использованием погружного активатора приводит к появлению наноразмерных частиц в воде и концентрация их линейно растет с увеличением времени УЗД. Показана возможность детектирования методом ультрамикроскопии субмикронных бактерий в воде, детектировать которые методами оптической микроскопии достаточно сложно из-за их малых размеров и низкой контрастности.

## Литература:

[1] Описание метода ультрамикроскопии: [сайт]. URL: <http://npcounter.ru/> (дата обращения: 01.09.2024).

[2] K. Popov, Y. Vainer, G. Silaev, V. Kuryakov, M. Trukhina, E. Koltinova, V. Trokhin, M. Oshchepkov, M. Butakova, A. Oshchepkov, Potential Nano/Microcenters of Crystal Nucleation in Reagent-Grade Purity Solvents and Their Differentiation by Fluorescent-Tagged Antiscalant. *Crystals* 2024, 14 (7), 650. <https://doi.org/10.3390/cryst14070650>.

## Постерный доклад

# АНАЛИЗ ПРИМЕНИМОСТИ МЕТОДА ИНТРОСКОПИИ РАДИОВОЛНАМИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ В ЕМКОСТЯХ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА

**Овчинников Д.А.,<sup>1</sup> Красных С.Ю.,<sup>1</sup> Баранов С.А.,<sup>1</sup> Барбин Н.М.,<sup>1,2,3</sup> Куанышев В.Т.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Уральский технический институт связи и информатики (филиал) Сибирского государственного университета связи и информатики (УрТИСИ СибГУТИ), ул. Репина, 15, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России (УРИГПС), ул. Мира, 22, Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup>Уральский государственный аграрный университет (ФГБОУ ВО Уральский ГАУ), ул. Карла Либкнехта, 42 Екатеринбург, Россия  
e-mail: oda@urtisi.ru

При исследовании водных растворов в емкостях конечного размера методом интроскопии электромагнитными волнами радиодиапазона крайне важно подобрать частотный диапазон исследования и оценить влияние непосредственно ячейки (емкости), ее материала и геометрических размеров на конечный результат.

Суть метода заключается в облучении ячейки с водным раствором радиоволнами и детектирования отраженного сигнала. По величине уровня отраженного сигнала можно судить о диэлектрической проницаемости водного раствора и, как следствие, о количестве примесей, содержащихся в нем [1].

Для повышения точности исследования и, по возможности, уменьшения влияния случайных факторов, например, резонансных размеров самой емкости, измерение необходимо выполнять в широкой полосе частот. Наиболее предпочтителен СВЧ диапазон в виду малого размера антенн и высокой разрешающей способности исследования. В работе рассматривался диапазон от 100 МГц до 4 ГГц.

Для повышения универсальности рассматриваемого метода и расширения области применения выполнена оценка влияния толщины стенок емкости и ее поперечного размера [1-3]. Материал для стенок емкости с водным раствором принят за пластик ПЭТ[4].

Согласно полученным результатам математического моделирования сделаны следующие выводы:

- толщина стенки измерительной ячейки в случае использования ПЭТ пластика не влияет на полученный результат (рассматривались толщины стенок 1 см и 20 см);

- в случае среды с малыми потерями (вода без примесей), на частотах до 2.5 ГГц наблюдается различие в коэффициентах отражения при рассматриваемых размерах контейнера 5 см, 25 см и 100 см. Так на частоте 1 ГГц коэффициенты отражения составляют 0.938, 0.886, 0.877; на частоте 2 ГГц коэффициенты отражения составляют 0.891, 0.877, 0.877; на частоте 2.5 ГГц коэффициенты отражения составляют 0.876, 0.876, 0.876 для толщин 5 см, 25 см и 100 см соответственно;

- при увеличении концентрации соли, то есть при возрастании потерь в среде, коэффициент отражения менее зависим от размеров контейнера, так, при концентрации соли NaCl 1% уже начиная с частоты 0.8 ГГц коэффициент отражения для всех контейнеров является одинаковым.

Полученные результаты были подтверждены натурным экспериментом, использовались контейнеры с поперечным размером 5 см и 25 см, частотная область исследования составляла от 2.5 ГГц до 3 ГГц. Полученные коэффициенты отражения укладываются в погрешность измерений, не зависят от размера измерительной ячейки и подтверждают результаты математического моделирования.

## Литература:

- [1] М.И. Финкельштейн, В.Л. Мендельсон, В.А. Кутев, Радиолокация слоистых земных покровов. (Москва: Издательство «Советское радио», 1977) с. 9-46.
- [2] Л.М. Бреховских, Волны в слоистых средах. (2-е изд. Москва, Российская Федерация: Наука, 1973), с. 52-93.
- [3] Рекомендация МСЭ-R P.527-4 Электрические характеристики распространения радиоволн серии Р на поверхности Земли. (06/2017). [Онлайн]. Доступно: [https://www.itu.int/dms\\_pubrec/itu-r/rec/p/R-REC-P.527-4-201706-I!!PDF-E.pdf](https://www.itu.int/dms_pubrec/itu-r/rec/p/R-REC-P.527-4-201706-I!!PDF-E.pdf) (дата обращения: 29 января 2024 г.)
- [4] Ю.В. Корицкий, В.В. Пасынков, Б.М. Тареев. Справочник по электротехническим материалам в трех томах. Третье, переработанное издание том 1. (Москва Энереоатомиздат 1986).

## Постерный доклад

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ РАСТВОРОВ ОБРАЗЦОВ ЛАКТОЗЫ МОНОГИДРАТА

Стась И.Е.,<sup>1\*</sup> Родионова Н.Н.,<sup>2</sup> Слатинская О.В.,<sup>2,3</sup> Тарасов С.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Алтайский государственный университет,

<sup>2</sup> ООО «НПФ «Материа Медика Холдинг»,

<sup>3</sup> Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

\*e-mail: irinastas@gmail.com

Известно, что структурные и, соответственно, спектральные свойства порошков лактозы моногидрата, насыщенных растворами веществ, приготовленных последовательным разведением, сопровождавшимся вибрационным воздействием, отличаются от соответствующих свойств контролей (т.е. от интактного порошка лактозы и от порошка лактозы моногидрата, насыщенного растворителем) [1-3]. Это обусловлено различиями в физико-химических свойствах растворов, используемых для насыщения порошков лактозы моногидрата. При этом, структурно-динамические свойства воды в составе растворов таких образцов лактозы моногидрата также различаются [3].

Недавно была опубликована статья, описывающая возможность получения образцов с измененными физико-химическими свойствами в результате вибрационной обработки воды или лактозы моногидрата совместно с другим веществом, но находящимся в отдельном флаконе [4]. В настоящей работе описаны результаты исследования электрохимических свойств растворов лактозы моногидрата, насыщенных растворами, полученными по такой технологии (4 различных тестируемых образца), или контрольных образцов (лактоза, насыщенная растворителем, а также лактоза интактная). Для приготовления растворов образцы лактозы растворялись в деионизованной воде в концентрации 0,2%. Измерения проводились в день приготовления раствора. Из каждого порошка готовили по 6 растворов для тестирования удельной электропроводности (УЭП), pH и окислительно-восстановительного потенциала (ОВП). В ходе экспериментов были выявлены статистически значимые различия измеряемых параметров.

Показали, что электрохимические свойства растворов четырех тестируемых образцов различаются: различия по значению УЭП достигают 22% и различия по значению ОВП достигают 53 мВ, различие значения pH достигает 0,15 ед. (во всех случаях  $p < 0,05$ ). Кроме того, свойства растворов четырех тестируемых образцов отличаются от лактозы, насыщенной растворителем: по ОВП – до 40 мВ, по pH – до 0,15 ед. (во всех случаях  $p < 0,05$ ). По сравнению с лактозой интактной свойства растворов четырех тестируемых образцов отличаются: по УЭП – до 35%, по ОВП – до 55 мВ, по pH – до 0,3 ед. (во всех случаях  $p < 0,05$ ).

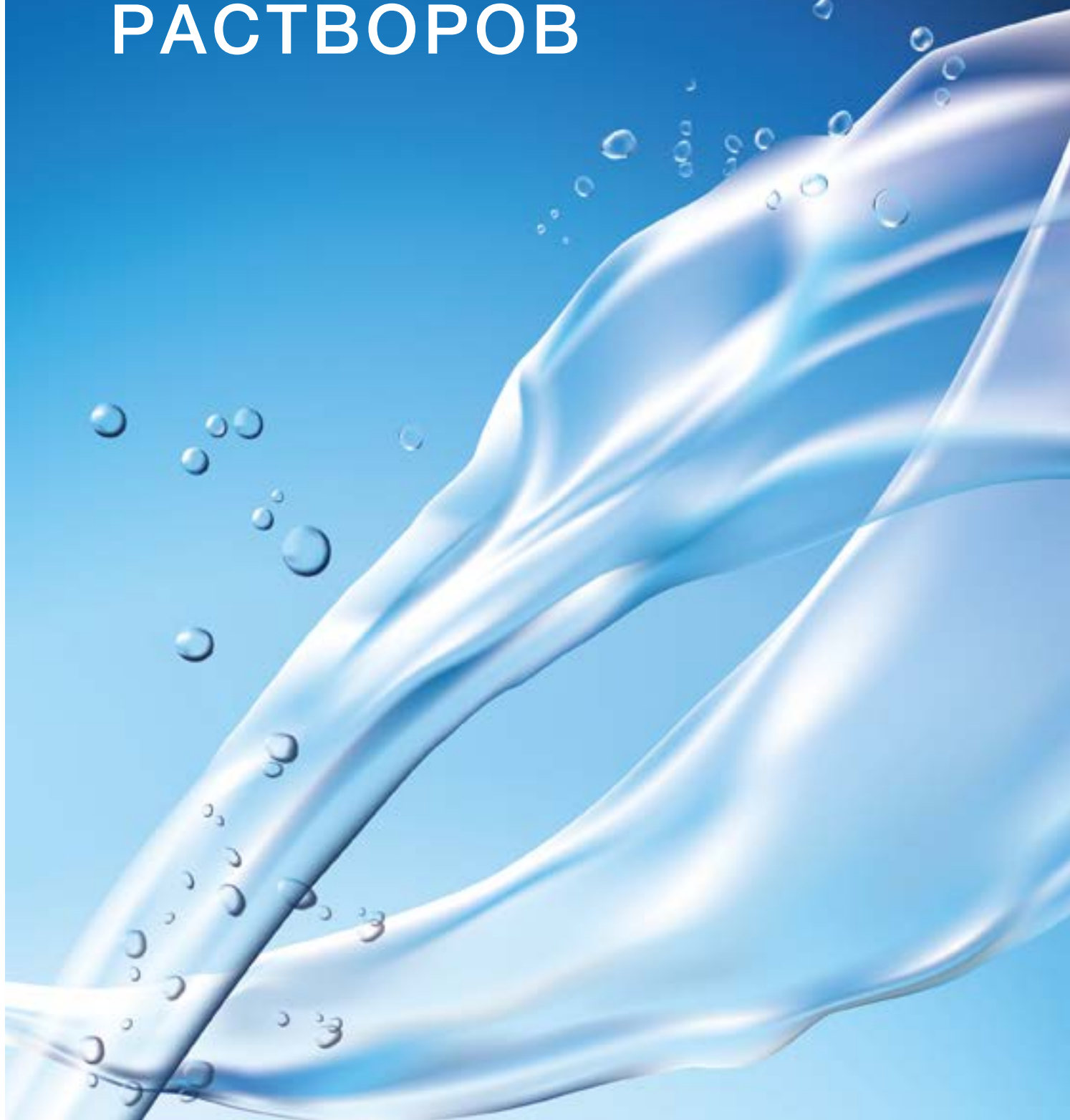
Таким образом, было показано, что образцы лактозы моногидрата, насыщенные растворами, полученными в результате вибрационной обработки (описанной в [4]), по своим физико-химическим свойствам различаются между собой и отличаются от контролей.

## Литература:

- [1] Baranova A., et al. Optical properties of crystalline lactose fluidized with dilutions of various substances in the terahertz frequency range. *Pharmaceutics*. 2022; 14(1). <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14010032>
- [2] Konstantinov RR, et al. Changes of unit cell parameters in lactose saturated by substances technologically processed by dilution. *Current Nanotechnology*. 2025; 21(1). In Press.
- [3] Penkov N., Fesenko E. Development of terahertz time-domain spectroscopy for properties analysis of highly diluted antibodies. *Applied Sciences*. 2020; 10(21): 7736. <https://doi.org/10.3390/app10217736>
- [4] Petrova A., et al. Phenomenon of post-vibration interactions. *Symmetry*. 2024; 16(8): 958. <https://doi.org/10.3390/sym16080958>



# МОДЕЛИ СТРОЕНИЯ И ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ



Приглашенный доклад

# ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ПРОТЕКАЮЩИЕ В НИЗКОЧАСТОТНОМ ВИБРОАКУСТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

**Богатов Н.А., Савина А.С., Зоткин А.П., Пентюхин Е.И.***Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия**e-mail: nikitabogatov@list.ru*

Настоящая работа посвящена вопросу исследования влияния низкочастотного виброакустического малоэнергетического воздействия в диапазоне частот от 7 до 100 Гц на различные физико-химические процессы, протекающие в водной среде. В последнее время внимание значительного числа научных коллективов привлекает рассматриваемый диапазон частот не только по причине малоизученности данной области научного знания, но и в связи с прикладными вопросами, возникающими в технике и технологии. Так, известны результаты, связанные с изучением сонохимических реакций в водной среде (например, синтез пероксида водорода, окисление ионов железа (II) и т.д.) [1-3]. Отдельно стоит отметить, что рассматриваемые сонохимические процессы непосредственно связаны с неоднородностью воды как реакционной среды, а также наличием сверхнизкой концентрации различных солей даже в воде высокой степени очистки [4, 5].

В связи с этим, на кафедре физики РХТУ им. Д.И. Менделеева проводятся систематические исследования процессов, протекающих в низкочастотных виброакустических полях. В частности, экспериментально установлен и объяснен эффект «низкочастотного торможения» окислительно-восстановительных процессов в открытых сосудах в зависимости от контакта с кислородом [6]. На основании полученных результатов в дальнейшем изучено пространственное распределение газов в зоне сонохимического действия в поверхностном и глубинном слое жидкости, и доказана практическая возможность низкочастотного виброакустического управления локальной концентрацией газообразных реагентов на межфазной границе и в глубине раствора на примере углекислого газа и газообразного аммиака [7]. Полученный результат имеет практическую значимость для интенсификации массообменных процессов в технологических установках. Доказано влияние низкочастотных гармонических колебаний на повышение до 5 раз скорости химических процессов обработки поверхности конструкционных материалов «травильными растворами» [8].

Экспериментально доказано влияние низкочастотных воздействий на состояние супрамолекулярных соединений медицинских препаратов Йодиол и Йокс. На основании полученных результатов выяснено, что акустическое поле приводит к изменению биохимической активности препаратов [9]. В связи с этим, проводились исследования по изучению низкочастотного воздействия на всхожесть семян: установлено ускорение прорастания образцов, при этом зависимость от времени воздействия носит нелинейный характер.

## Литература:

- [1] Маргулис М.А. Основы звукохимии. Москва, Высшая школа, 1984, 272 с.
- [2] Gudkov S.V., Baimler I.V., Lyakhov G.A., et al. Effect of mechanical shaking on the physicochemical properties of aqueous solutions. *Int. J. of Molecular Sciences*, 2020, vol. 21, no. 21, pp. 1-13.
- [3] Окисление железа(II) в поле низкочастотных виброакустических воздействий / А. С. Савина, Е. И. Пентюхин, Н. А. Богатов [и др.] // *Успехи в химии и химической технологии*. – 2022. – Т. 36, № 13(262). – С. 144-146.
- [4] Бункин, Н. Ф. Бабстонная структура воды и водных растворов электролитов. *Успехи физических наук*. 2016, Т. 186, № 9, С. 933-952.
- [5] Маргулис И. М., Половинкин В.Н., Яшин А.И. Современные подходы к описанию динамики кавитационных пузырьков и кавитационного облака. *Морские интеллектуальные технологии*. 2023, № 2-1(60), С. 320-326.
- [6] Особенности окислительно-восстановительного процесса в поле низкочастотного воздействия / Г. Н. Фадеев, В. С. Болдырев, Н. А. Богатов, А. Л. Николаев // *Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия Естественные науки*. – 2020. – № 1(88). – С. 80-92.
- [7] Исследование физико-химических эффектов, возникающих в низкочастотных малоэнергетических полях / Н. А. Богатов, В. С. Болдырев, А. С. Савина [и др.] // *Успехи в химии и химической технологии*. – 2021. – Т. 35, № 14(249). – С. 25-27.
- [8] Исследование влияния низкочастотных виброакустических полей на абсорбцию углекислого газа на границе раздела фаз жидкость—газ / В. С. Болдырев, Н. А. Богатов, А. С. Савина [и др.] // *Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия Естественные науки*. – 2023. – № 6(111). – С. 55-69.
- [9] Влияние низкочастотных малоэнергетических воздействий на состояние йодиола / В. С. Болдырев, Н. А. Богатов, А. С. Савина [и др.] // *Необратимые процессы в природе и технике : Труды Двенадцатой Всероссийской конференции. В 2-х томах, Москва, 31 января – 03 2023 года*. – Москва: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), 2023, С. 38-41.

## Приглашенный доклад

# ИЗУЧЕНИЕ ВРАЩЕНИЯ И ВЗАИМНОЙ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ В КОМПЬЮТЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

**Волошин В.П.**

Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск  
e-mail: voloshin@kinetics.nsc.ru

Движение любой молекулы можно представить в виде суммы двух формально независимых движений – перемещения центра масс молекулы и вращения вокруг оси, проходящей через этот центр. Взаимное расположение центров масс молекул и их перемещение активно изучается как экспериментально, так и в ходе компьютерного моделирования. Гораздо меньше внимания оказывают вращению молекул и их взаимной ориентации. Между тем для их описания можно использовать метод, подобный тому, который используется для пространственных положений и перемещений.

Для реализации этого метода для молекул каждого типа должна быть задана собственная декартова система координат. Ориентацию молекулы, в которой её собственные оси координат совпадают с осями координат модели в целом, назовём *базовой*. Любая другая ориентация описывается параметрами вращения, переводящего молекулу из базовой ориентации в текущую. Эти параметры вращения мы будем использовать в качестве координат пространства ориентаций. Базовая конфигурация, описываемая параметрами нулевого вращения, служит для этого пространства началом координат. Наиболее удобно оказалось описывать вращения с помощью кватернионов [1] – модифицированных комплексных чисел, содержащих одну действительную компоненту и три мнимые. Ориентация молекулы в таком пространстве описывается кватернионом вращения, переводящего эту молекулу из базовой ориентации в текущую. Сравнивая кватернионы начальной и конечной ориентации, легко вычислить кватернион вращения, переводящего молекулу из начальной ориентации в конечную. Наглядность описания вращения при помощи кватерниона заключается в том, что три мнимые компоненты кватерниона описывают ось вращения, а действительная компонента равна  $\cos(\varphi/2)$ , где  $\varphi$  — угол вращения. Таким образом, подобно тому, как положение и перемещение молекул в пространстве описывается радиус-вектором и вектором перемещения, ориентация молекулы и её вращение в пространстве ориентаций описывается кватернионом ориентации и кватернионом вращения.

С помощью такого метода нами были изучены корреляции поступательного и вращательного движений молекул воды [2]. Определены угловые скорости этих молекул, рассчитаны их автокорреляционные функции. Спектры этих функций на интервале от 200 до 1000  $\text{см}^{-1}$  хорошо воспроизводят соответствующие участки экспериментальных КР-спектров воды [4]. Использование формулы Грина-Кубо позволило рассчитать коэффициенты вращательной диффузии воды при разных давлениях и температурах.

Помимо этого, нами были определены и описаны основные ориентации молекул воды на разных расстояниях от поверхности белка [3] и липидной мембраны, а также взаимная ориентация молекул в водных растворах ТВА и ТМАО.

## Литература:

- [1] Волошин В.П., Наберухин Ю.И. «Описание вращательных движений молекул в компьютерных моделях воды с помощью кватернионов», РЭНСИТ, 12(1):69-80, (2020)
- [2] Волошин В.П., «Корреляция поступательного и вращательного движения молекул воды в молекулярно-динамических моделях», РЭНСИТ, 13(2):141-148, (2021)
- [3] Волошин В.П., Медведев Н.Н., «Ориентация молекул воды вблизи глобулярного белка», Журн. структ. химии, т. 62, №5, с. 745-757, (2021)
- [4] Волошин В.П., Наберухин Ю.И., «Автокорреляционные функции поступательной и вращательной скорости в молекулярно-динамических моделях воды и их спектры», Журн. структ. химии, т.64, №2, 105637, (2023)

Приглашенный доклад

## СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИТОПА (5, 3, 3), ОБРАЗУЮЩИЕСЯ НА ГРАНИЦЕ ГАЗ – ВОДА С РАСТВОРЕННЫМ В НЕЙ ГАЗОМ

Желиговская Е.А.

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Россия,  
119071, Москва, Ленинский просп., д. 31, к. 4  
e-mail: Imm@phyche.ac.ru

Обычно предполагается, что если молекула растворенного в воде газа имеет небольшие размеры, то образующаяся вокруг нее гидратная оболочка принимает форму, близкую к додекаэдру  $5^{12}$  или полиэдру  $5^{12}6^2$ . Клатратные газовые гидраты во многих случаях содержат большое количество полостей  $5^{12}$ . Решетка из молекул воды в них стабилизирована молекулами газа. В частности, каждая из полостей  $5^{12}$  может быть заполнена молекулой газа, если ее размеры меньше 4.2 Å.

Количество растворенного в воде газа не достаточно, чтобы при условиях (температуре и давлении) образования газового гидрата его кристаллизация начиналась внутри водного объема. Поэтому, как показывает опыт, образование газового гидрата начинается на границе газ – жидкая водная фаза. В частности, на границе водород–вода образуются гидраты KC2 (при давлениях до 400 МПа), недавно открытый  $C_0$  с гексагональной структурой (400 – 700 МПа),  $C_1$  со структурой водного каркаса в виде структуры льда II (700 МПа – 2 ГПа) и  $C_2$  со структурой водного каркаса в виде структуры льда Ic (выше 2 ГПа). В гидрате водорода со структурой KC2 каждая полость  $5^{12}$  может содержать до двух молекул водорода, а полость  $5^{12}6^4$  – до четырех.

Если размеры молекулы газа таковы, что возможна стабилизация додекаэдрической полости, то кристаллизация клатратного гидрата и начинается с образования на границе раздела газ – водная фаза такой полости и последующего пристраивания к ней подобных полостей. При этом на границе раздела из смежных додекаэдров образуются фрагменты гексагональной плоской структуры, содержащей вакансии. Эти вакансии достраиваются дальше до полостей  $5^{12}6^2$ ,  $5^{12}6^3$  или  $5^{12}6^4$  в зависимости от того, какие из них могут быть стабилизированы молекулами газа, и происходит рост кристаллов газового гидрата.

В работе показано, что при таком механизме кристаллизации клатратного гидрата с геометрической точки зрения возможно образование из смежных додекаэдров и некристаллической структуры в виде спирали 30/11, состоящей из трех спиралей 101. Такая структура является линейной подструктурой политопа (5, 3, 3). В пространстве  $E_3$  ее додекаэдры слегка искажены (внешние ребра структуры длиннее внутренних меньше, чем на 5%). Структура может расти неограниченно в длину, но ее диаметр ограничен.

Кристаллическая структура KC2 (ее водный каркас – лед XVI) состоит из полостей  $5^{12}$  и  $5^{12}6^4$ . Она получается из структуры политопа (5, 3, 3) введением в последнюю сетки дисклинаций, приводящих к появлению полостей  $5^{12}6^4$  (аналогичным образом так раньше была рассмотрена структура одной из фаз Лавеса).

В настоящей работе показано, что кристаллический лед XVII (он же водный каркас гидрата водорода  $C_0$ ) состоит из линейных подструктур политопа (5, 3, 3), в которых в каждую спираль  $10_1$  из додекаэдров введена диспирация с угловой компонентой в  $-72^\circ$  и сдвигом на половину псевдопериода (т.е. на один додекаэдр). Сдвиг обеспечивает распрямление спирали, а добавление шестого угла – возможность укладки в кристаллическую структуру в  $E_3$ .

Если в спираль  $10_1$  из додекаэдров вводить диспирацию с угловой компонентой в  $+72^\circ$  и сдвигом на половину псевдопериода (на один додекаэдр), то полости полностью исчезают и получается фрагмент структуры кристаллического водного льда III(IX). Однако в отличие от льда XVII во льду III(IX) эти фрагменты связаны между собой не через общие атомы, а через водородные связи.

Структуры некоторых других водных льдов родственны структуре политопа 240.



## Приглашенный доклад

# ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ В ГИДРОГЕЛЯХ ПЕКТИНА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ КР СПЕКТРОСКОПИИ

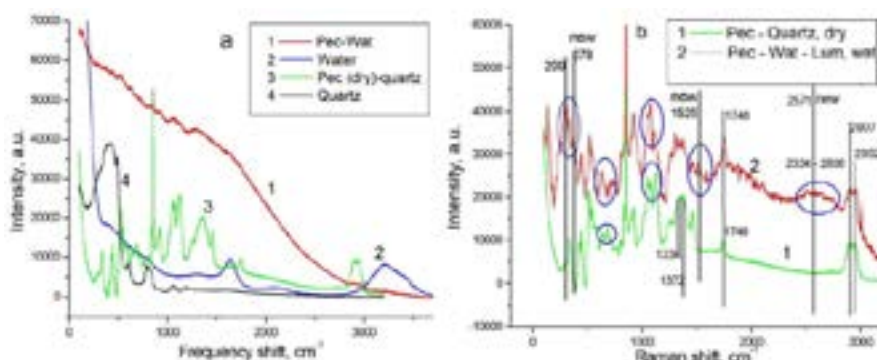
Давыдова Г.А.,<sup>1</sup> Махамадиев М.Т.,<sup>2</sup> Мельник Н.Н.,<sup>2</sup>  
Переведенцева Е.В.,<sup>2</sup> Селезнева И.И.,<sup>1</sup> Чайков Л.Л.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН,  
142290, Московская обл., Пущино, Институтская ул., 3.

<sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

e-mail: muhridin.mahamadiyev@gmail.com, chaykovll@lebedev.ru

При исследовании комплексов пектина методами комбинационного рассеяния света (КР) и ИК-спектроскопии (см. например [1, 2] и приведённую там литературу) практически все исследования выполняются на порошках или на образцах гелей, высушенных на различных подложках, в то время как в практических применениях используются гидрогели. В данной работе методом КР-спектроскопии проведено исследование образцов 2% гидрогелей цитрусового пектина, выдержанных в течение 2 недель (Wet) при 40°C, и образцов того же геля, высушенных на воздухе на кварцевой подложке (Dry). Спектры КР снимали при возбуждении лазером с  $\lambda = 785$  и 1064 нм. Выявленные различия между КР-спектрами пектина в сухом и обводненном состояниях представлены на Рис. 1. (а и b).



**Рис. 1.** Различия в КР спектрах пектина в сухом и гидрогелевом состояниях: а: Спектр рассеяния в гидрогеле пектина (красный, 1) после вычитания спектра воды (синий, 2); КР-спектр высушенного образца пектина (зелёный, 3) после вычитания спектра кварцевой подложки (чёрный, 4); б - КРС-спектры «сухого» образца (зелёный, 1) и гидрогеля (красный, 2) после вычитания спектров воды и люминесценции.

Овалами выделены наиболее характерные отличия. Возбуждение на  $\lambda = 785$  нм.

В гидрогеле пектина возникает широкая люминесцентная полоса, которой нет в спектрах «сухих» образцов. Также в гидрогеле по сравнению с «сухим» образцом появляется широкая полоса  $2334\text{--}2808\text{ см}^{-1}$  и ряд новых линий ( $299, 465, 490, 733, 961, 1274, 1348\text{ см}^{-1}$  и несколько линий в диапазоне  $1399\text{--}1637\text{ см}^{-1}$ ). В то же время несколько линий ( $425, 589, 1262\text{ см}^{-1}$ ) пропадают или сильно ослабевают в гидрогеле, а линии  $632$  и  $686\text{ см}^{-1}$ , а также  $1050$  и  $1080\text{ см}^{-1}$  меняют соотношение интенсивностей.

Таким образом, обнаружено появление в КР-спектрах гидрогелей линий, отсутствующих в спектрах сухих образцов и по частотам близких к колебаниям C—OH, COO- и (OH)COOH групп. Увеличение интенсивности колебаний таких групп относительно колебаний пиранозных колец, а также появление люминесценции в гидрогеле позволяет предположить, что спектроскопия гидрогелей может дать дополнительную информацию по сравнению со спектроскопией сухих образцов.

## Литература:

- [1] Phillip M. Wu, Ching Yi Chung, Yan Ruei Chen, et. al. Vibrational and electrochemical studies of pectin—a candidate towards environmental friendly lithium-ion battery development. *PNAS Nexus*, 1, 1–8, (2022) <https://doi.org/10.1093/pnasnexus/pgac127>.
- [2] G.A. Davydova, L.L. Chaikov, N.N. Melnik, et. al. Polysaccharide composite alginate-pectin hydrogels as basis for developing wound healing materials. *Polimers* 16, 287 (19 pages) (2024). <https://doi.org/10.3390/polym16020287>



Приглашенный доклад

# РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ КОРОТКОПЕРИОДНЫХ ВНУТРЕННИХ ВОЛН В КАРСКОМ МОРЕ И ОЦЕНКИ ИХ ВЛИЯНИЯ НА ДАЛЬНЕЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЗВУКА

Назаренко Ю.В.<sup>1,2</sup>, Сидоров Д.Д.<sup>1</sup>, Зимин А.В.<sup>3</sup>, Свергун Е.И.<sup>3</sup>,  
Петников В.Г.<sup>1</sup>, Луньков А.А.<sup>1</sup>, Копышов И.О.<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, ул. Вавилова 38, Москва, 119991

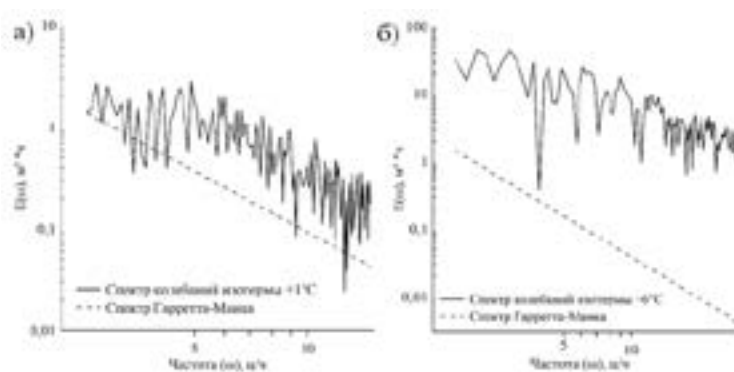
<sup>2</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
географический факультет, Ленинские горы 1, Москва, 119991

<sup>3</sup> Институт океанологии им. П.П. Ширшова РАН, Нахимовский проспект 36, Москва, 117997

<sup>4</sup> Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9, Долгопрудный, 141701

<sup>5</sup> Морской гидрофизический институт РАН, ул. Капитанская 2, Севастополь, 299011  
e-mail: julnazr@yandex.ru

Представлены результаты натурных измерений гидрологических характеристик морской воды в Карском море, полученные в ходе экспедиции «ПУ МФТИ-ИО РАН-2024» на НИС «Профессор Молчанов» летом 2024 года. Зарегистрированные с помощью квазистационарных вертикальных цепочек с термисторами, а также при непрерывном STD-зондировании короткопериодные вариации температуры позволили обнаружить присутствие интенсивных короткопериодных внутренних волн (КВВ). Результаты спектральной обработки полученных данных показаны на рис. 1, где они сравниваются с классическим спектром вертикальных смещений жидкости, предложенным К. Гарреттом и В. Манком [1]. Как видно на рисунке, амплитуда зарегистрированных КВВ существенно превосходит фоновые значения, характерные для мелководных акваторий. По-видимому, это связано с тем, что зарегистрированные КВВ представляют собой «хвосты» цугов солитоноподобных волн [2].



**Рис. 1.** Спектр вертикальных смещений изотерм в слое пикноклина, совмещенный с теоретическим спектром Гарретта-Манка: а) по результатам измерений в северной части Карского моря; б) по результатам измерений в южной части Карского моря

В работе также представлены численные оценки возможного влияния подобных КВВ на дальнейшее распространение акустических сигналов с несущей частотой  $f = 3$  кГц, часто применяемых на мелководье для подводной акустической навигации и звукоподводной связи. Расчеты, выполненные с помощью метода широкоугольного параболического уравнения, показали, что КВВ, возмущающие вертикальный профиль скорости звука, приводят к существенным изменениям передаточной функции подводного акустического волновода протяженностью в несколько сотен метров. При этом потери при распространении практически не изменяются.

*Контактные измерения были получены в рамках научно-образовательной программы «Плавучий университет» (соглашение № 075-03-2024-117).*

## Литература:

- [1] Garrett C.J.R., Munk W.H., Space-time scales of internal waves: a progress report, J. Geophys. Res., vol. 80., pp. 291-297, (1975).
- [2] Кузькин В.М., Лаврова О.Ю., Пересёлков С.А., Петников В.Г., Сабинин К.Д., Анизотропное поле фоновых внутренних волн на морском шельфе и его влияние на распространение низкочастотного звука, Акустический журнал, том 52, стр. 74-86, (2006).

## Приглашенный доклад

# ПЕРЕХОД СТЕКЛО-СТЕКЛО В МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ ВОДОПОДОБНЫЕ АНОМАЛИИ, В ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ

**Рыжов В.Н., Тареева Е.Е., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н.**

*Институт физики высоких давлений РАН, 108840 г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе 14  
e-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru*

Вода – самая распространенная жидкость на Земле, а также вещество с наибольшим количеством аномалий в термодинамических, динамических и структурных свойствах. Вода необходима для жизни и, следовательно, является важнейшим объектом для современных исследований в области химической физики и физической химии. Несмотря на свою простоту в жидком состоянии, она имеет чрезвычайно богатую фазовую диаграмму, на которой представлены различные типы льдов, аморфные фазы и термодинамические аномалии, а также гипотетическая критическая точка перехода жидкость-жидкость, которая используется для объяснения наблюдаемого аномального поведения [1]. Большой интерес представляет изучение поведения воды в конфайнменте (ограниченной геометрии) для биологии, геологии и других областей, где свойства материала сильно зависят от поведения воды в щелях, порах и т.д. В связи с этим актуальным является описание поведения воды не только в трех, но и в двух измерениях.

Теоретическое описание воды использует различные подходы, включающие первопринципное моделирование с использованием машинного обучения, методы молекулярной динамики с использованием полуфеноменологических потенциалов (SPC/E, TIP4P/2005 и т.д.) [1]. В то же время для качественного понимания поведения воды используются простые феноменологические потенциалы, характеризующиеся наличием двух масштабов (так называемые core softened potentials) [1-6]. Оказалось, что в системе, описываемой подобными потенциалами, наблюдается целый ряд необычных явлений, включая максимумы на кривой плавления, структурные переходы в твердой фазе, термодинамические аномалии, подобные наблюдаемым в воде [2-4]. Наличие двух пространственных масштабов приводит к квазибинарному поведению – в зависимости от термодинамических параметров система может рассматриваться как состоящая из смеси двух типов частиц, соответствующих каждому из пространственных масштабов. Бинарные системы имеют тенденцию к формированию стекла [2-6]. При этом в зависимости от соотношения пространственных масштабов в системе может формироваться два типа стекла с переходом между этими стеклами. Этот переход был рассмотрен в данном докладе в рамках приближения связанных мод для двух и трех измерений, а также методами компьютерного моделирования [2-6]. Характерной чертой полученных решений является наличие областей возвратного перехода в стекло, когда при увеличении плотности система сначала стеклует, затем стекло переходит в жидкость, а после этого система снова стеклует.

## Литература:

- [1] Paola Gallo et al, Water: A Tale of Two Liquids, Chem. Rev. 116, 7463–7500 (2016).
- [2] Yu. D. Fomin, N. V. Gribova, V. N. Ryzhov, S. M. Stishov, and Daan Frenkel, Quasibinary amorphous phase in a three-dimensional system of particles with repulsive-shoulder interactions, J. Chem. Phys. 129, 064512 (2008).
- [3] R. E. Ryltsev, N. M. Chetelkatchev, and V. N. Ryzhov, Superfragile glassy dynamics of one component system with isotropic potential: competition of diffusion and frustration, Phys. Rev. Lett. 110, 025701 (2013).
- [4] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, Сложные фазовые диаграммы систем с изотропными потенциалами: результаты компьютерного моделирования, УФН 190, №5, 449-473 (2020).
- [5] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Особенность типа "ласточкин хвост" и переход стекло-стекло в системе коллапсирующих твердых сфер, ТМФ 167, 284 (2011).
- [6] Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov. Glass transition in a two-dimensional core softened system. RENSIT 12(1), 161-166 (2020).

Приглашенный доклад

# СКОРОСТЬ ЗВУКА СМЕСЕЙ: БЛАГОРОДНЫЕ ГАЗЫ И ВОДНО-СПИРТОВЫЕ СМЕСИ

[Фомин Ю.Д.](#), Циок Е.Н., Рыжов В.Н., Бражкин В.В.

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*

*e-mail: fomin314@mail.ru*

Известно, что скорости звука смесей могут демонстрировать различное качественное поведение [1]. Так, смеси сжиженных благородных газов как правило демонстрируют минимум скорости звука в зависимости от концентрации компонент [2,3]. В то же время водно-спиртовые смеси, наоборот, демонстрируют максимум скорости звука в зависимости от концентрации [1]. При этом до сих пор нет удовлетворительного объяснения подобных различий в поведении различных смесей.

В данной работе мы показываем, что в случае со смесями благородных газов возникновение минимума на концентрационной зависимости скорости звука может быть связано с эффективным приближением системы к линии Френкеля при добавлении более легкого компонента [3]. В то же время в водно-спиртовых смесях максимум скорости звука объясняется более сильным взаимодействием молекул в смеси, чем в чистой системе, что согласуется с высказанными ранее догадками [1].

## Литература:

- [1] И.Г. Михайлов, В.А. Соловьев, Ю.П. Сырников, Основы молекулярной акустики (Наука), глава 4 (1964)
- [2] Y.L. Kachanov, B.E. Kanishev, L.L. Pitaevskaya, J. of Engineerin Physics 44,1-4 (1983)
- [3] Yu. D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, V.V. Brazhkin,, arXiv:2405.01891 (2024)

## Приглашенный доклад

# МОДЕЛИ СЛУЧАЙНОГО ПИННИНГА: ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПАРАМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

**Циок Е.Н., Фомин Ю.Д., Тареева Е.Е., Рыжов В.Н.**

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН  
г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14  
e-mail: elena.tsiok@gmail.com*

Известно, что магнитные и электрические конически-вращающиеся поля способны индуцировать сложные многомасштабные взаимодействия в двумерных (2d) коллоидных системах [1]. Было показано, что один из параметров потенциала - угол прецессии поля - кардинальным образом влияет на характер взаимодействия частиц и на фазовую диаграмму. Так, при малых углах система ведет себя подобно двумерной системе с чисто отталкивательным потенциалом мягких дисков. При больших углах – подобно обобщенной системе Леннарда-Джонса с (nm)-потенциалом [2]. При средних углах прецессии поля – подобно системе с потенциалом с отрицательной кривизной с двумя масштабами длин. В экспериментах для создания 2d коллоидной системы обычно используется водный раствор коллоидных частиц, заключённый между двумя стеклянными пластинами. В случае, если расстояние между пластинами сравнимо с размером коллоидов, систему можно считать эффективно двумерной. В такой системе большое значение приобретают дефекты пластин, например, их шероховатость. Эти дефекты могут становиться центрами пиннинга, то есть, являться точками, к которым сильно притягиваются коллоидные частицы. Беспорядок может влиять на сценарии кристаллизации/плавления 2d систем. Так, в отличие от трехмерного случая, где плавление всегда происходит посредством стандартного перехода первого рода, для микроскопического описания 2d плавления известны три сценария [3]: (i) теория Березинского-Костерлица-Таулесса-Хальперина-Нельсона-Янга (БКТХНЯ), в рамках которой 2d плавление происходит посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой; (ii) плавление посредством перехода первого рода, например, в результате диссоциации дисклинационных квадрупольей; (iii) сценарий плавления, предложенный Бернардом и Краусом (БК): переход твердое тело - гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ), а переход гексатическая фаза - изотропная жидкость – посредством перехода первого рода.

В работе представлены результаты компьютерного моделирования для трех моделей случайного пиннинга. В случае замороженного беспорядка, вызванного закреплением в регулярных узлах 2d решетки, твердая фаза стабилизируется, тогда как закрепление в случайных местах (междоузлиях) дестабилизирует кристалл. В этом случае трансляционный порядок разрушается, что приводит к расширению области существования ориентационно упорядоченной жидкости (гексатической фазы) и возможности исследования ее свойств. Такая модель пиннинга может привести к смене сценария плавления от перехода первого рода изотропная жидкость - кристалл к сценарию по БК с участием гексатической фазы. И, наконец, третья модель - Гауссовский пиннинг - в зависимости от глубины ямки может превращать сценарий типа БК в БКТХНЯ [4]. В качестве примера обсуждаются системы с пиннингом: с потенциалом мягких дисков для  $n=12$ ; с потенциалом с отрицательной кривизной с шириной ступеньки 1.35; модельная система с деформируемым потенциалом, применяемым для описания поведения коллоидов – потенциалом Герца с  $\alpha=5/2$ ; система с потенциалом Леннарда-Джонса.

**Литература:**

- [1] K. A. Komarov, S. O. Yurchenko, Colloids in rotating electric and magnetic fields: designing tunable interactions with spatial field hodographs, *Soft Matter*, 16, 8155-8168 (2020).
- [2] E. N. Tsiok, Y. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. E. Tareyeva, V. N. Ryzhov, P. A. Libet, N. A. Dmitryuk, N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, The role of attraction in the phase diagrams and melting scenarios of generalized 2D Lennard-Jones systems, *J. Chem. Phys.*, 156, 114703 (2022).
- [3] В. Н. Рыжов, Е. А. Гайдук, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, Сценарии плавления двумерных систем – возможности компьютерного моделирования, *ЖЭТФ*, 164, 143–171 (2023).
- [4] Yu. D. Fomin, Eu. A. Gaiduk, E. N. Tsiok, and V. N. Ryzhov, The influence of Gaussian pinning on the melting scenario of a two-dimensional soft-disk system: First-order versus continuous transition, *Physica A*, 644, 129841 (2024).

Устный доклад

# АНАЛИЗ СЕТИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ 1,4-ДИОКСАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Бакулин И.К.<sup>1,2</sup><sup>1</sup> *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),  
Долгопрудный, Россия*<sup>2</sup> *Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия  
e-mail: bakulin.ik@phystech.edu*

Диоксан является широко распространенным промышленным растворителем, обладающим рядом важных свойств. Например, диоксан способен смешиваться с водой в любых мольных соотношениях. В силу этого, исследование структуры водного раствора диоксана представляет большой научный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения. Метод молекулярной динамики позволяет исследовать характеристики раствора, недоступные экспериментальным техникам, а также способен проверить соответствие существующих силовых полей экспериментальным результатам.

В настоящей работе [1] проводится сравнительный анализ сетей водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана в силовых полях Смита [2] и OPLS-AA/CM1A [3] с моделью воды TIP4P. Рассчитывается общее число водородных связей на атом кислорода и удельное число водородных связей вода-вода и диоксан-вода, полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рентгеновскому рассеянию [4]. Вводится геометрический критерий перколяции сети водородных связей. Положения рассчитанных порогов перколяции сравниваются с экспериментом по широкополосной диэлектрической спектроскопии [5]. Расчеты проводятся в программном пакете LAMMPS, анализ молекулярно-динамических траекторий осуществляется с помощью программных пакетов TRAVIS и MDAnalysis.

Оба силовых поля хорошо описывают экспериментальные данные [4] по общему числу водородных связей на атом кислорода. Однако различия в сетях водородных связей между используемыми моделями наблюдаются только в анализе удельных чисел водородных связей вода-вода и диоксан-вода. Заниженные значения числа связей вода-вода в модели OPLS-AA/CM1A согласуются с занижением энтальпии растворения [6]. Оба силовых поля адекватно воспроизводят эксперимент [5] по нижнему порогу перколяции сети водородных связей. В отличие от OPLS-AA/CM1A, начало перколяции в модели Смита очень близко к экспериментальному верхнему порогу перколяции. При низких концентрациях диоксана в растворе присутствуют кластеры из 2-3 молекул диоксана, что согласуется с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей [4]. Силовое поле OPLS-AA/CM1A демонстрирует менее выраженную сеть молекул диоксана при мольных долях  $\geq 0.20$ .

*Автор благодарит Кондратюка Н.Д., Копаничука И.В. и Нормана Г.Э. за продуктивные научные дискуссии и наставления.*

## Литература:

- [1] Bakulin I. K. et al., Molecular-level insights to structure and hydrogen bonds network of 1, 4-dioxane aqueous solution, J. Mol. Liq., 393,123523, (2024).
- [2] Smith G.D. et al., A revised quantum chemistry-based potential for poly (ethylene oxide) and its oligomers in aqueous solution, J. Comput. Chem., 23(15), 1480-1488, (2002).
- [3] Jensen K.P., Jorgensen W.L., Halide, ammonium, and alkali metal ion parameters for modeling aqueous solutions, J. Chem. Theory Comput., 2(6), 1499-1509, (2006).
- [4] Takamuku T. et al., Structure and dynamics of 1, 4-dioxane-water binary solutions studied by X-ray diffraction, J. Mol. Liq., 83(1-3), 163-77, (1999).
- [5] Hernandez-Perni G. et al., Detection of percolation phenomena in binary polar liquids by broadband dielectric spectroscopy, Int. J. Pharm., 291(1-2), 197-209, (2005).
- [6] Bakulin I. et al., Properties of aqueous 1, 4-dioxane solution via molecular dynamics, J. Chem. Phys., 155(15), 154501, (2021).



Устный доклад

# ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВАРИАНТОВ АППРОКСИМАЦИЙ БИНАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ РАСЧЁТОВ ФУНКЦИОНАЛА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ЗОЛЯ СО СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНЫМИ ЧАСТИЦАМИ В МОДЕЛИ ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

Бриков Е.С.

625002, Россия, Тюменская область, г. Тюмень, ул. Свердлова, дом 22, кв. 20  
e-mail: brikov@mail.ru

Рассматриваются версии использования аппроксимаций радиальной (бинарной) корреляционной функции на основе наборов: нецентральных хи-квадрат распределений с двумя степенями свободы [1-5]; функций Эрмита [4]; с учётом квазикристаллического подхода [2, 4, 5] для целей выполнения структурного анализа и вычислений согласованных термодинамических свойств золя со сферически симметричными частицами с Леннард-Джонса парным взаимодействием в модели простой жидкости посредством вариационного принципа функционала свободной энергии по радиальной (бинарной) корреляционной функции второго порядка в классической равновесной статистической механике в трёхмерном пространстве [1, 4, 5].

Выполнено предварительные сравнения параметров первого максимума корреляционной функции второго порядка (бинарной и радиальной), полученных в “гиперцепном” (HNC) приближении при экстремальных значениях указанного функционала свободной энергии [1, 4, 5], с результатами метода молекулярной динамики [6], см. таблицу [4].

**Таблица.** Сравнение высот 1-ого структурного максимума радиальной (бинарной) функции распределения  $g(r)$ , которая соответствует радиальной (бинарной) корреляционной функции  $h(r)$ , и которая получена оценочным прямым вариационным методом функционала свободной энергии в «гиперцепной» (HNC) аппроксимации [1, 4, 5] с полученной из экспериментов по молекулярной динамике [6].

| №  | Прямой вариационный метод, использующий предложенные аппроксимации радиальной (бинарной) корреляционной функции $h(r)$ [1, 4, 5]. |        |           | Результаты метода молекулярной динамики для радиальной (бинарной) функции распределения $g(r)$ : $g(r) = h(r) + I$ [6]. |      |        |           |           |
|----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|--------|-----------|-----------|
|    | $T$                                                                                                                               | $\rho$ | $h_{max}$ | $h_{max}$                                                                                                               | $T$  | $\rho$ | $r_{max}$ |           |
| 1. | 2.64                                                                                                                              | 0.85   | 1.21      | 2.22                                                                                                                    | 2.75 | 0.835  | 1.038     | в среднем |
| 2. | 2.68                                                                                                                              | 0.55   | 0.82      | 1.754                                                                                                                   | 2.75 | 0.55   | 1.07      | в среднем |

Представлен пример фитинга корреляционной функции второго порядка (бинарной и радиальной), которая получена методами молекулярной динамики [6], посредством суммы с весами набора нецентральных хи-квадрат распределений с двумя степенями свободы [4-5].

Приводятся перспективные алгоритмы вычислений многоцентровых интегралов, которые входят в выражения ряда диаграмм функционала свободной энергии по бинарной корреляционной функции второго порядка (бинарной и радиальной) [1], с помощью указанных аппроксимаций [4].

## Литература:

- [1] E. Arinshstein, Direct Variational Method in the Theory of Liquid, Theoretical and Mathematical Physics, 141, 1461-1468, (2004).
- [2] J. Ziman, Models of Disorder: the theoretical physics of homogeneously disordered systems (Cambridge University Press, New York), (1979).
- [3] S. Press, Linear Combinations of Non-Central Chi-Square Variates, The Annals of Mathematical Statistics, 37(2), 480-487, (1966).
- [4] E. Brikov, In: Integral Methods in Science and Engineering, IMSE 2022. Constanda, C., Bodmann, B.E., Harris, P.J. (eds) (Birkhäuser, Cham), On a Variational Principle for Equilibrium Free Energy Functional of Simple Liquids, (2023).
- [5] E. Arinshstein, A Model of the Liquid–Crystal Phase Transition and the Quasicrystal Model of Liquid, Theoretical and Mathematical Physics, 151, 571-585, (2007).
- [6] J. Johnson, J. Zollweg and K. Gubbins, The Lennard-Jones equation of state revisited, Molecular Physics, 78(3), 591–618, (1993).

Устный доклад

# МЕХАНИЗМ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ ЛЬДАМИ III И V И ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ДАВЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛЬДОВ

[Желиговская Е.А.](#)

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Россия,  
119071, Москва, Ленинский просп., д. 31, к. 4  
e-mail: [Imm@phyche.ac.ru](mailto:Imm@phyche.ac.ru)

В настоящей работе, которая является продолжением ряда работ по изучению структурных механизмов переходов между кристаллическими водными льдами [1 и приведенные там ссылки], исходя из строения льдов III и V предложен структурно-диффузионный механизм переходов между ними.

Показано, что структуры льдов III и V состоят из почти одинаковых структурных единиц, отличающихся только одной дополнительной связью у льда V, что объясняется более высоким давлением его кристаллизации из жидкости. В обеих структурах эти структурные единицы складываются в одинаковые хиральные слои. Структура льда III энантиоморфна и состоит из сложенных в стопку слоев одного знака хиральности, связанных между собой через общие атомы. Структура льда V хирально нейтральна и состоит из сложенных в стопку чередующихся правых и левых слоев. Здесь соседние слои связаны водородными связями, которые молекулы одного слоя образуют с молекулами другого слоя.

Предположен следующий структурно-диффузионный механизм переходов между этими льдами. При переходе льда V в III (1) рвутся связи между слоями и дополнительные (по сравнению со льдом III) связи в структурных единицах, (2) сохраняются все четные слои (пусть это правые слои), а из каждой структурной единицы нечетных (левых) слоев уходят две определенные молекулы воды, (3) нечетные слои меняют свою конформацию на конформацию правых слоев, (4) четные и нечетные слои объединяются через общие атомы в правую структуру льда III. При таком механизме из структуры льда V должна уйти 1/7 молекул воды, а оставшиеся молекулы воды сохраняют 2/3 своих исходных водородных связей. Ушедшие молекулы воды могут образовывать новые слои структуры льда III, но уже по диффузионному механизму.

Обратный переход III в V происходит по аналогичному механизму. Однако в этом случае в структуру льда III нужно добавить еще 1/6 от исходного числа молекул воды (для чего можно, например, разрушить полностью 1/7 всех слоев льда III), причем исходные молекулы воды сохраняют 2/3 своих исходных водородных связей.

Предложенный структурный механизм позволяет естественным образом сохранить максимальную общую подгруппу групп симметрии структур льдов III и V.

Структуру льда Ih можно рассматривать как состоящую из шестизвенных циклов в конформации «кресло». Структурная единица льда III, соответствующая более высокому давлению, состоит из шестизвенного цикла в конформации «твист-ванна», фиксированной седьмой молекулой. В результате в ней содержатся два пятизвенных цикла. При еще большем давлении структурная единица льда III переходит в структурную единицу льда V через образование дополнительной связи внутри шестизвенного цикла и, соответственно, двух четырехзвенных циклов. Лед VI, образующийся при еще большем давлении, состоит из цепочек шестизвенных циклов с двумя дополнительными связями внутри них. Наконец, укладка молекул воды во льду VII определяется компромиссом между плотнейшей упаковкой и тетраэдрическим характером водородных связей, что приводит к объемноцентрированной укладке молекул.

Кластеры из молекул воды, образующиеся в жидкой фазе вблизи кривой плавления воды [2], могут формироваться из структурных единиц, соответствующих заданному давлению.

## Литература:

- [1] E.A. Zheligovskaya, G.A. Lyakhov. Structural Mechanisms of Transitions between Ices with Different Densities – Features of Water Phase Diagrams. *Phys. Wave Phenom.* 32 (3), 209–219 (2024).
- [2] G.A. Lyakhov, I.A. Shcherbakov, and M. A. Shermeneva. Layering Phase Transition in a Liquid Solution with Cross Hydrogen Bonds: Bond Number Density as the Second Order Parameter. *Phys. Wave Phenom.* 28 (3), 236–240 (2020).

Устный доклад

# КОНФОРМАЦИОННАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЫ САХАРОЗЫ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

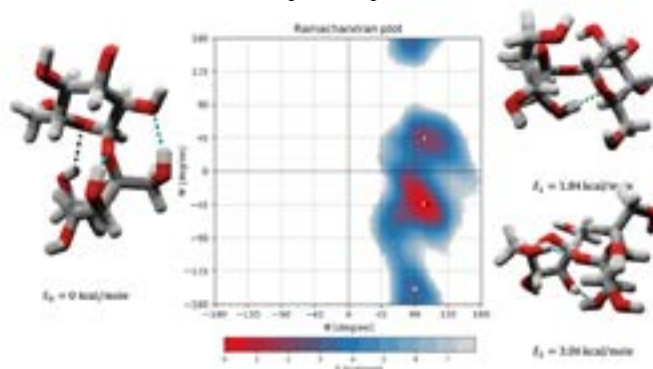
Дещеня В.И.,<sup>1</sup> Кондратюк Н.Д.,<sup>1,2,3</sup> Ланкин А.В.,<sup>2,1</sup> Норман Г.Э.<sup>3,2,1</sup><sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.<sup>2</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2<sup>3</sup> Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики",

101000, г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20

e-mail: kondratyuk.nd@mipt.ru

Изучение структурных характеристик молекулы сахарозы в воде имеет практическое значение для ряда задач. Конформация молекул и образование водородных связей определяют свойства продуктов в пищевой промышленности, а также возможность стабилизации белка в растворе, что важно для фармацевтической области.

Экспериментальное изучение конформации сахарозы в водном растворе является сложной задачей из-за быстрых структурных изменений. Эффективным инструментом для таких исследований является метод молекулярной динамики. Однако он требует подходящего для системы потенциала, а поиск такового для растворов углеводов ведется до сих пор [1]. За последние пять лет были предложены несколько потенциалов, которые аккуратно воспроизводят взаимодействия в водных растворах моно-, ди- и полисахаридов [1-3].



В работе используется потенциал межатомного взаимодействия, который показал хорошую воспроизводимость экспериментальных коэффициентов диффузии и вязкости [3], для исследования конформаций молекулы сахарозы в водном растворе. Из анализа траекторий получено нескольких устойчивых конформаций гликозидной связи (показаны на рисунке выше), что согласуется с более ранними вычислительными работами [4]. Показано, что наиболее стабильная конформация ближе всех находится к кристаллической [5], что подтверждается экспериментальными данными [6]. Для каждой конформации рассчитаны времена жизни и выявлены водородные связи, стабилизирующие её.

Исследование поддержано Программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 75-15-2024-200 от 06.02.2024).

## Литература:

- [1] S.H. Jamali, T. Westen, O.A. Moulton and T.J.H. Vlucht, Optimizing Nonbonded Interactions of the OPLS Force Field for Aqueous Solutions of Carbohydrates: How to Capture Both Thermodynamics and Dynamics, J. Chem. Theory Comput. V.14, No. 12. P. 6690-6700 (2018).
- [2] W.K. Lay, M.S. Miller and A.H. Elcock, Optimizing solute-solute interactions in the GLYCAM06 and CHARMM36 carbohydrate force fields using osmotic pressure measurements, J. Chem. Theory Comput., V. 12, No. 4, P. 1401-1407 (2016).
- [3] V.I. Deshchenya, N.D. Kondratyuk, A.V. Lankin and G.E. Norman, Molecular dynamics study of sucrose aqueous solutions: From solution structure to transport coefficients, J. Mol. Liq., V. 367, P. 120456 (2022).
- [4] J. Xia and D.A. Case, Sucrose in Aqueous Solution Revisited: 2. Adaptively Biased Molecular Dynamics Simulations and Computational Analysis of NMR Relaxation, Biopolymers, V. 97, No. 5, P. 289-302 (2012).
- [5] G.M. Brown and H.A. Levy, Sucrose: Precise determination of crystal and molecular structure by neutron diffraction, Science, V.141, N. 3584, P. 921-923 (1963).
- [6] D.G.B. Silva, F. Hallwass and A. Navarro-Vázquez, Single experiment measurement of residual dipolar couplings in aqueous solution using a biphasic bisperylene imide chromonic liquid crystal, Magn Reson Chem., V. 59, No. 4, P. 408-413 (2021).

Устный доклад

# СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ В РАСТВОРАХ КАК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ВОЛНОВЫМ ФУНКЦИЯМ

Манько В.И.

Физический институт имени П Н Лебедева РАН  
e-mail: [mankovi@lebedev.ru](mailto:mankovi@lebedev.ru)

При обсуждении процессов растворения [1, 2], (в частности, в воде) различных веществ квантовые состояния молекул веществ описываются волновыми функциями, например, осцилляторов или кубитов. В докладе рассматривается возможность задавать эти состояния распределениями вероятностей. Представлены примеры квантового осциллятора и кубита (спин-1/2), а также обсуждается состояние кудитов (произвольных спинов). Дан обзор построения в явном виде условных распределений вероятностей состояний осцилляторов, их матрицы плотности, а также волновые функции чистых состояний квантовых систем. Обсуждается распределение вероятностей, задающее квантовое состояние осциллятора с переменной частотой, используемое в модели растворения вещества в сосуде при его встряхивании [3]. Мы опишем матричные элементы матрицы плотности кубита, выразив их через вероятности спинов на направления осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Так, верхний элемент первого столбца эрмитовой матрицы плотности есть вероятность положительной проекции спина на направление оси  $z$ . Нижний элемент первого столбца эрмитовой матрицы плотности есть комплексное число, причем его действительная часть есть половина разности вероятностей положительного и отрицательного значений проекций спина на направление оси  $x$ , а мнимая часть есть половина разности вероятностей положительного и отрицательного значений проекций спина на направление оси  $y$ . Второй столбец эрмитовой матрицы плотности кубита определяется описанными элементами первого столбца. Данное рассмотрение может быть использовано при обсуждении технологий, включающих взаимодействие квантовых систем (молекул) и их свойств при классическом воздействии (встряхивание сосудов) при растворении. Пионерский вклад этих результатов в понимании квантовых и классических процессов в квантовой механике и их применениям в современных квантовых технологиях отмечен в связи со 100-летним юбилеем квантовой механики [4].

## Литература:

- [1] G. A. Lyakhov, V. I. Man'ko, and I. A. Shcherbakov, "Action of classical fields on quantum systems within the Schrödinger–Robertson uncertainty relation," *Phys. Wave Phenom.* 30 (3), 169–173 (2022). <https://doi.org/10.3103/S1541308X22030049>
- [2] G. A. Lyakhov, V. I. Man'ko, N. V. Suyazov, I. A. Shcherbakov, and M. A. Shermeneva, "Physical mechanisms of activation of radical reactions in aqueous solutions under mechanical and magnetic effect: Problem of singlet oxygen," *Phys. Wave Phenom.* 30 (3), 174–181 (2022). <https://doi.org/10.3103/s1541308x22030050>
- [3] G. A. Lyakhov, V. I. Man'ko, I. A. Shcherbakov, and N. V. Suyazov, "Impact of Classical Vibrations and Magnetic Fields on Quantum Objects," *Physics of Wave Phenomena*, 2024, Vol. 32, No. 2, pp. 67–72. ISSN 1541-308X, Physics of Wave Phenomena, © Allerton Press, Inc., 2024.
- [4] M.A. Man'ko, "Comments on 100 Years of Quantum Mechanics: New Results in Its Understanding and Applications in Modern Quantum Technologies," *J. Russ. Laser Res.*, 45, 251–257 (2024). <https://doi.org/10.1007/s10946-024-10209-2>

Устный доклад

# О МНОЖЕСТВЕ ЛОКАЛЬНО РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МУЛЬТИАТОМНОГО КЛАСТЕРА

Плохотников К.Э.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, ГСП-1, Москва Ленинские горы,  
МГУ имени М.В. Ломоносова Дом 1, строение 2, Физический Факультет

<sup>2</sup> Финансовый университет при Правительстве РФ,  
125167, Москва, проспект Ленинградский, д. 49/2  
e-mail: lpsygma@yandex.ru

В докладе обсуждается вопрос о множестве (единственности) локально равновесных конфигураций потенциальной энергии мультиатомного кластера. Молекулярная система, состоящая из множества, вообще говоря, разных атомов, именуется мультиатомным кластером. Предлагается формализм построения всей линейки многочастичных потенциалов для описания произвольной молекулярной системы. Вводятся и обсуждаются понятия “матрицы формы” или “морфы” для каждого из многочастичных потенциалов. Определяется алгоритм построения функции потенциальной энергии мультиатомного кластера так, чтобы можно было бы говорить о построении вполне определенной конфигурации атомов кластера, как о единственно возможной. Данный алгоритм рассматривается как способ решения проблемы выбора конфигурации атомов кластера в качестве локально равновесной при классическом формате описания. Подробно изучаются множества локально равновесных конфигураций бинарного и многочастичного потенциала максимальной частичности. Рассмотрено также множество локально равновесных конфигураций линейной комбинации бинарного и многочастичного потенциалов. Показано, что в последнем случае множество локально равновесных конфигураций определяется главным образом бинарным потенциалом. Общие построения и выводы иллюстрируются на примерах воспроизводства в качестве локально равновесных стандартных конфигураций молекул воды, метана, этилена и бензола. Строятся подходящие потенциалы, имеющие указанные конфигурации в качестве глобальных минимумов. На примерах описания кластеров воды, бензола и углерода исследуется вопрос о причинах появления множества локально равновесных конфигураций. Обсуждается алгоритм построения сложной, композитной матрицы формы для кластеров, состоящих из множества одинаковых молекул. Использование понятия “матрицы формы” позволяет естественным образом учесть в молекулярной системе всевозможные целостные субъединицы, а также описать пределы, в рамках которых эти целостности воспроизводятся в неизменном виде. По мнению автора понятие матрицы формы, компактный и естественный формат описания мультиатомного кластера, имеющий перспективный потенциал обобщения. Кроме того, это понятие позволит в известном смысле решить проблему выбора решений из множества возможных при описании молекулярных систем.

**Ключевые слова:** кулоновская потенциальная энергия, локально равновесные конфигурации, проблема выбора решений, мультиатомный кластер, вычислительный эксперимент, градиентный спуск, многочастичные потенциалы, матрица формы, морфа.



Устный доклад

# ПАРАМЕТРЫ АССОЦИИИ СПИРТОВ И ВОДЫ ОПРЕДЕЛЕННЫЕ ПО КИНЕТИКЕ РЕАКЦИИ ОКСИЭТИЛИРОВАНИЯ. О МАКСИМУМЕ СКОРОСТИ ЗВУКА В ВОДЕ

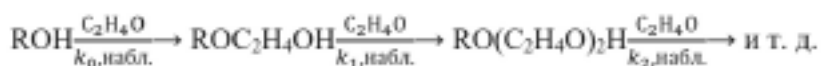
Стуль Б.Я.

ООО «НПП «НефтеСервисКомплект»

e-mail: b.st@mail.ru

Объектами исследования были спирты  $C_1$ - $C_7$  (включительно),  $C_{10}$  и вода. Температура для спиртов была в пределах 60-180 °С, для воды 90-150 °С. Давление 1,4 МПа.

Реакция оксиэтилирования спиртов может быть представлена следующей схемой



Это необратимая последовательная по спирту реакция, которая может иметь много стадий, но в данном случае речь, в основном, идёт о первой стадии реакции, характеризуемой константой скорости  $k_{0, \text{набл.}}$ .

Из литературных данных известно, что скорость этой реакции в условиях основного катализа на начальном участке для первичных спиртов нормального строения имеет первые порядки по концентрациям оксида этилена и катализатора. Ожидаемый также первый порядок по концентрации спирта не наблюдается. Это связывают с ассоциацией чаймолекул спирта за счёт образования водородных связей.

В результате наших исследований удалось показать [1,2], что скорость реакции оксиэтилирования данных спиртов, которые как известно, существуют в виде линейных цепочечных ассоциатов, имеет первый порядок не по концентрации мономерных молекул спирта, а по концентрации этих ассоциатов. Для проточного реактора идеального смешения уравнение имеет вид (1)

$$W = (C_0 - C_{\infty})/\tau = k_{0, \text{набл.}} C_0 (C_0 - nC_1) \quad (1)$$

где все обозначения понятны, а  $n$ -зависящая от температуры и концентрации спирта константа, которая представляет из себя число молекул спирта в линейном цепочечном спиртовом ассоциате.

Таким образом исследуя кинетику реакции оксиэтилирования спиртов, наряду с кинетическими параметрами реакции, можно находить параметры ассоциации спиртов, их температурные зависимости, поведение в растворителях, структурные переходы и т. д.

Для спиртов  $C_1$  и  $C_{10}$  наблюдается изменение трендов температурных зависимостей параметра  $n$ , что соответствует изменению трендов температурных зависимостей ряда физико-химических и спектральных свойств этих спиртов.

Для гидрофобных спиртов  $C_4$ - $C_7$  с ростом температуры параметр  $n$  уменьшается. Для гидрофильных спиртов и воды параметр  $n$  увеличивается с ростом температуры. Для воды это явление позволяет понять, почему скорость звука в воде имеет максимум при  $t \approx 70$ -80 °С.

## Литература:

1. Стуль Б.Я. // Журнал физической химии. Кинетика реакции оксиэтилирования  $n$ -деканола с учётом влияния ассоциации. Т. 90. №4. С. 532-538 (2016).
2. Стуль Б.Я. // Журнал физической химии. Кинетика реакции оксиэтилирования метанола с учётом влияния ассоциации. Т. 94. № 3. С. 411 – 417 (2020).

Устный доклад

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЭТАНОЛА

Федосеев Т.В.<sup>1,2\*</sup>, Богдан Т.В.<sup>1,3</sup>, Коклин А.Е.<sup>1</sup>, Богдан В.И.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Россия, 119991, Москва, ленинский проспект, 47

<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», Химический факультет, Россия, 119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1 стр. 3  
e-mail: vfkbuyec@gmail.com

Критические параметры водно-органических растворов необходимы для создания эффективных флюидных химических технологий. Для воды переход в сверхкритический режим наблюдается при давлениях, превышающих 22 МПа, тогда как для этанола и его смесей с водой данный переход уже возможен при давлениях 12 МПа [1]. В частности, для интенсификации процессов экстракции лигнина водно-этанольными смесями представляется целесообразным провести анализ областей температур и давлений, в которых происходит переход растворов в сверхкритическое состояние. Для этой цели можно воспользоваться зависимостью плотности флюида от температуры и давления. Свойство резкого изменения плотности при переходе в сверхкритические условия может быть использовано для точного определения температуры перехода [2]. Эти фундаментальные выводы послужили основой для разработки методики определения критических параметров водно-этанольных смесей.

Плотность и энтропия водно-этанольных растворов (51 мас.% этанола) были рассчитаны с использованием уравнения состояния Пенга-Робинсона [3] с помощью программного комплекса COCO simulator [4]. Был рассмотрен диапазон температур от 298 К до 823 К при давлении 3.2 МПа и 13.0 МПа. На температурной зависимости плотности водно-этанольной смеси при давлении 3.2 МПа имеется разрыв. При давлении 13,0 МПа разрыв отсутствует. Переход водно-этанольной смеси в критическое состояние происходит при 520 – 570 К. Наблюдается аналогичное поведение температурной зависимости энтропии водно-этанольной смеси. При давлении 3,2 МПа имеется разрыв, а при давлении 13.0 МПа разрыв отсутствует. Определены условия для фазового перехода второго типа. Получено, что переход в сверхкритический режим раствора этанола 51 масс% происходит при 573 К. Полученные данные позволят можно использовать для выбора условий деполимеризации лигнина.

## Литература:

[1] CRC Handbook of Chemistry and Physics. 102nd Ed. / ed. Rumble J.R. Boca Raton, FL: CRC Press, 2021.

[2] Tsai J.-C., Chen Y.-P. Application of a volume-translated Peng-Robinson equation of state on vapor-liquid equilibrium calculations // Fluid Phase Equilib. 1998. Vol. 145. P. 193-215.

[3] D.Y. Peng, D. B. Robinson, A New Two-Constant Equation of State, Industrial and Engineering Chemistry: Fundamentals 15 (1976) 59–64. <https://doi.org/10.1021/i160057a011>. S2CID 98225845.

[4] COCO simulator software. <https://www.cocosimulator.org/index.html>

Устный доклад

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ В ПРЕВРАЩЕНИЯХ МЕЖДУ АМОРФНЫМИ ЛЬДАМИ НИЗКОЙ И ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ

Шуплецова А.А.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт высоких температур РАН,  
г. Москва, ул. Ижорская, дом 13 строение 2

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Институтский переулок, дом 9

<sup>3</sup> Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики",  
г. Москва, ул. Мясницкая, дом 20  
e-mail: a.garkul@mail.ru

Две различные формы аморфного льда - высокой и низкой плотности - уже давно привлекают интерес ученых, применение их широко распространено в криоконсервации, кроме того, важно его технологическое применение, например, в криоэлектронной микроскопии и электронно-лучевая литографии. Особенно интересны их взаимные превращения индуцированные давлением, которые во многом напоминают фазовый переход первого рода. Несмотря на то, что эти фазы не являются термодинамически устойчивыми, существует множество как теоретических, так и экспериментальных доказательств, подтверждающих эту гипотезу. В частности, скачок плотности и гистерезис проявляются во многих исследованиях. Но такая характерная особенность переходов первого рода, как нуклеация, ранее мало обсуждалась в литературе. Предполагается, что "зародыши новой фазы" в таких превращениях слишком малы, чтобы экспериментально наблюдать их образование [1].

В данной работе рассматриваются превращения между аморфными льдами низкой и высокой плотности, индуцированные давлением, в рамках метода классической молекулярной динамики для модели воды TIP4P/Ice [2]. Предложен дескриптор для классификации локальной структуры и алгоритм, по которому можно выявить кластеры одного аморфного льда внутри другого. Это позволяет увидеть процесс образования и роста кластеров новой фазы в процессе взаимных превращений между аморфными льдами высокой и низкой плотности и визуально оценить размер "критических зародышей" [3]. Обсуждается эффективность предложенного дескриптора и перспективы.

## Литература:

- [1] C. Tonaer, M. Seidl-Nigsch, T. Loerting High-density amorphous ice: Nucleation of nanosized low-density amorphous ice // Journal of Physics: Condensed Matter. 2017. – V. 30(3). P. 034002.
- [2] J. L. Abascal, E. Sanz, R. García Fernández, C. Vega et al. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice // The Journal of chemical physics. 2005. – V. 122(23). P. 234511.
- [3] A. Garkul, V. Stegailov Molecular dynamics analysis of elastic properties and new phase formation during amorphous ices transformations. (2022) // Scientific Reports. 2022. V. 12(1). P. 13325.

|                 |     |                   |          |
|-----------------|-----|-------------------|----------|
| Feldman Y.D.    | 6   | Джимак С.С.       | 15       |
| Galindo C.      | 83  | Евстигнеев М.П.   | 8        |
| Medvedev O.S.   | 24  | Желиговская Е.А.  | 103, 111 |
| Sukul A.C.      | 25  | Жмурин В.А.       | 27       |
| Yao Xu          | 13  | Задорожный Е.Н.   | 85       |
| Абатурова Н.А.  | 94  | Зеников Г.Р.      | 45       |
| Бакулин И.К.    | 109 | Зиннуров Б.Д.     | 53       |
| Баранова Е.Н.   | 14  | Зубарев Р.А.      | 60       |
| Барбин Н.М.     | 95  | Кадиров Ш.А.      | 96       |
| Белега Е.Д.     | 84  | Кашурин О.В.      | 46       |
| Богатов Н.А.    | 101 | Кернбах С.В.      | 79       |
| Богдан Т.В.     | 75  | Кладиев А.А.      | 68       |
| Болоцкова П.Н.  | 76  | Кольтовер В.К.    | 16       |
| Бражкин В.В.    | 7   | Кондратюк Н.Д.    | 112      |
| Бриков Е.С.     | 110 | Кононов Л.О.      | 17       |
| Бункин Н.Ф.     | 77  | Константинов Р.Р. | 86       |
| Вайнер Ю.Г.     | 78  | Крайский А.В.     | 47       |
| Васильев В.Г.   | 57  | Крылов А.В.       | 9        |
| Васильева И.Н.  | 58  | Кузьменко Е.Е.    | 69       |
| Волошин В.П.    | 102 | Кузьмин В.И.      | 41       |
| Галкина Д.А.    | 63  | Курьяков В.Н.     | 97       |
| Галль И.Р.      | 43  | Кустов А.В.       | 70, 87   |
| Горовой Ю.М.    | 44  | Леденев О.В.      | 64       |
| Горудко И.В.    | 26  | Лесин В.И.        | 28       |
| Горяинов С.В.   | 59  | Лобышев В.И.      | 18       |
| Григорьева Д.В. | 37  | Манько В.И.       | 113      |
| Дементьева О.В. | 40  | Мartiнович Г.Г.   | 19       |

|                  |            |                |        |
|------------------|------------|----------------|--------|
| Марченкова Л.А.  | 71         | Стуль Б.Я.     | 115    |
| Махамадиев М.Т.  | 104        | Суворова О.В.  | 49     |
| Мойса С.С.       | 29, 88     | Сыроешкин А.В. | 61     |
| Молькова Е.А.    | 30         | Тарарушкин Е.  | 50     |
| Мотовилов К.А.   | 20         | Тарасова А.А.  | 38     |
| Нагаев Е.И.      | 31         | Тимченко С.Л.  | 93     |
| Назаренко Ю.В.   | 105        | Успенская Е.В. | 62     |
| Назаров А.А.     | 72         | Федосеев Т.В.  | 116    |
| Некрасова Н.В.   | 54         | Фомин Ю.Д.     | 107    |
| Новаковская Ю.В. | 21         | Ходан А.Н.     | 42     |
| Овчинников Д.А.  | 98         | Циок Е.Н.      | 108    |
| Офицеров Е.Н.    | 66         | Шуплецова А.А. | 117    |
| Пеньков Н.В.     | 22, 32     | Юсим В.А.      | 51, 52 |
| Першин С.М.      | 80, 89, 90 | Яблонская О.И. | 35     |
| Петров Г.В.      | 67         | Яглова Н.В.    | 36     |
| Плохотников К.Э. | 114        |                |        |
| Рахманин Ю.А.    | 10         |                |        |
| Родионова Н.Н.   | 34         |                |        |
| Рожкова Н.Н.     | 23         |                |        |
| Рыжкина И.С.     | 81         |                |        |
| Рыжов В.Н.       | 106        |                |        |
| Сабиров Л.М.     | 91         |                |        |
| Саркисян В.К.    | 48         |                |        |
| Смирнов Г.С.     | 55         |                |        |
| Стась И.Е.       | 99         |                |        |
| Степанов Е.В.    | 82         |                |        |
| Степанов С.В.    | 92         |                |        |





Физика  
Водных  
Растворов

