



ИБХФ РАН - 2022

Итоги

НАГРАЖДЕНИЕ СОТРУДНИКОВ ИБХФ РАН ГОСУДАРСТВЕННОЙ НАГРАДОЙ Российской Федерации в 2022 г.

Медаль ордена «За заслуги перед Отечеством» II степени



- Голощапов Александр Николаевич
- Корман Давид Борисович
- Кузьмин Владимир Александрович



НАГРАЖДЕНИЕ СОТРУДНИКОВ ИБХФ РАН ВЕДОМСТВЕННОЙ НАГРАДОЙ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в 2022 г.

Нагрудный знак "Ветеран" Министерства науки и высшего образования РФ

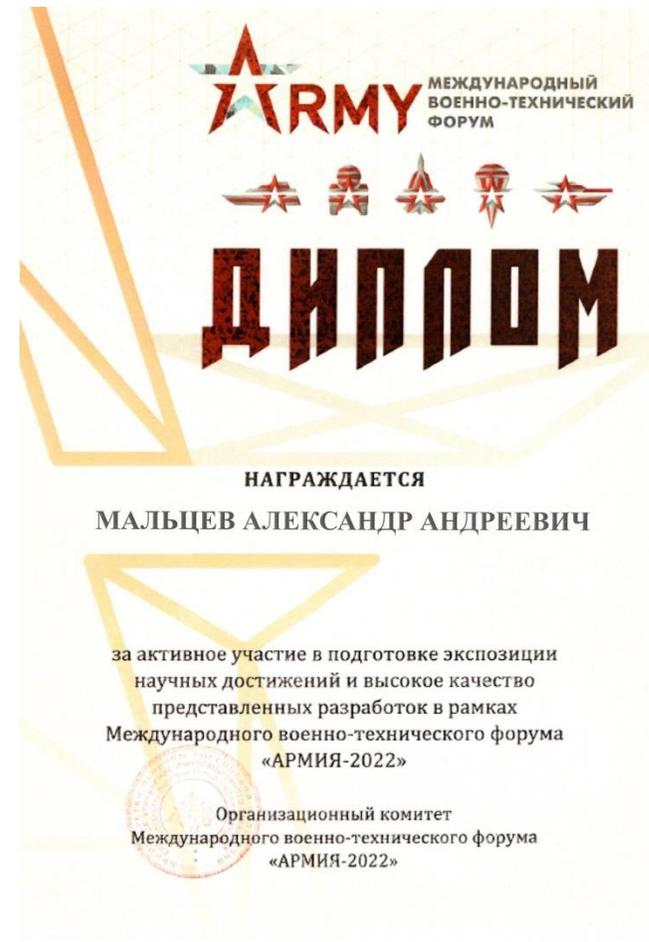


**Дудник Л.Б., главный специалист,
доктор биологических наук**

**Подмастерьев В.В., старший научный
сотрудник, кандидат химических наук**

Участие ИБХФ РАН в международном военно-техническом форуме Армия - 2022

Разработка композиционных полимерных материалов с управляемыми свойствами для адаптивных многоспектральных защитно-маскировочных покрытий ВВСТ видов и родов войск



Важнейшие достижения лабораторий ИБХФ - 2022

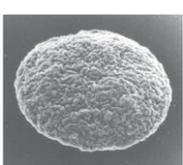
Лаборатории физико-химических основ рецепции
(зав. лаб. акад., д.б.н., проф. М.А. Островский)

Основная тематика:

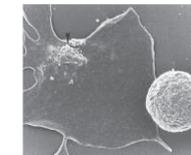
«Физико-химические основы зрительной рецепции»

Основные научные направления:

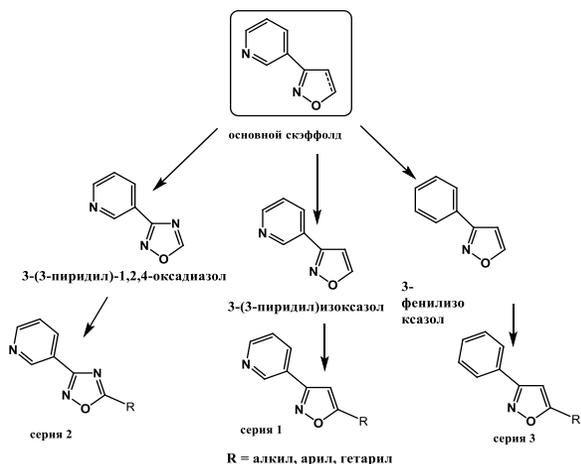
- 1. Фотохимия и фотобиология ретиналь-содержащих белков – зрительного и микробиального родопсинов**
- 2. Фото- и радиобиология ретиноид-содержащих структур в клетках ретинального пигментного эпителия**
- 3. Фотобиология меланин-содержащих структур в клетках ретинального пигментного эпителия.**
- 4. Механизмы старения структур глаза на модели ускоренного старения (японский перепел)**



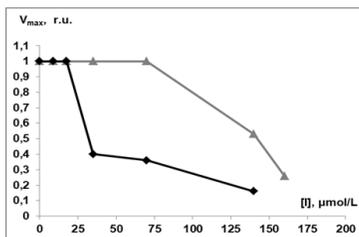
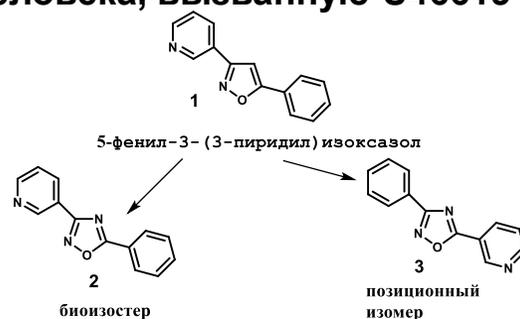
Потенциальные прототипы антитромбоцитарных средств и их влияние на тромбоциты человека (лаборатория 0501, отв. исполнитель – Демина О.В.)



Основные модификации скэффолда



Влияние 3 соединений на агрегацию тромбоцитов человека, вызванную U46619



Зависимость V_{max} от концентрации ингибитора для соед (1) (черная кривая) и соединения (2) (серая кривая) в суспензии отмытых тромбоцитов человека, U46619

Продолжены исследования потенциальных прототипов антитромбоцитарных средств на основе 3,5-замещенных изоксазолов и их аналогов:

- исследовали пространственные ограничения для объемных заместителей в положении 5 изоксазольного кольца для серий 1 и 2;

Для серии 1 диапазон IC_{50} составил 8×10^{-6} - $4,2 \times 10^{-4}$ М при использовании арахидоновой кислоты (АА) [Демина О.В. др. / Патент РФ № 2726127 (09.07.2020)]

- для выявления наиболее активного скэффолда использовали 3-(3-пиридил)-5-фенилизоксазол, его позиционный изомер и биоизомер. Все вещества подавляли агрегацию, вызванную миметиком тромбоксана A_2 U46619 или АА;

- впервые показано, что позиционный изомер обладает антитромбоцитарной активностью, подавляя агрегацию тромбоцитов человека, вызванную U-46619 или арахидоновой кислотой: при использовании U46619 IC_{50} для соед. 3 > IC_{50} для соед. 2 > IC_{50} для соед. 1, равной 60 ± 5 мкмоль/л (более 8 экспериментов).

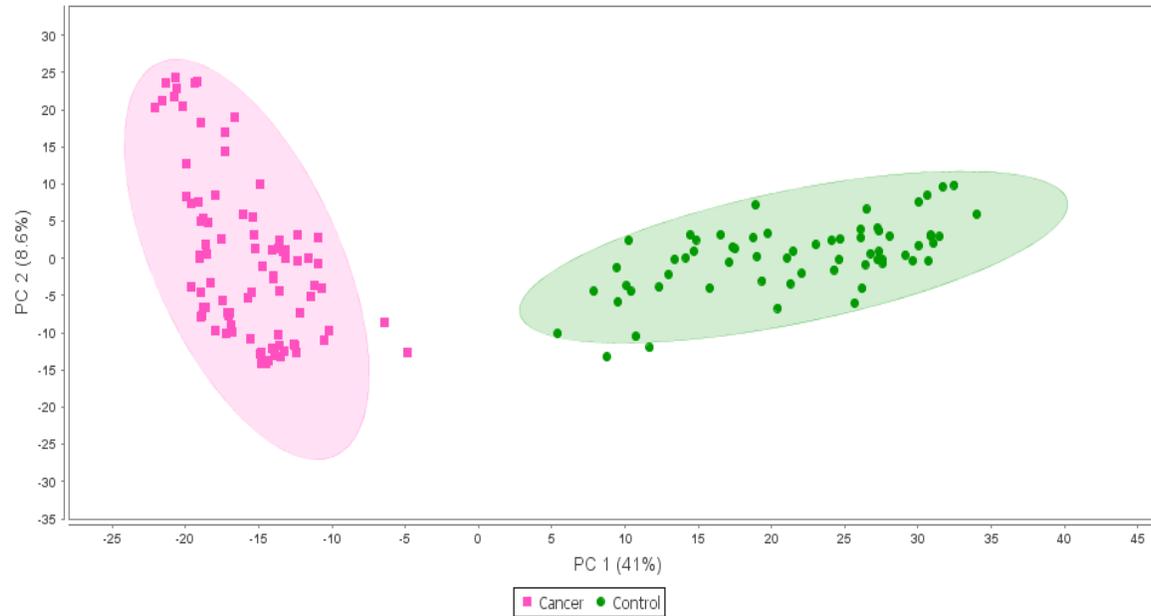
- [Беликов Н.Е., Ходонов А.А., Варфоломеев С.Д., Демина О.В. / Материалы XXI конференции «Биохимическая физика», Москва, РУДН, 2022, С. 22-29]

- Показано, что 3 соединения серии 2 с объемными заместителями обладают антиагрегационной активностью в диапазоне IC_{50} до 5×10^{-4} М

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО СОСТАВА КОНДЕНСАТА ВЫДЫХАЕМОГО ВОЗДУХА (КВВ) КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МАЛОИНВАЗИВНЫЙ МЕТОД МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ЗАБОЛЕВАНИЙ ЛЕГКИХ

(лаборатория кинетики и механизмов ферментативных и каталитических реакций,
отв. исполнитель – с.н.с., к.х.н. Рябоконь А.М.)

Дифференциация группы образцов КВВ здоровых волонтеров и пациентов с раком легкого с использованием метаболомного анализ образцов КВВ и метода главных компонент



При анализе КВВ пациентов с раком легкого была идентифицирована панель из 105 метаболитов, позволяющая достоверно дифференцировать группы здоровых волонтеров и пациентов

Выявлены значимо меняющиеся белки в КВВ при проведении водородной терапии у пациентов, перенесших Covid19

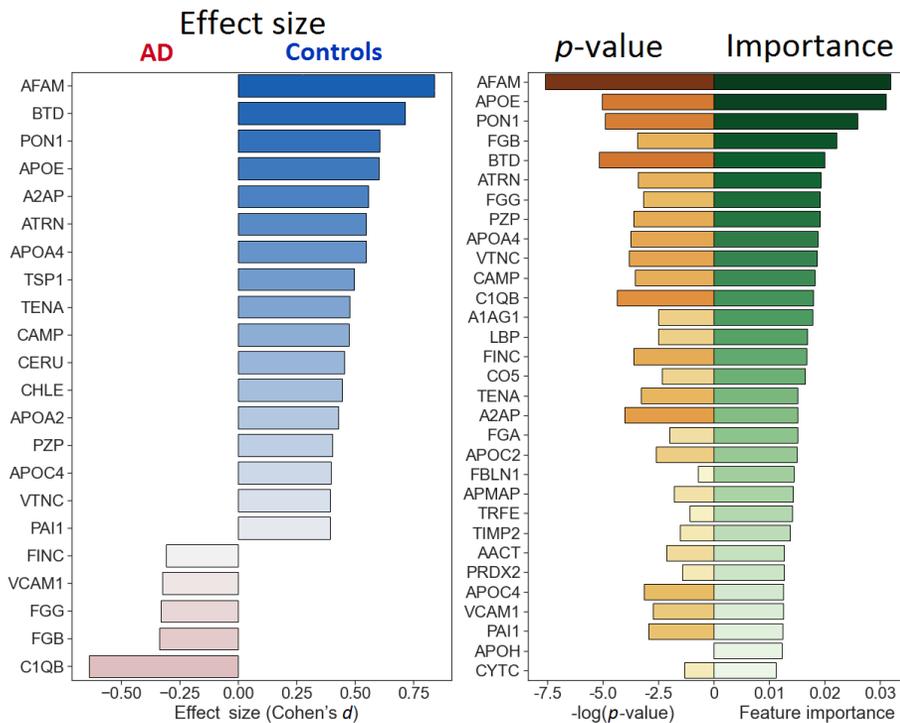


Контрольная группа – базовая терапия
Основная группа – базовая терапия плюс ингаляция водородом из аппаратом SUISONIA

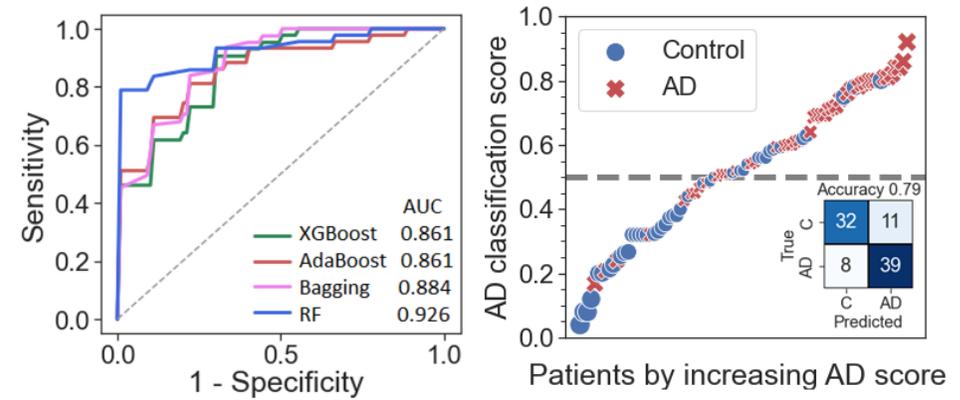
Прогнозирование болезни Альцгеймера с помощью количественной протеомики плазмы крови и методов машинного обучения

Авторы: Кононихин А.С, Захарова Н.В., Бугрова А.Е., Индейкина М.И., Николаев Е.Н.
(лаб. Масс-спектрометрии)

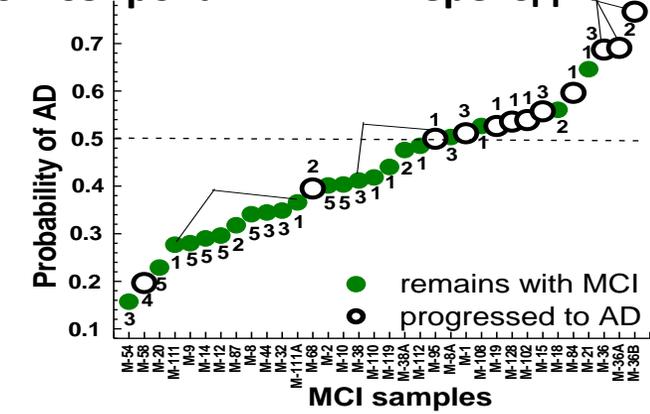
Предложена панель белковых маркеров, отличающих пациентов с болезнью Альцгеймера от контрольной группы по протеомному профилю плазмы



Классификатор, различающий пациентов с болезнью Альцгеймера и здоровых доноров



Классификатор оказался высокоэффективным для прогнозирования БА в переходной группе



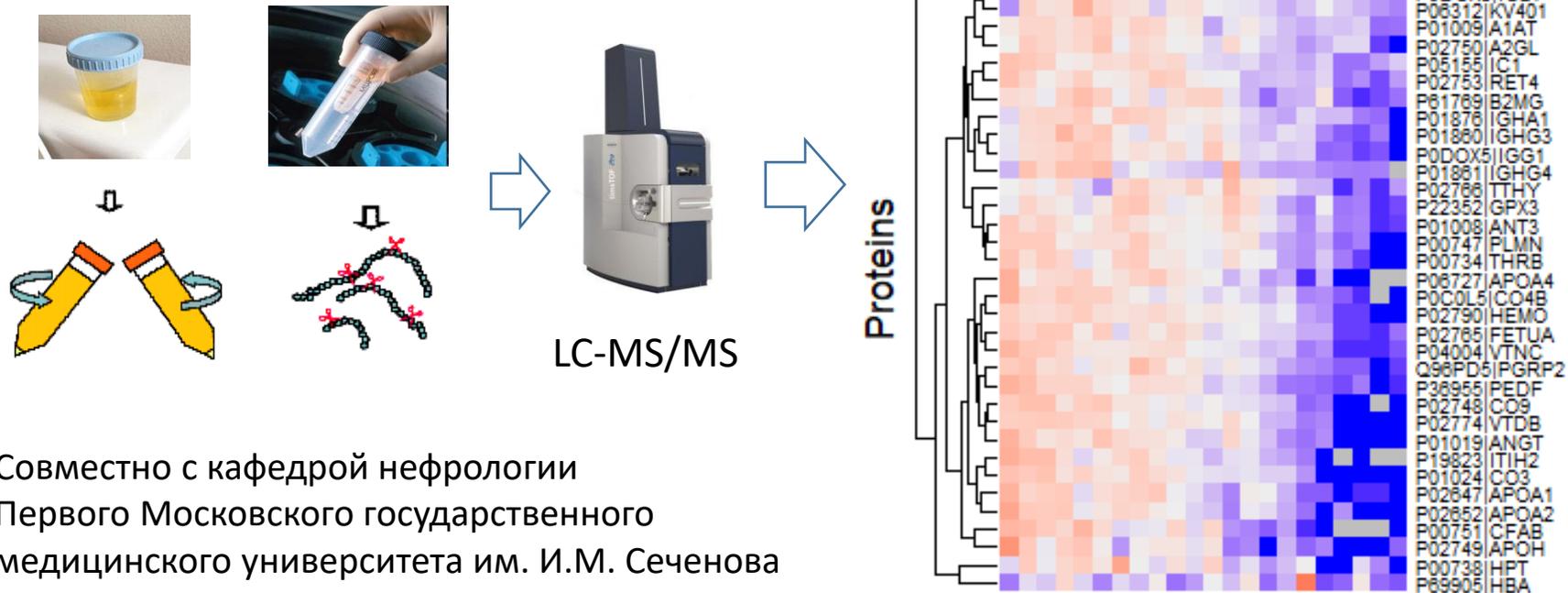
Совместно с отделением гериатрической психиатрии Научного центра психического здоровья

Kononikhin AS., Zakharova NV, Bugrova AE, Indeykina MI, Nikolaev EN, et al Int J Mol Sci. 2022; 23(14):7907. doi: 10.3390/ijms23147907. Q1; IF = 6.2

Развитие малоинвазивных методов диагностики почечных патологий с использованием протеомного анализа мочи

Авторы: Кононихин А.С, Бугрова А.Е., Захарова Н.В., , Индейкина М.И., Николаев Е.Н.
(лаб. Масс-спектрометрии)

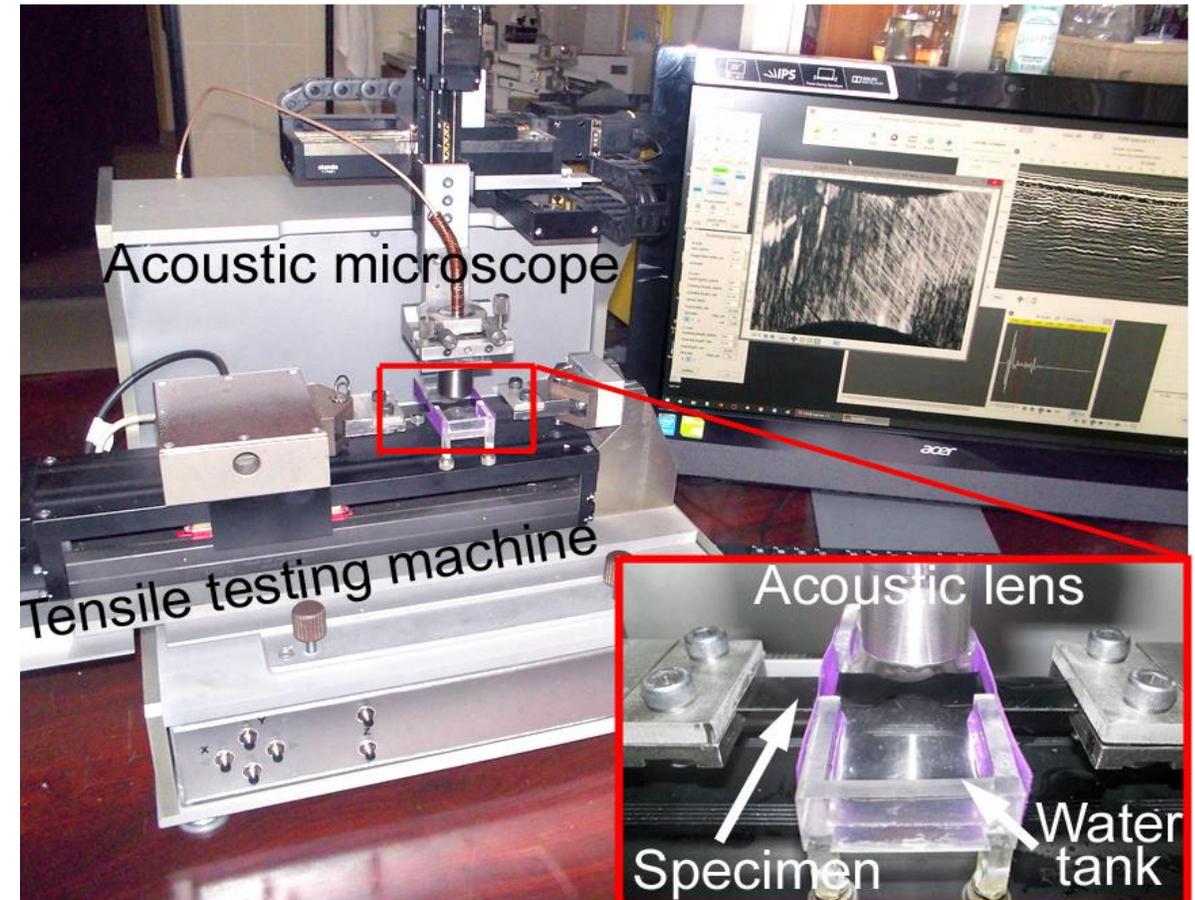
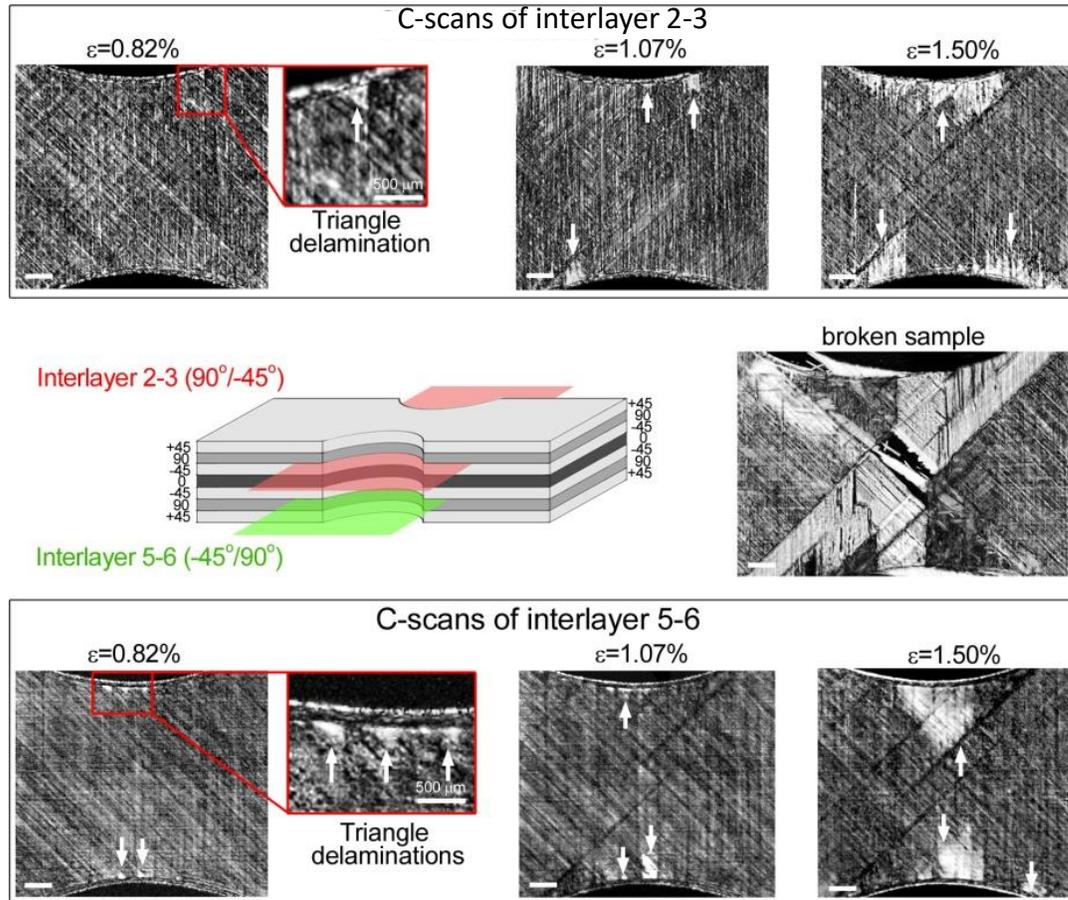
Выявлены новые потенциальные белки-маркеры для диагностики почечных патологий



Совместно с кафедрой нефрологии
Первого Московского государственного
медицинского университета им. И.М. Сеченова

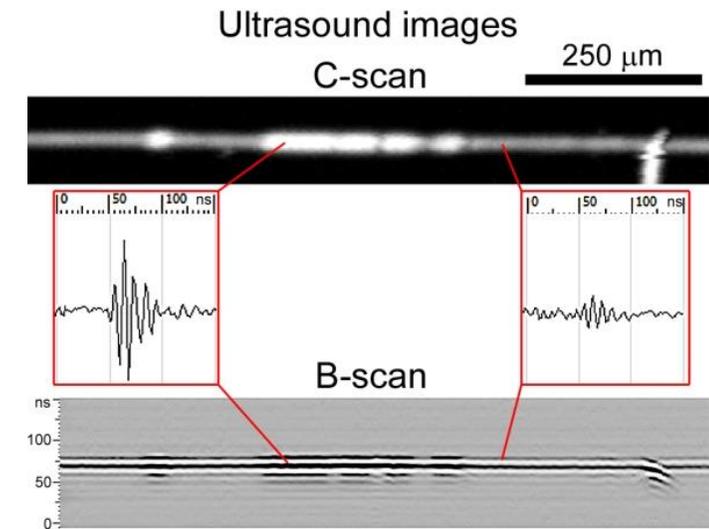
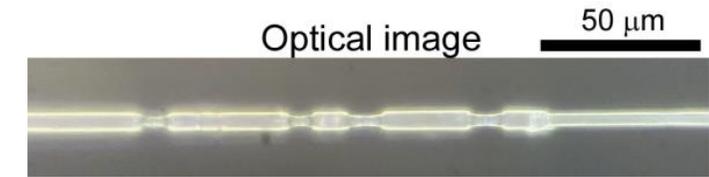
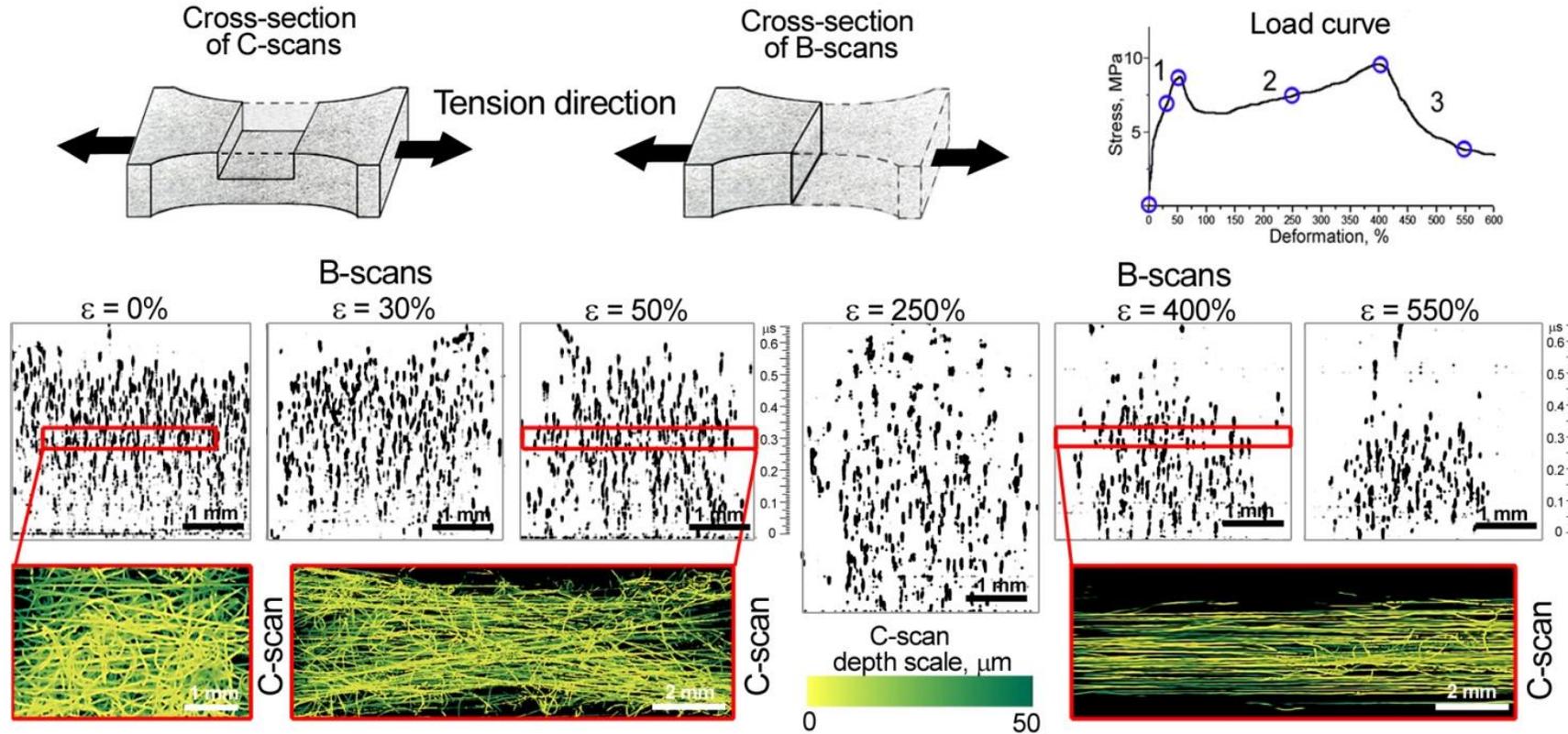
Indeykina MI, Bugrova AE, Nikolaev EN, Kononikhin AS. Et al Int J Mol Sci. 2022; 23(20): 12607.
doi: 10.3390/ijms232012607. **Q1; IF = 6.2**

Акустическая микроскопия для изучения процессов микромеханического разрушения углепластиков.



Визуализация в динамике процессов разрушения микроструктуры в объеме углепластика при растяжении. Описаны процессы зарождения, роста и развития повреждений, возникающих на разных уровнях деформации материала.

Акустическая микроскопия для изучения процессов микромеханического разрушения нетканых материалов.

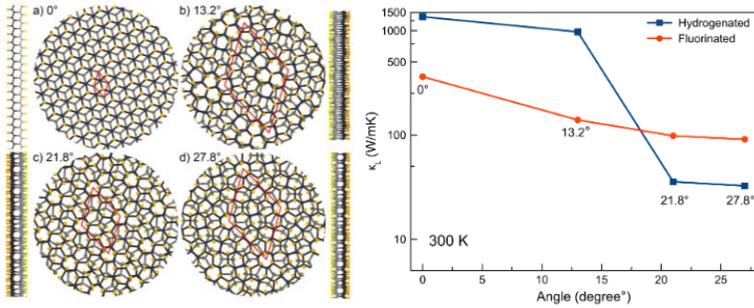


Ультразвуковые изображения (С- и В-сканы) трансформации микроструктуры в объеме нетканых ПЛА материалов при растяжении.

Ультразвуковая визуализация растяжения и утоньшения одиночных волокон $d=4$ мкм.

Описаны и визуализированы процессы перестройки волокнистой микроструктуры в объеме нетканых матриц из полилактида при растяжении в условиях, приближенных к условиям пребывания материала в живом организме. Выявлены механизмы раскручивания, удлинения, ориентации и деформации волокон при одноосном растяжении. Описаны перестройки микроструктуры в упругом и пластическом диапазонах деформаций и вблизи экстремумов напряжений.

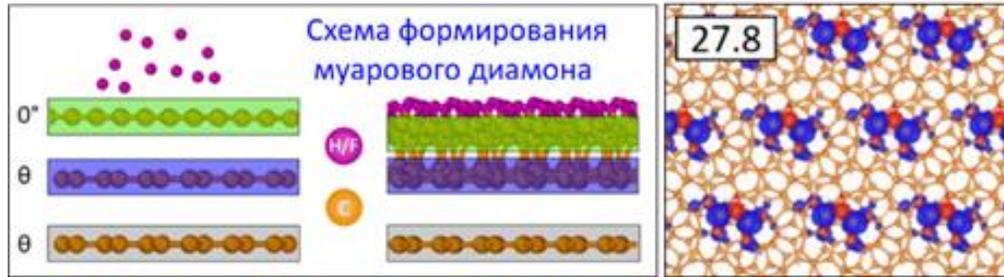
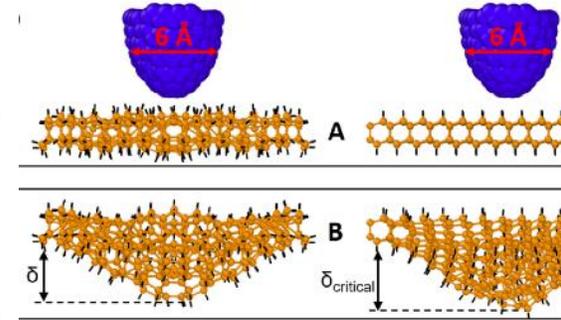
Муаровые диаманты: квантово-химическое моделирование атомной структуры, электронных и механических свойств (лаб. 0401, группа Л.А.Чернозатонского)



- 2D квазикристаллы диаманта обладают высокой твердостью и ультра-широкой диэлектрической щелью
- Муаровые диаманты, обладают ультранизкой теплопроводностью на два порядка ниже ее высоких значений для нескрученных D_n диамантов. Такие пленки с «квази-аморфной» структурой могут служить эффективными теплоизоляторами в гетероструктурных устройствах наноэлектроники
- Упругие константы муаровых диамантов заметно отличаются от диаманта D_n, их разрыв наступает при больших напряжениях. Прорыв при действии острия для мембраны D_n29.4 наступает при больших значениях силы, чем для мембран из других диамантов, что говорит о ее высокой жесткости

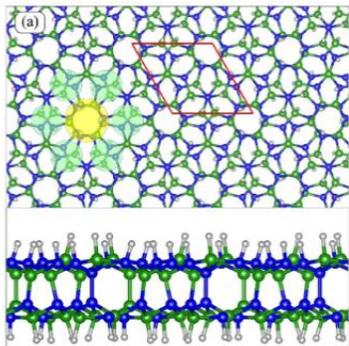
L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin, *Applied Surface Science* 572, 151362 Q1
 Л.А. Чернозатонский, В.А. Демин, Д.Г. Квашнин, Патент РФ 2772338

S. Chowdhury, V.A. Demin, L.A. Chernozatonskii, A.G. Kvashnin, *Membranes* 12 (10), 925, Q1.
 А.А.Артюх, Л.А.Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ*, 116, 10, 716 – 723, Q3



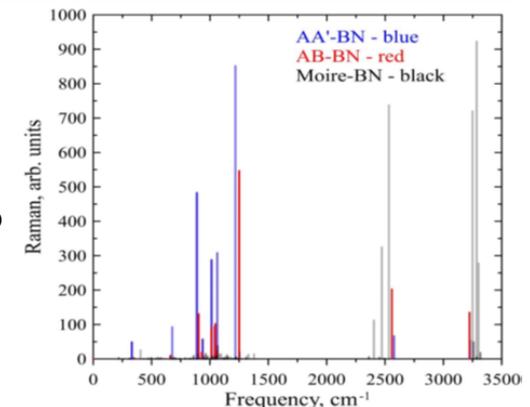
- Муаровый диамант - гидрированный с одной стороны муаровый диамант, молекулярно связанный с графеновой подложкой, обладает спиновой сверхрешеткой с периодом муаровой структуры. Перспективен для устройств 2D спинтроники
- Предложен механизм формирования 3x- и 4x-слойных муаровых диамантов, обладающих электронным спектром с ультра-широкой диэлектрической щелью

L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, D.G. Kvashnin, *J. Phys. Chem. Lett.* 13, 5399-5404, Q1.
 L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, *JETP Letters* 115 (3), 161-166, Q3



- Муаровые борнитраны - аналоги диамантов, состоящие из двух ковалентно связанных листов нитрида бора
- Полупроводники с непрямой запрещенной зоной
- Большое количество узких пиков на плотности электронных состояний, связанных с уплощенными мини-зонами
- Расчеты рамановского и инфракрасного спектров, идентифицирующих структуру борнитранов, показали, что они обладают модами с параллельными 2D-плоскости колебаниями и существенно отличаются от частот соответствующих спектров нескрученных борнитранов
- Возможно их применение в качестве элементов резонансной нелинейной оптики и оптоэлектроники

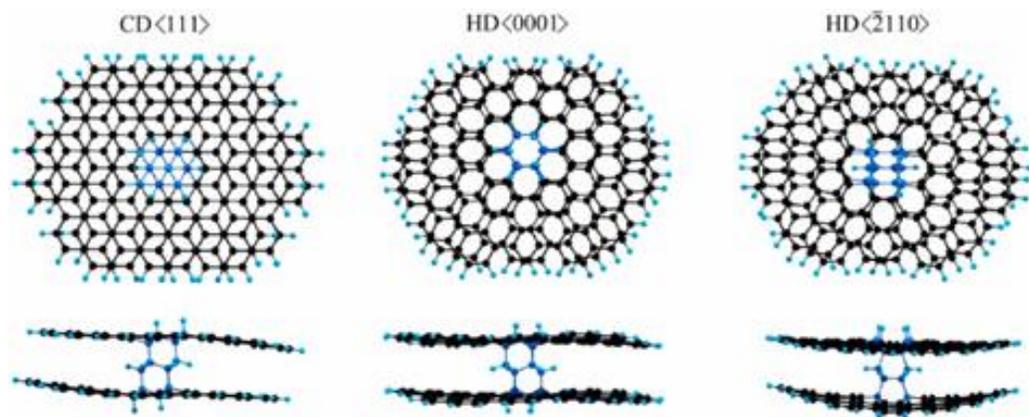
L.A. Chernozatonskii, K.P. Katin, A.I. Kochaev, M.M. Maslov, *Applied Surface Science*, 154909, Q1



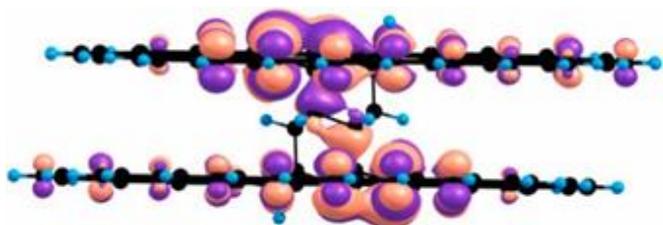
Новые структуры на основе биграфена

(совместная работа с Томским ГУ и Kyungpook National University (South Korea))

Островки наноалмазов, заключенные между двумя листами графена

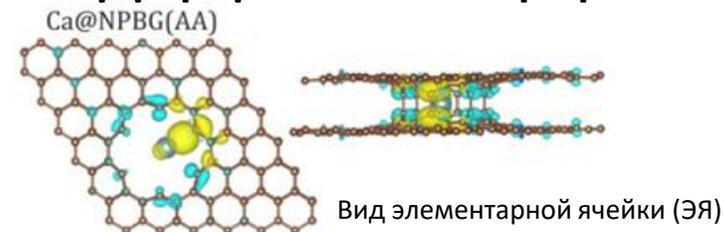


Островки наноалмазов, заключенные между двумя листами графена, формируемые ковалентным слипанием плоских углеводородных молекул с графенами, проявляются как химически эквивалентные частицы - квантовые точки которые могут образовывать расширенные квантовые ансамбли с большим потенциалом применения для наносенсоров, фотодиодов, солнечных панелей и фотовозбуждения, которые могут способствовать разработке квантовых устройств.



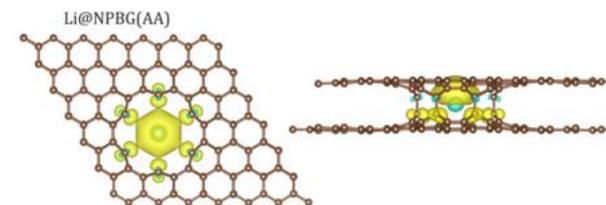
G.T. Oyeniyi, I.A. Melchakova, **L.A. Chernozatonskii**, P.V. Avramov, Nanodiamond islands confined between two graphene sheets as perspective 2D quantum materials, *Carbon* 196, 1047-1053(2022) **Q1**

Спиновые состояния легированных атомами Li, Ca, Al перфорированных биграфенов

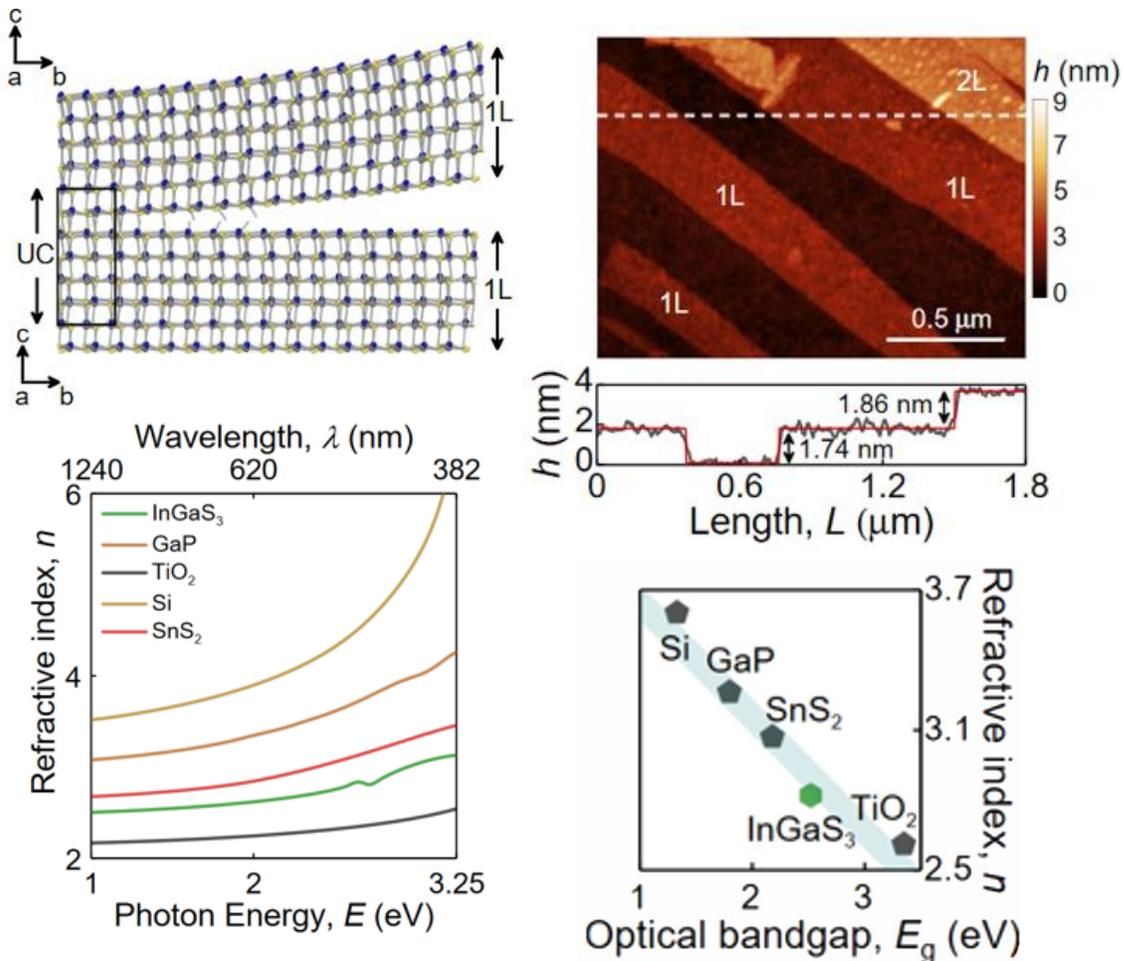
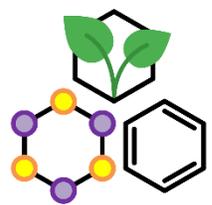


Высокая кривизна тороидальных графеновых краев нанопоры вызывает резкое изменение химических свойств атомов углерода, превращая свернутые края в локальные окислительные фрагменты. Для Li, Ca или Al атомов возникает асимметричная координация в нанопоре с переносом электрона от атомов металла к краевым С-атомам.

В такой перфорированной биграфеновой сверхрешетке обнаружено ферромагнитное спиновое упорядочение с магнитными моментами $\sim 0,4 \mu_B/\text{ЭЯ}$. Спонтанное снятие спинового вырождения интерпретировалось с точки зрения интенсивных локальных электростатических полей от дополнительных зарядов электронов, локализованных на краях нанопор, в сочетании с нарушением пространственной инверсии и локальной трансляционной инвариантности. Данные структуры перспективны для устройств 2D спинтроники.



Iu.A. Melchakova, T.G. Tenev, N.V. Vitanov, O.N. Tchaikovskaya, **L.A. Chernozatonskii**, B.I. Yakobson, P.V. Avramov, Extreme structure and spontaneous lift of spin degeneracy in doped perforated bilayer graphenes, *Carbon* 92, 61-70 (2022) **Q1**



- С помощью **теоретического моделирования** предсказана возможность механического расщепления ковалентного неслоистого кристалла **InGaS_3** на тонкие пленки толщиной до **$\sim 1,7 \text{ нм}$**
- Экспериментально, методом механического расщепления получены тонкие пленки **InGaS_3** , в которых обнаружен **неожиданно высокий** коэффициент преломления (**≥ 2.5**) при отсутствии поглощения в видимом и ИК диапазонах. Это делает такой материал кандидатом для применения в области диэлектрической нанофотоники.

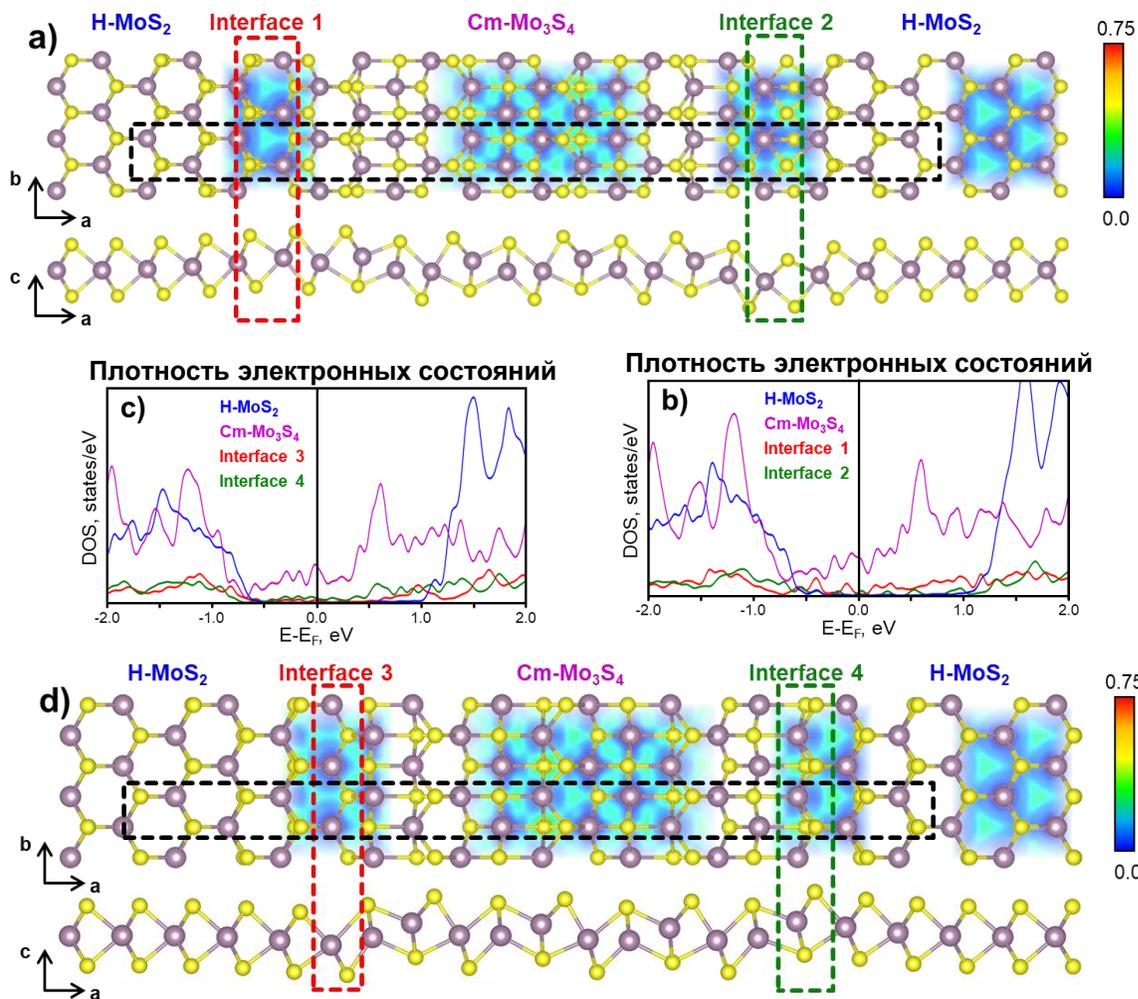
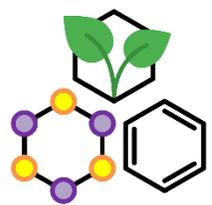


ИБХФ
РАН

МФТИ



A. N. Toksumakov, G. A. Ermolaev, A. S. Slavich, N. V. Doroshina, E. V. Sukhanova, D. I. Yakubovsky, A. V. Syuy, S. M. Novikov, R. I. Romanov, A. M. Markeev, A. S. Oreshonkov, D. M. Tymbarenko, Z. I. Popov, D. G. Kvashnin, A. A. Vyshnevyy, A. V. Arsenin, D. A. Ghazaryan, V. S. Volkov, **npj 2D Materials and Applications** 6, 85, 2022 <https://doi.org/10.1038/s41699-022-00359-9> (IF = 12.043)

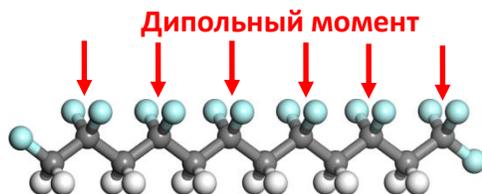


- Монослой дисульфида молибдена (MoS_2) является перспективным полупроводниковым материалом для **создания полевых транзисторов**, широко использующихся в современных электронных и радиоустройствах (**например, в наручных часах или в пультах телевизоров**). Характеристики полевых транзисторов в значительной степени зависят от качества контактов между материалом-полупроводником и металлическими электродами, поэтому важной задачей является поиск материалов, подходящих для создания металлических контактов с полупроводниковым монослоем MoS_2 .
- **Сотрудники теоретической группы “Биомиметические наноматериалы” ИБХФ РАН** провели детальное теоретическое исследование возможных монослойных наноматериалов, состоящих из Mo и S, и **впервые предложили новую двумерную структуру – Mo_3S_4** , которая проявляет металлические свойства и может образовывать атомарно-гладкие границы с полупроводниковой фазой MoS_2 . *Преимущество данной структуры заключается в том, что ее получение возможно из монослоя MoS_2 , содержащего вакансии атомов серы*

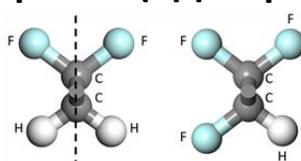
Моделирование электрокалорических полимеров. Путь к созданию холодильников на новых принципах

Разработан теоретический подход к вычислению электрокалорического скачка температуры, ΔT , в сегнетоэлектрических полимерах, объединяющий аналитические методы статистической физики и численный метод молекулярной динамики. Было продемонстрировано, что уменьшение концентрации структурных дефектов в уже известных сегнетоэлектрических полимерах может существенно (до двух раз) увеличить величину ΔT

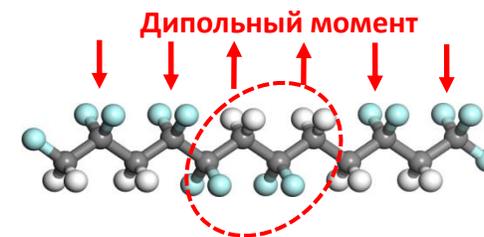
Полимерная цепь без дефектов



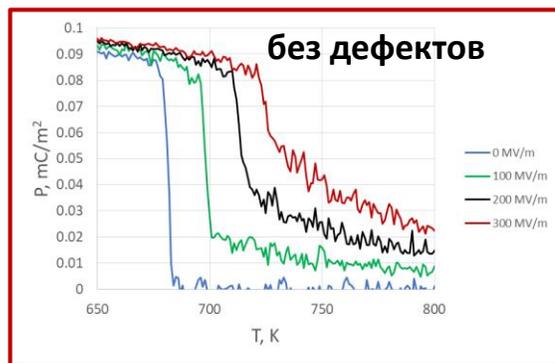
Сополимер поли(ВДФ-ТрФЭ)



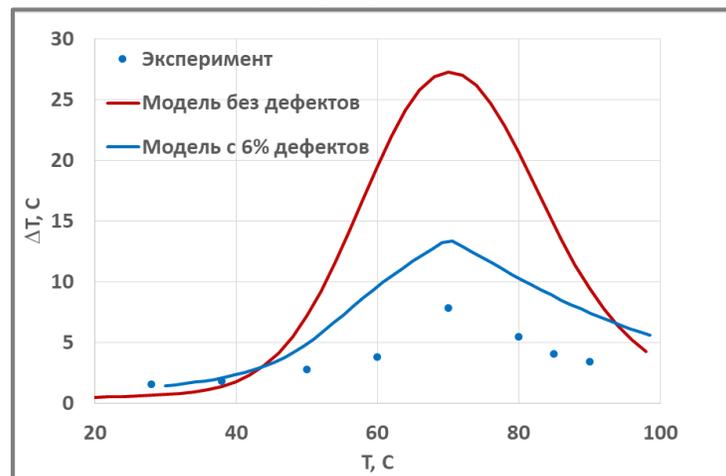
Цепь со структурным дефектом



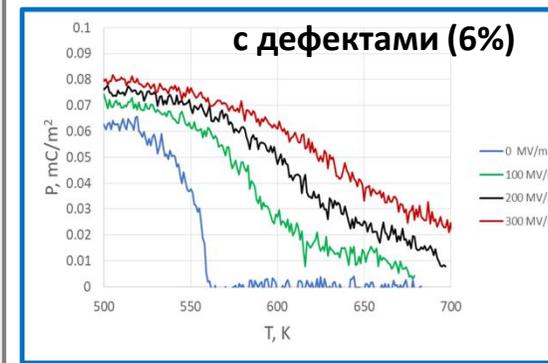
$P(T)$ при разных значениях E
(молекулярная динамика)



Значение $\Delta T(T)$, рассчитанное аналитически по данным молекулярной динамики



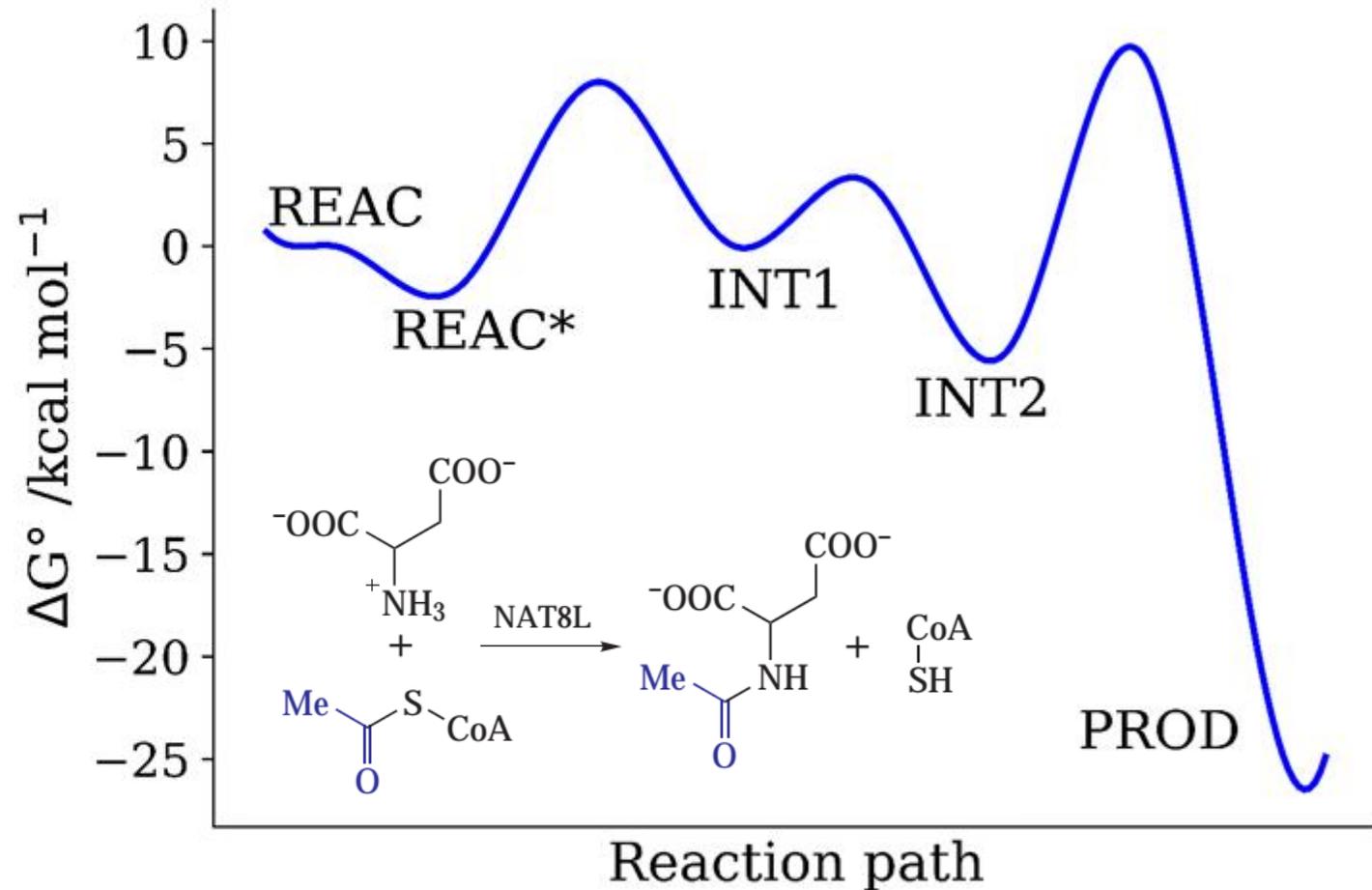
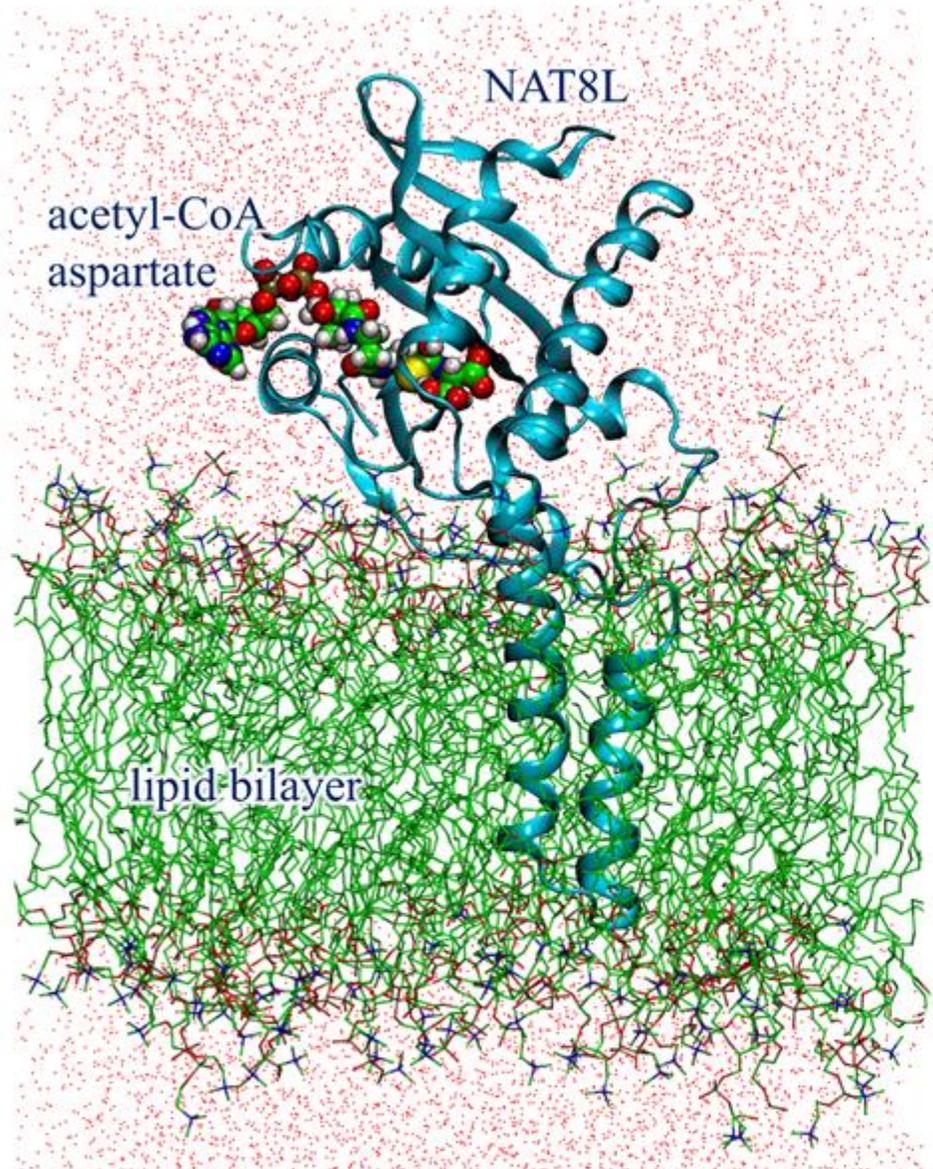
$P(T)$ при разных значениях E
(молекулярная динамика)



ΔT – электрокалорический скачок температуры
 P – поляризация образца
 E – напряженность приложенного электрического поля

Лаборатория фундаментальных проблем электрофизики,
органических материалов и наноструктур

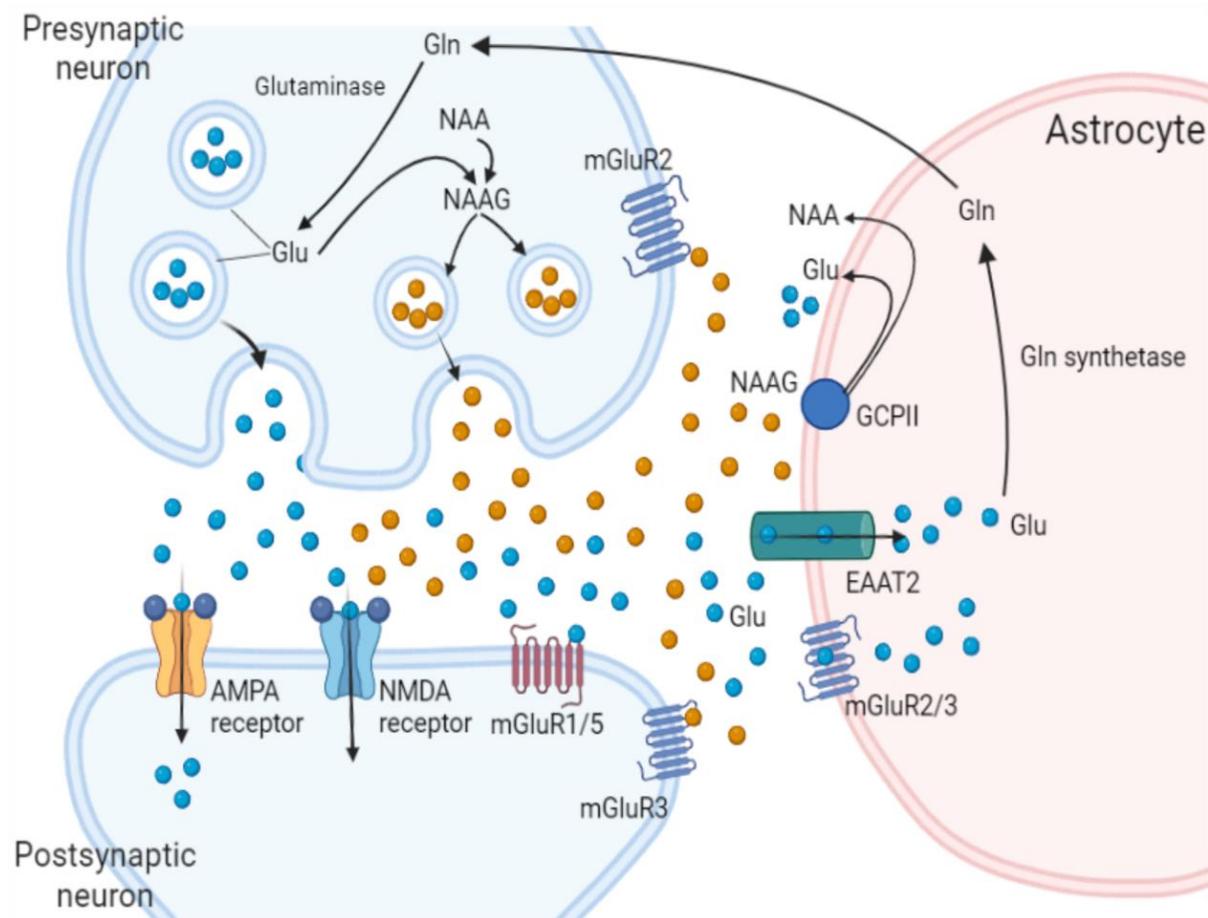
С построенной только по первичной аминокислотной последовательности белка моделью мембранного фермента ацетилтрансферазы NAT8L установлен механизм реакции синтеза нейромедиатора мозга человека N-ацетиласпартата



Кинетическая модель функционирования глутамат-астроцитарной системы В МОЗГЕ ЧЕЛОВЕКА

Лаборатория компьютерного моделирования биомолекулярных систем и наноматериалов

С.Д. Варфоломеев, В.И. Быков, С.Б. Цыбенова



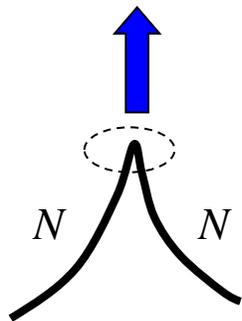
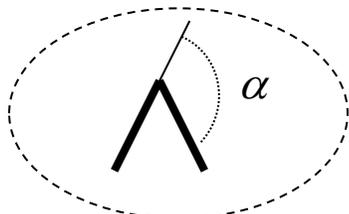
Разработана химико-кинетическая модель функционирования глутамат-астроцитарной системы (глутаматный синапс) – ключевой возбуждающей структуры, определяющей механизмы записи и хранения информации в мозге человека. Методами функциональной магнитно-резонансной томографии исследована динамика глутаматного импульса.

В рамках кинетической модели анализируется динамика процесса при нейродегенеративных заболеваниях (деменция, болезнь Альцгеймера, эпилепсия, черепно-мозговая травма).

Влияние молекулярной гибкости на фазовое поведение V-образных жидких кристаллов

Модель

Молекула образована двумя полугибкими сегментами из N мономеров каждый, соединенных под внешним углом α



N Степень полимеризации сегмента

Персистентная длина сегмента при I-N переходе из изотропной в нематическую фазу зависит от жесткости цепей и межмолекулярных анизотропных взаимодействий

$$\xi_p^{(t)}$$

Эффективная длина сегмента при I-N переходе

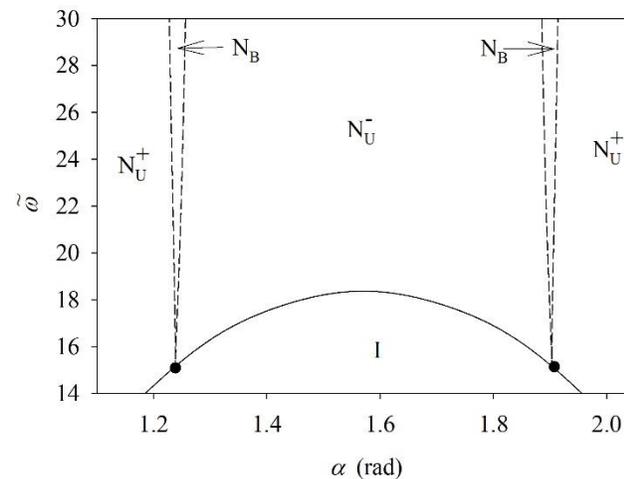
$$\longrightarrow l_t = N / \xi_p^{(t)}$$

Фазовые диаграммы термотропного модельного расплава V-образных жидких кристаллов в переменных (угол α -обратная температура) содержат области устойчивости изотропной (I), одноосевой нематической (U) и двухосевой (B) нематической фазы.

Увеличение l_t приводит к уменьшению областей стабильности двухосевой нематической фазы

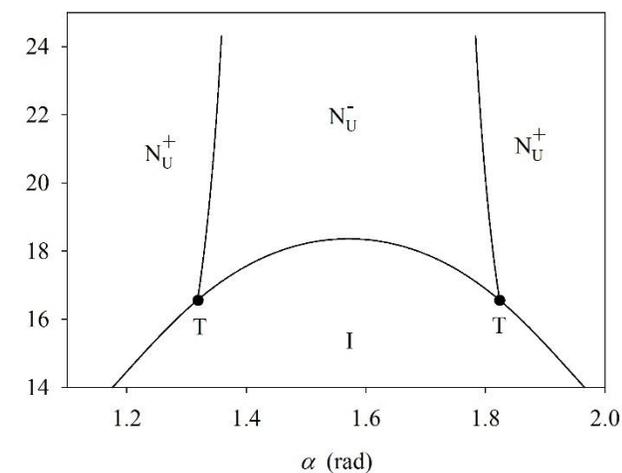
Стержнеобразный режим сегментов

$$l_t \ll 1$$



Полугибкий режим сегментов

$$l_t \sim 1$$



Сплошные и пунктирные линии --- фазовые переходы I и II рода, соответственно.

Гибкий радиопоглощающий теплозвукоизоляционный материал

В рамках экспериментальных исследований получены образцы гибких радиопоглощающих теплозвукоизоляционных материалов (ТЗМ).

Материал обеспечивает уникальное сочетание свойств:

- Теплозащита
- Звукоизоляция
- Радиопоглощающие свойства

* Разработан эффективный способ крепления материала

** Разработан вариант ТЗМ с защитным грунтовочным слоем.

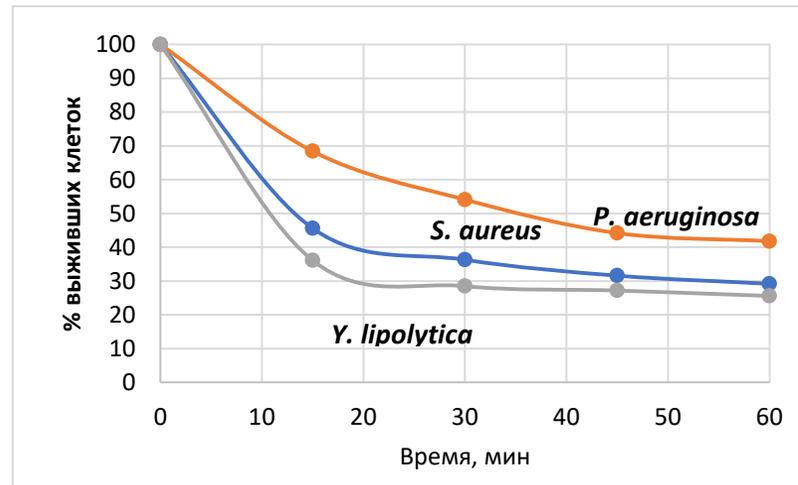
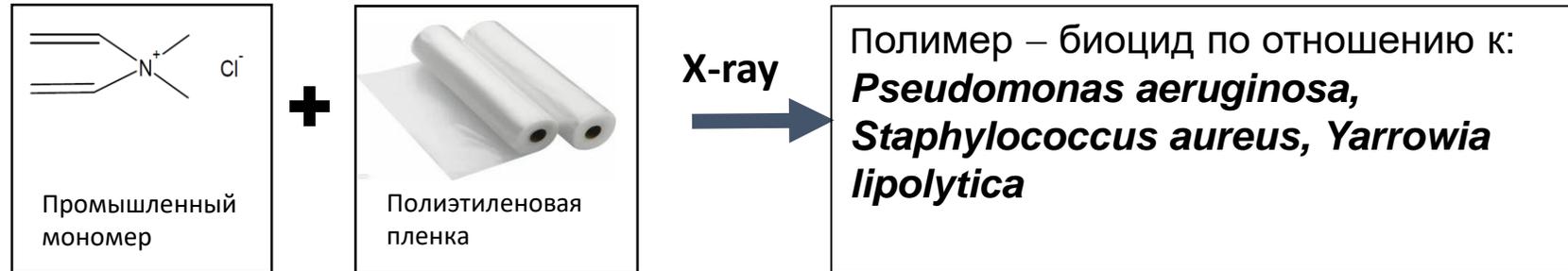


Внешний вид материала

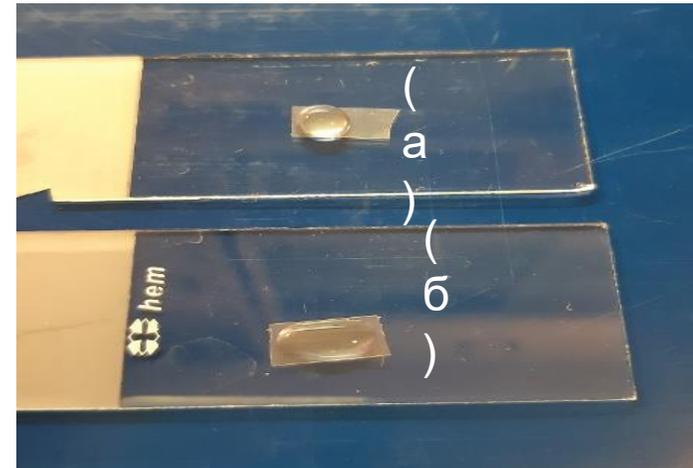
Таблица 1. Технические характеристики образцов нового ТЗМ и материала ПК-2-125/225

Характеристика	Образцы нового ТЗМ	ПК-2-125/225 (сравнение)
Объемная усадка, %	не более 1	10- 25
Толщина материала, мм	10 _{.2} , 20 _{.2} , 40 _{.2}	43 ±6; 37 ±6 (по ТУ)
Кажущаяся плотность, кг/м ³	195 ±15	125 ±25; 225 ±45(по ТУ)
Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К)	0,034-0,047	0,04...0,06
Радиопоглощающие характеристики	обладают	отсутствуют
Коэффициент (акустических) потерь при прохождении через образец	более 17 дБ	более 6 дБ

Создание полимера с поверхностью биоцида



Снижение титра выживших клеток различных культур на биоцидных пленках в зависимости от времени нахождения клеток на плёнке.



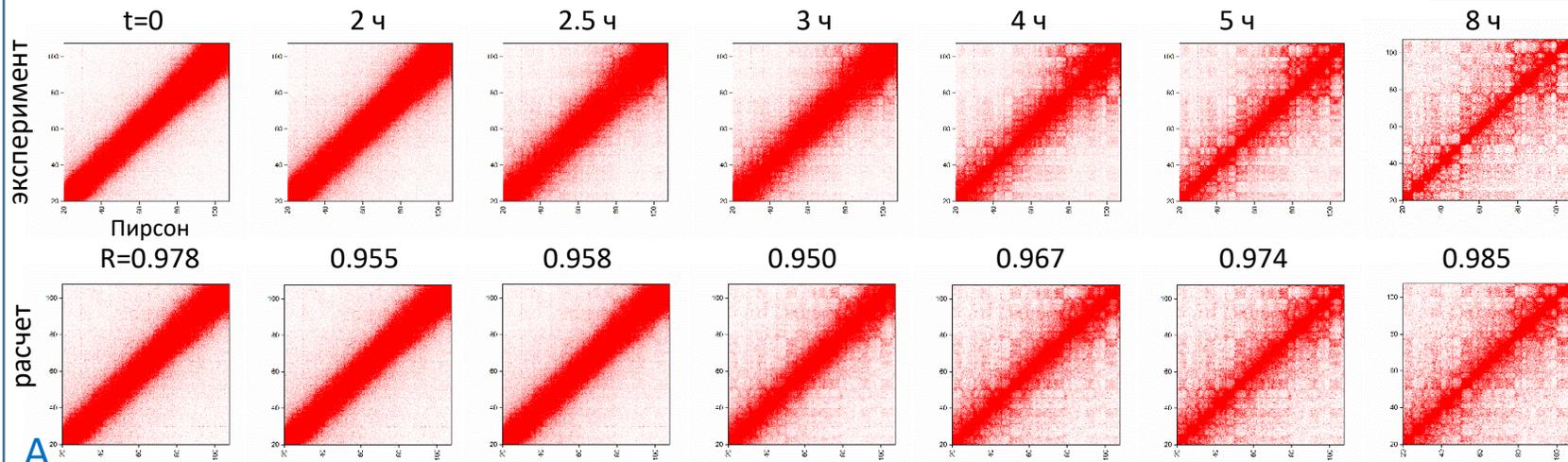
Капли суспензии культуры на плёнке исходного (а) и модифицированного ПЭНП (б).

Исполнители: Мисин В.М., Мальцев А.А.

Модель динамики структуры хромосом в клеточном цикле

М 99%, G1 1%

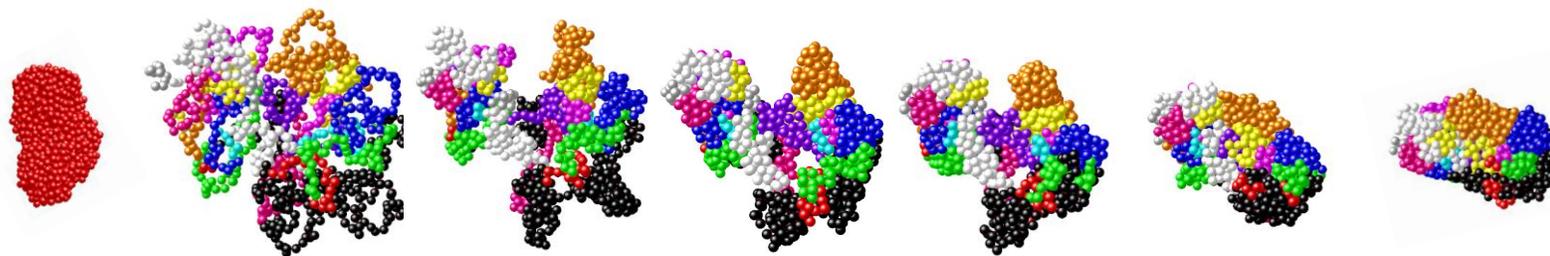
М 24%, G1 76%



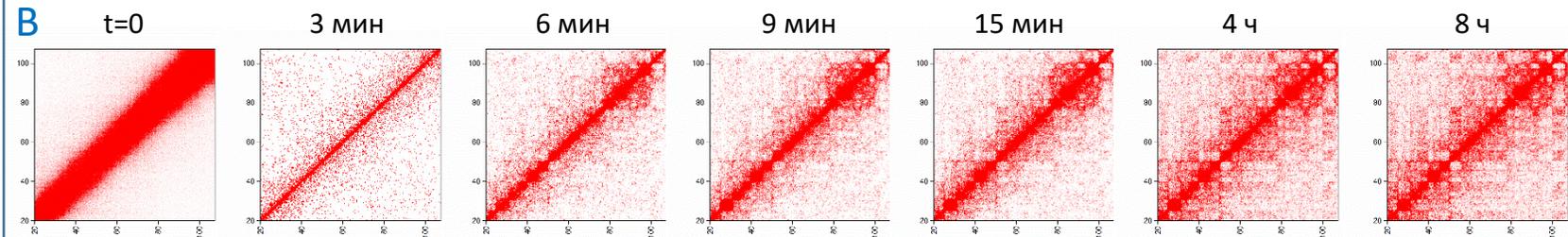
Разработанная модель

- объясняет экспериментальные закономерности по частотам Hi-C контактов в хромосомах во всем интервале времен перехода митоз-интерфаза, M-G1 (A)
- восстанавливает динамику структуры хромосом в G1 субпопуляции (Б)
- предсказывает более раннее формирование гетерогенных контактов G1-хромосом (Б,В), отличие частот контактов в G1 фазе от наблюдаемых. Это требует коррекции существующих Hi-C данных.

Б



В



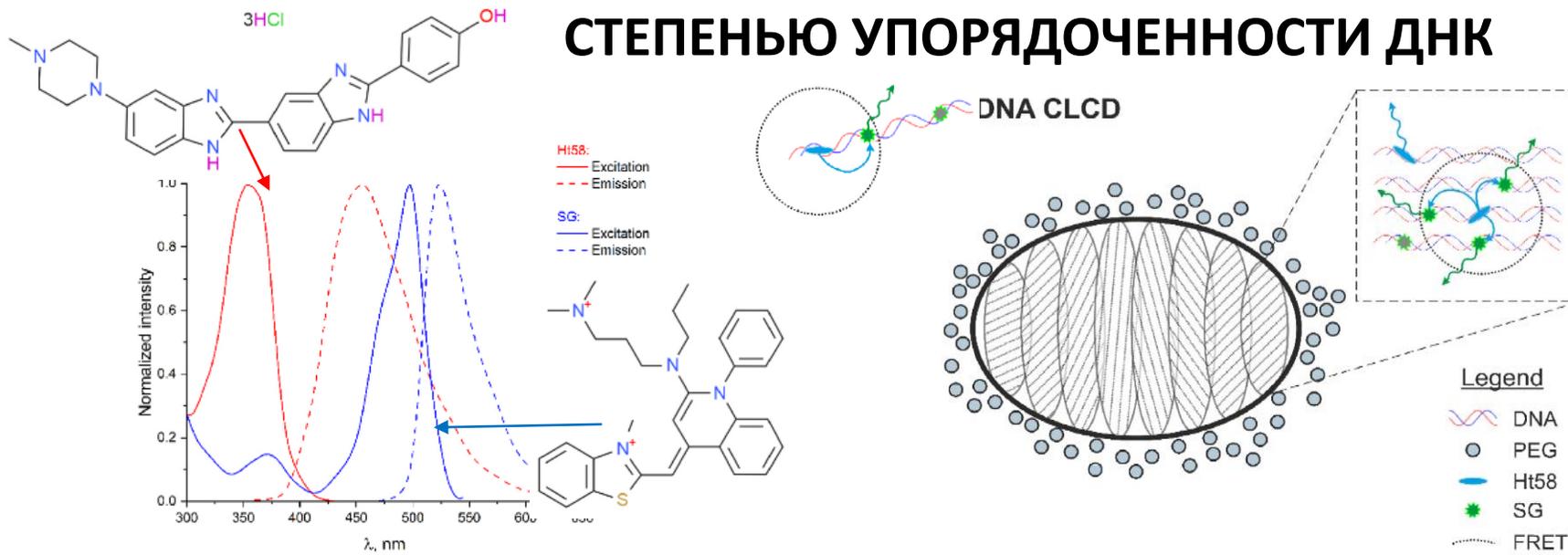
М 100%, G1 0%

G1 100%

Значение

Модель предполагает механизм взаимосвязи структуры и функции хромосом – регуляцию времени появления активных-неактивных доменов, активации транскрипции, инициации репликации через динамику установления 3D-структуры хромосом.

РЕЗОНАНСНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ В СИСТЕМАХ С РАЗНОЙ СТЕПЕНЬЮ УПОРЯДОЧЕННОСТИ ДНК



Journal of Luminescence 252 (2022) 119381
 Contents lists available at ScienceDirect
 Journal of Luminescence
 journal homepage: www.elsevier.com/locate/jlumin

Full Length Article
Förster resonance energy transfer from Hoechst 33258 to SYBR Green I in cholesteric liquid-crystalline DNA
 Vladimir N. Morozov^{a,*}, Mikhail A. Klimovich^{a,b}, Alexey A. Kostyukov^a, Alexander V. Belousov^a, Maria A. Kolyvanova^{a,b}, Tatyana D. Nekipelova^a, Vladimir A. Kuzmin^a

^a *Samara Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kogelnik St., Moscow, 119334, Russia*
^b *Purkyshev Federal Medical Biophysical Center, Federal Medical Biological Agency of the Russian Federation, 23 Morzhukovskaya, Moscow, 123162, Russia*

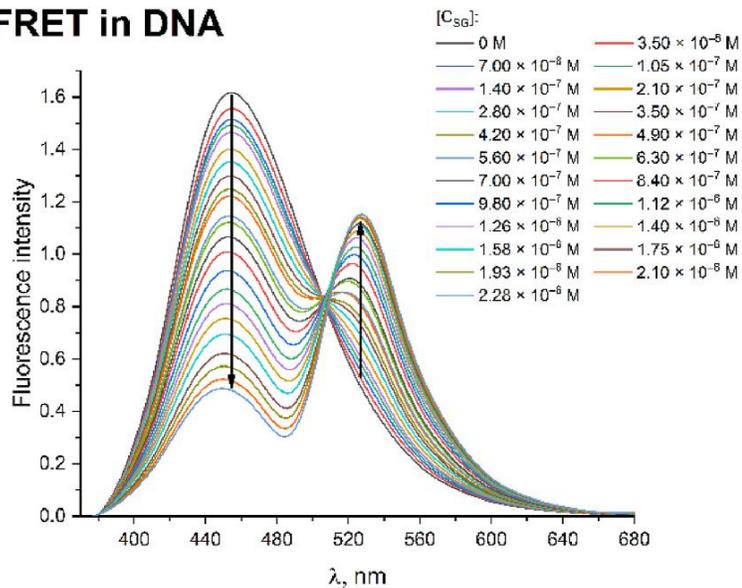
ARTICLE INFO
Keywords: FRET; Crowded DNA; Hoechst 33258; SYBR Green I; Fluorescence; Liquid crystals

ABSTRACT
 In the present work Förster resonance energy transfer (FRET) between DNA-specific fluorescent dyes Hoechst 33258 (Ht58; donor) and SYBR Green I (SG; acceptor) is compared in isotropic DNA solution and in its cholesteric liquid-crystalline dispersion (DNA CLCD). As a fixed donor concentration of 3.57×10^{-7} M in the spatially ordered system, FRET starts at lower acceptor concentration than in the isotropic system and at the SG concentration below 1.65×10^{-7} M, its efficiency in DNA CLCD is up to 4-fold higher than in DNA solution (SD-FRET vs. 1D-FRET). However, the maximum FRET efficiency is higher in isotropic solution (c.70% vs. c.50%, respectively) apparently due to the absence of steric restrictions on intermolecular interactions imposed by the dense packaging of the DNA molecules. In isotropic DNA solution FRET from Ht58 to SG is accompanied by the displacement of Ht58 from the minor-groove complex as the SG concentration increases, while the displacement of Ht58 in DNA CLCD seems to be limited. Using FRET between Ht58 and SG, the formation of DNA CLCD particles via stopped-flow method was investigated and for the first time the subsequent stage of the DNA CLCD particle formation, generation of "precholesteric" optically inactive nuclei, was demonstrated.

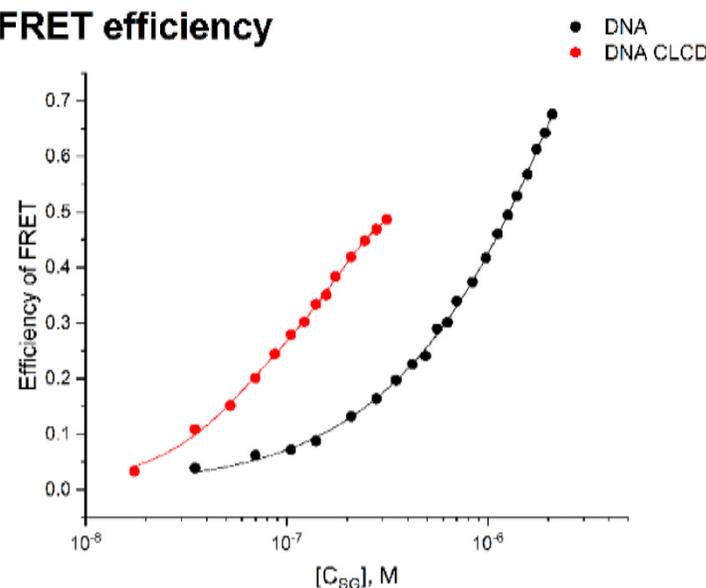
1. Introduction
 Nowadays, fluorescent dyes are an integral part of many medical and biological applications. For example, they are used as probes in fluorescence-guided surgery [1–3] and endoscopic investigations [4], as well as sensitizers in photodynamic therapy of cancer and nonmalignant diseases [5]. They are the cornerstone for many molecular and cell tests widely used both in clinical diagnostics and life sciences [6]. At the same time, the dyes fluorescence is a powerful tool for visualization of various biological processes and subcellular targets [6–8]. One of the options for such using the fluorescent dyes, based on the so-called nonradiative energy transfer named after Theodor Förster the discoverer [9] (Förster resonance energy transfer – FRET), is a nanometer-precision molecular ruler. FRET allows to investigate intermolecular cooperation and conformational changes of individual biomolecules [10], for example, to study dynamics, functions, and interactions of proteins [11,12], including formation of their complexes with DNA [13]. As the transparency of biological systems allows to investigate such processes in living cells under physiological conditions, among others FRET takes an important place in the study of nano-scale architecture of chromatin and of DNA compaction processes [14–16]. However, since an exceedingly high concentration of biomolecules (up to $\approx 400,000$ g/L) in biological systems is concentrated in an extremely small volume [17–20], the physicochemical properties and behavior of both biomacromolecules themselves and their specific ligands (e.g. fluorescent dyes) under such a crowding conditions can differ significantly from the dilute solutions, where concentration of the biomolecular substrate usually does not exceed ≈ 10 g/L. This can make non-trivial an extrapolation of the ideas about the molecular topology in the dilute solutions to the real biological systems, for example, to the cytoplasm or cellular nucleus. Thus, the model systems partially reproducing these macromolecular crowding conditions may be useful for such a transition. For example, since a high concentration of solutes in cellular environments limit the amount of subunit water [21], the study of interactions between small ligands and macromolecules under the osmotic stress conditions (e.g. Ref. [22,23]) may be useful to shed the light on the features of their complexation in cell compartments, as well as for drug development applications. The problems of the

* Corresponding author. Samara Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kogelnik St., Moscow, 119334, Russia.
 E-mail address: morozov.v.a@sam.ru (V.N. Morozov).
<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119381>
 Received 25 June 2022; Received in revised form 16 September 2022; Accepted 28 September 2022
 Available online 1 October 2022
 0022-2313/© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.

FRET in DNA



FRET efficiency



V. N. Morozov, M. A. Klimovich, A. A. Kostyukov, A. V. Belousov, M. A. Kolyvanova, T. D. Nekipelova, V. A. Kuzmin, Förster resonance energy transfer from Hoechst 33258 to SYBR Green I in cholesteric liquid-crystalline DNA, Journal of Luminescence 252 (2022) 119381, https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119381

Лаборатория солнечных фотопреобразователей (0403)

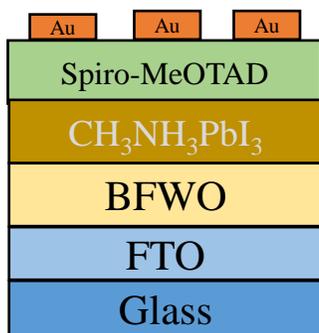
Руководитель О.И. Шевалеевский

Сконструированы новые виды неорганических перовскитных солнечных элементов (НПСЭ), разработанных на основе тройных сложных оксидов со структурой пирохлора:

$\text{Bi}_{0,51}\text{Fe}_{0,36}\text{WO}_q$ и $\text{Bi}_{0,70}\text{Fe}_{0,45}\text{WO}_q$ (BFWO). Соединения впервые были использованы в конструкции НПСЭ в качестве электрон-проводящих слоев ETL (electron transport layers).

Получены и исследованы НПСЭ с архитектурой: **glass/FTO/BFWO/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /Spiro-MeOTAD/Au**

Максимальная эффективность (КПД) составила **13.3%**



The scheme of PSC based on BFWO ETL

	J_{SC} , mA/cm ²	V_{OC} , V	FF, a.u.	PCE, %
TiO_2	18.8 ± 0.18	1.00 ± 0.02	0.69 ± 0.02	12.8 ± 0.17
BFWO pH = 2	20.5 ± 0.17	0.89 ± 0.01	0.73 ± 0.01	13.3 ± 0.15
BFWO pH = 5	20.5 ± 0.21	0.87 ± 0.02	0.66 ± 0.02	11.8 ± 0.23
BFWO pH = 7	18.5 ± 0.17	0.77 ± 0.02	0.49 ± 0.03	7.0 ± 0.17

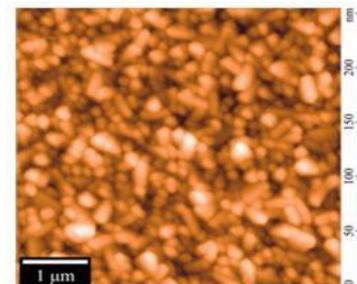
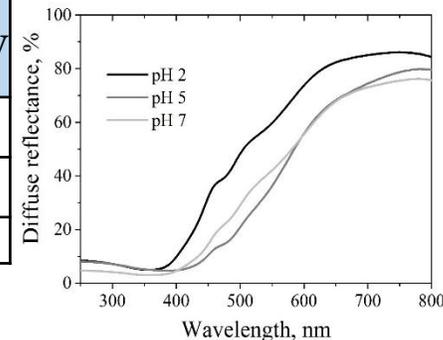
S.S. Kozlov, A.B. Nikolskaia, O.V. Alexeeva, et al. *“Bismuth iron tungstate pyrochlore thin films for photovoltaic applications”*

Mendelevov Communications, 2022, 32 No. 3, 757-758

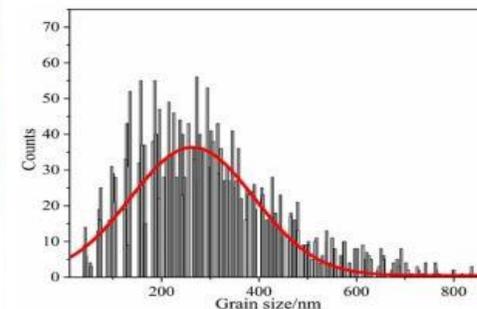
Работа лаборатории проводилась в рамках госзадания № 1201253312 и гранта РФФ № 20-69-47124. В 2022 году было опубликовано **10 статей**, **5 публикаций** в сборниках с шифром ISBN и подготовлены **2 заявки** на патенты на изобретения

Соединения вида BFWO были получены методом гидротермального синтеза при различных pH, что позволило в широких пределах варьировать ширину энергетической запрещенной зоны E_g в слоях ETL

pH	Chemical formula	E_g , eV
2	$\text{Bi}_{0,50}\text{Fe}_{0,34}\text{WO}_q$	2.60
5	$\text{Bi}_{0,51}\text{Fe}_{0,36}\text{WO}_q$	2.35
7	$\text{Bi}_{0,70}\text{Fe}_{0,45}\text{WO}_q$	2.48



AFM image of the BFWO ETL surface



Bismuth iron tungstate pyrochlore thin films for photovoltaic applications, et al.

“Катионное допирование сложного оксида со структурой двойного перовскита для использования в солнечной фотовольтаике”

Журнал неорганической химии 67(6) (2022) 862-867.

РАЗНОНАПРАВЛЕННОЕ ДЕЙСТВИЕ ФЕНОЛЬНЫХ АНТИОКСИДАНТОВ НА АПОПТОЗ КЛЕТОК.

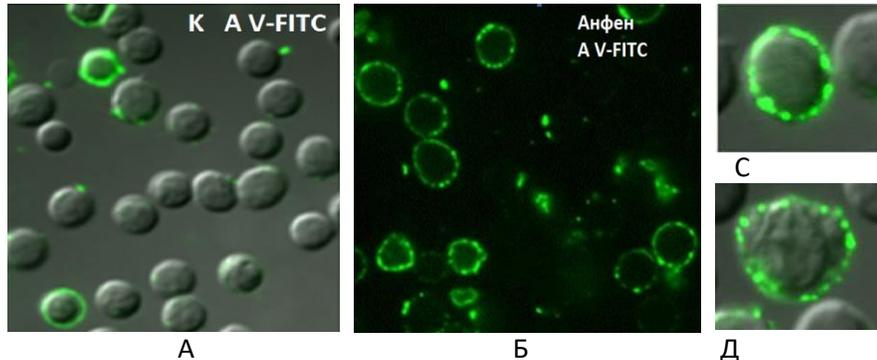


Рисунок 1. Микрофото спленоцитов. Иммунофлуоресценция спленоцитов, с флуорофором Аннексин V-FITC при апоптозе клеток. Наблюдаются округлые гранулы на внешней мембране, относящиеся к NADPH-ферментативным оксидазным комплексам. А-контроль, совмещенный со световым изображением, Б- действие анфена натрия ($10^{-4}M$) + H_2O_2 (5мкМ). С, Д, – апоптотическая клетка спленоцитов (при увеличении). Конфокальный микроскоп, 100x, 488 нм. Культура клеток спленоцитов после инкубации 2ч. при 37^0 в среде 199.

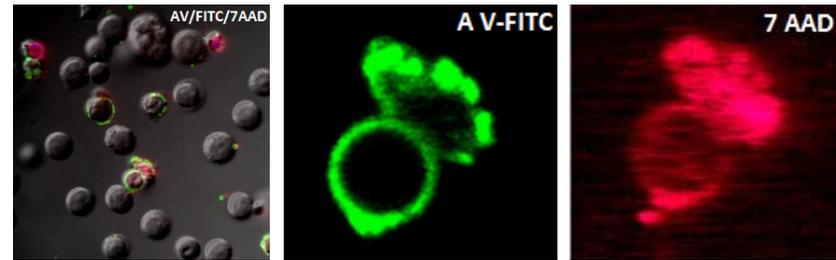


Рисунок 3. Конфокальная микроскопия суспензии клеток селезенки (а) при воздействии H_2O_2 (5 мкМ) с флуорофорами AV FITC/ 7-AAD, (совмещенное со световым изображением.) Клетка нейтрофила (нетоз)с увеличением. (б,с)

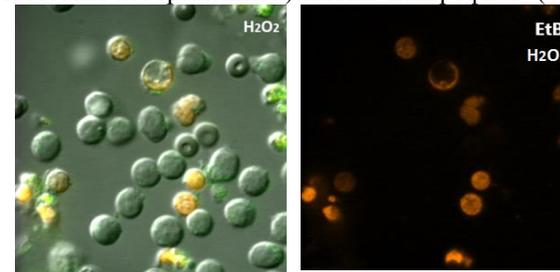


Рисунок 4. Визуализация нежизнеспособных клеток (а-света б- EtBr), при воздействии H_2O_2 (5 мкМ)

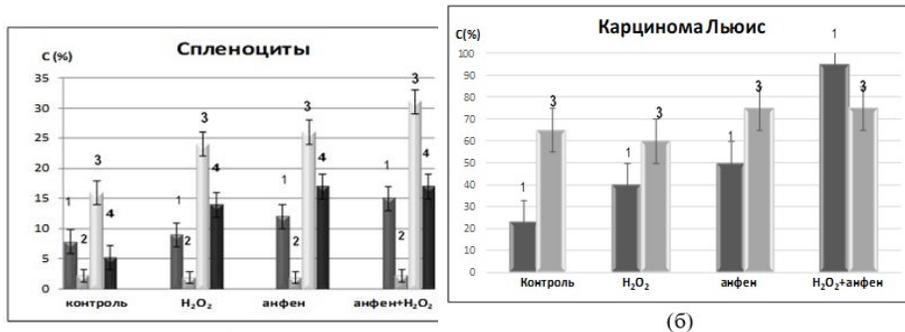


Рисунок 2. Диаграмма (а) изменения числа апоптотических клеток в культуре спленоцитов (а) мышей и мышей с карциномой Льюис (б), под действием анфена натрия ($10^{-4}M$), пероксида водорода (5мкМ) и при совместном воздействии.

По оси Y - Количество клеток (%): с апоптозом - 1 (по экспозиции фосфатидилсерина (Аннексин 5 FITC) , 2 - нежизнеспособных клеток (по связыванию ЭБ с ДНК), 3 - с автофлуоресценцией объектов в клетках (FAD, 4 – с иммунофлуоресценцией гранул (ферментативный NADPH- оксидазный комплекс).

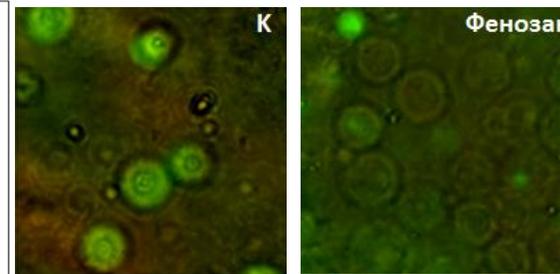


Рисунок 5. снижение числа клеток спленоцитов в апоптозе под действия фенозана калия ($10^{-4}M$).

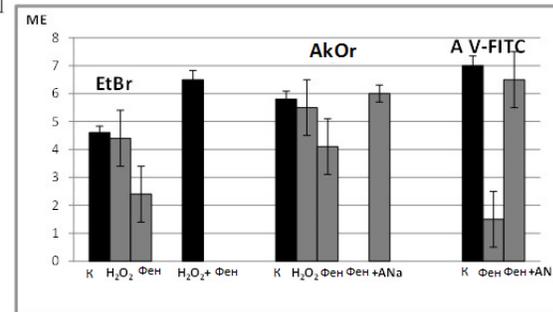
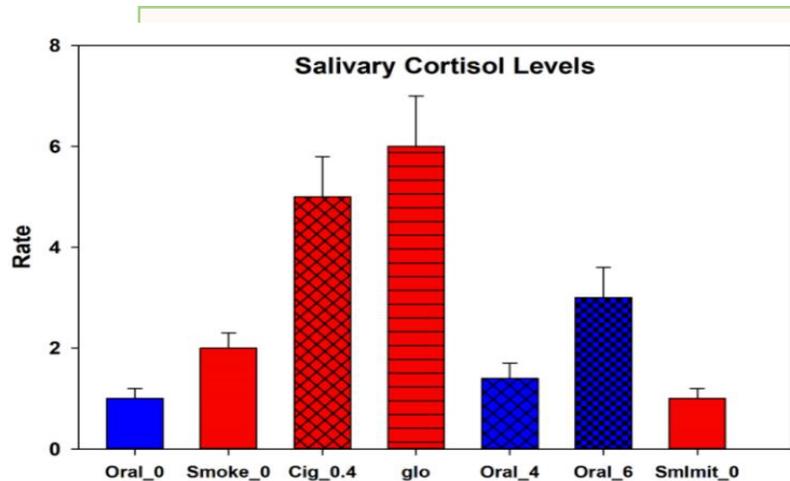


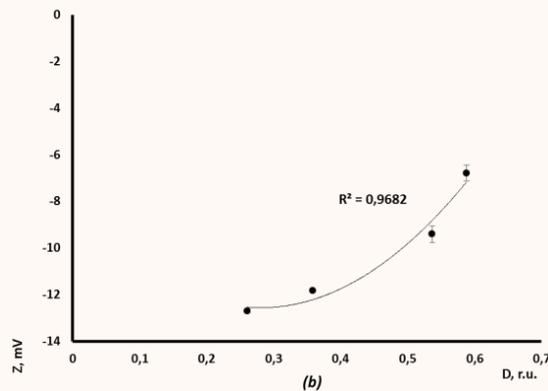
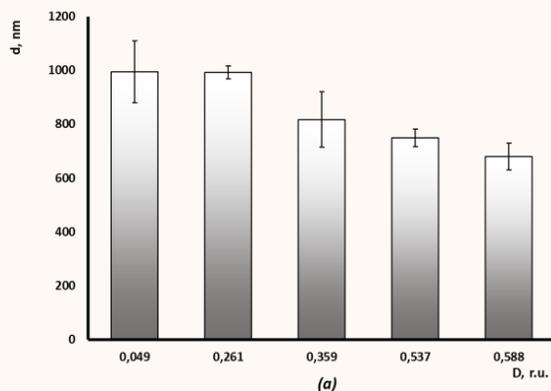
Диаграмма. Снижение числа спленоцитов (%) в апоптозе под действием фенозана калия ($10^{-4}M$), и не отличается от контроля введение фенозана совместно с анфеном. ($10^{-4}M$). Исследование с красителем EtBr, АсОг и Аннексин V FITC(AV FITC).

ОДНОТИПНОСТЬ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ РЕГУЛЯЦИИ ПЕРЕКИСНОГО ОКИСЛЕНИЯ ЛИПИДОВ НА РАЗНЫХ УРОВНЯХ ОРГАНИЗАЦИИ БИООБЪЕКТОВ – ОСНОВА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОСЛЕДСТВИЙ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПОВРЕЖДАЮЩИХ ФАКТОРОВ



Пиковые изменения уровня кортизола в слюне добровольцев после курения

Различия фармакокинетики никотина при использовании пэков и курении сигарет позволяет заметно снизить воздействие токсических веществ при использовании пэков оральной фиксации и облегчить переход курильщика к полному избавлению от зависимости.



Размер частиц лецитина в дистиллированной воде и в присутствии природной воды (а) и ζ -потенциал агрегатов лецитина в воде рек Дубна, Сестра, Дон и Усмань (Воронежский заповедник) (б) в зависимости от содержания гидрофобных соединений в среде.

Лаборатория фото- и хемилюминесцентных процессов совместно с Лабораторией физико-химических проблем радиобиологии и экологии

(Н.Г. Бердникова, В.А. Меньшов, А.В. Трофимов, О.И. Яблонская) при участии Сеченовского университета (*итог 3-летнего цикла работ*)

Исследования свойств альтернативных средств доставки никотина (АСДН) и возможностей их использования в стратегии отказа от курения

АСДН:

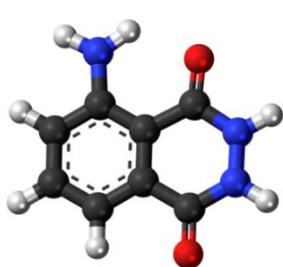
- Электронные системы доставки никотина (ЭСДН), они же “Электронные сигареты”;
- Электронные системы нагревания табака (ЭСНТ);
- Никотиновые продукты оральной фиксации (НПОФ) - снюс и “бестабачный снюс”.

Отработаны следующие экспериментальные методы и подходы:

- Хемилюминесцентные методы исследования про- и антиоксидантных свойств никотинсодержащих и безникотиновых аэрозолей (табачный дым, эмиссии из ЭСДН и ЭСНТ);
- Хемилюминесцентные методы исследования генерации активных форм кислорода (АФК) клетками крови при воздействии на них никотина, компонентов дыма и веществ, выделяемых АСДН;
- Электрофизиологические методы изучения активности вегетативной нервной системы потребителей традиционной (табачные изделия) и новой (АСДН) никотинсодержащей продукции, а также пользователей безникотиновых имитаторов курения.

Публикация 2022 г.:

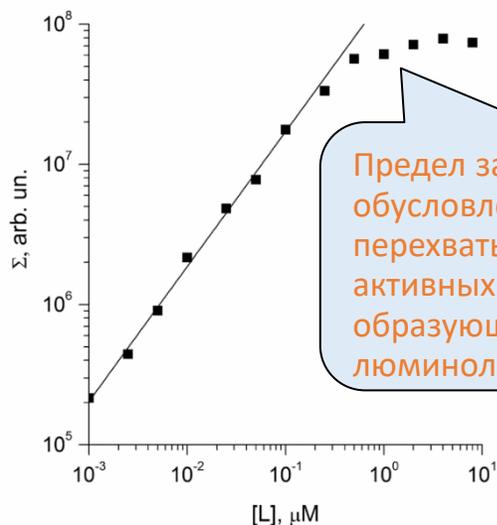
V.A. Menshov, A.V. Trofimov, A.V. Zagurskaya, N.G. Berdnikova, O.I. Yablonskaya, A.G. Platonova, Influence of nicotine from diverse delivery tools on the autonomic nervous and hormonal systems, *Biomedicines* **2022**, *10*, 121



Новые аспекты хемилюминесценции люминола

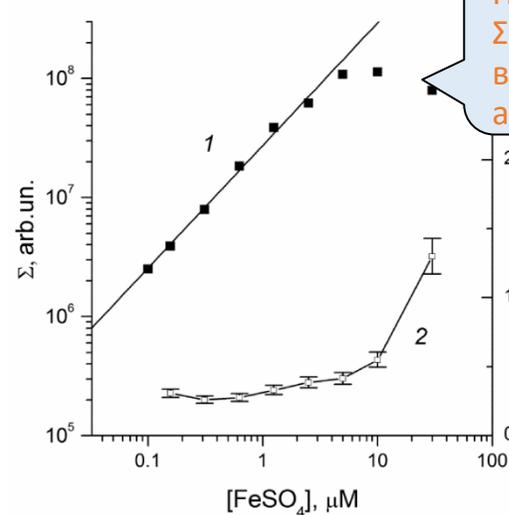
1. Хемилюминесценция в реакции с ионами Fe(II):

- Fe(II) реагирует с растворенным O₂, при этом образующиеся интермедиаты зависят от условий протекания реакции;
- Быстропротекающая хемилюминесценция инициируется короткоживущими окислителями (наиболее вероятно, лабильными соединениями железа (IV)), которые возникают при окислении гидроксокомплексов железа(II).



Предел зависимости $\Sigma([L])$ обусловлен перехватыванием всех активных частиц, образующиеся из Fe(II), люминолом.

Зависимость выхода света (Σ) от концентрации люминола ($[L]$) при $[\text{NaOH}] = 0.8 \text{ mM}$ и $[\text{FeSO}_4] = 30 \text{ mM}$.



Предел зависимости $\Sigma([\text{Fe(II)}])$ определяется взаимодействием активных частиц с Fe(II).

Зависимости выхода света (Σ) (1) и времени испускания половины светосуммы (2) от $[\text{Fe(II)}]$ при $[\text{NaOH}] = 0.8 \text{ mM}$ и $[L] = 4 \text{ mM}$.

Лаборатория фото- и хемилюминесцентных процессов

(В.В. Птушенко)

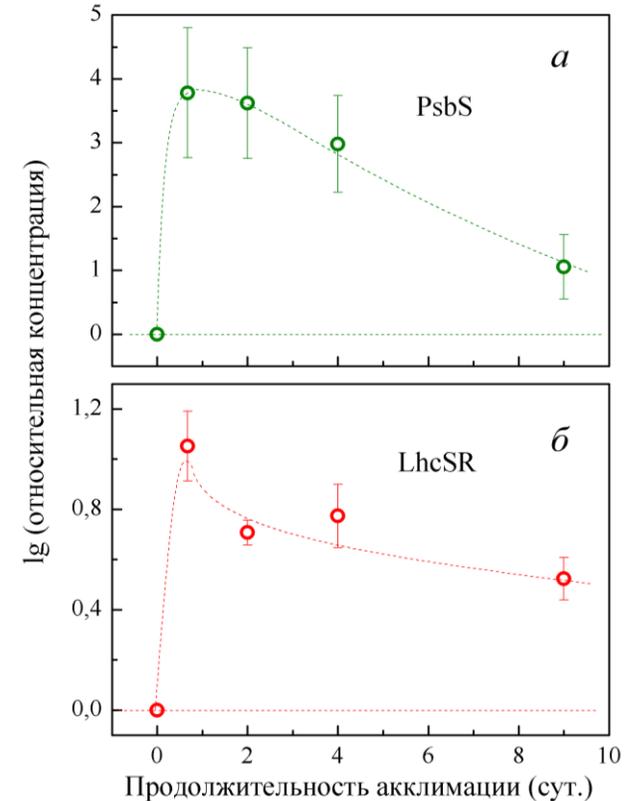
Исследование механизмов устойчивости к низкой температуре фотосинтетического аппарата

- **Впервые** у крупной группы фотосинтезирующих организмов (отдел *Chlorophyta*) обнаружена долговременная дифференциальная экспрессия белка **PsbS**, ответственного за защиту фотосинтетического аппарата от избыточного освещения (за счет стимуляции нефотохимического тушения возбужденных состояний хлорофилла).
- Ранее считалось, что данный белок появляется в ходе эволюции как элемент фотопротекторной системы лишь у наземных растений.

Изменения уровня экспрессии белка **PsbS** и его функционального аналога **LhcSR**, который до сих пор считался основным участником фотопротекторного нефотохимического тушения у *Chlorophyta* и других групп водорослей, происходящие после начала стрессовых воздействий на клетку:

Публикация 2022 г.:

В.В. Птушенко, Г.Н. Бондаренко, Е.Н. Виноградова, Е.С. Глаголева, О.В. Карпова, О.С. Птушенко, А.Е. Соловченко, К.А. Шибзухова, Индукция экспрессии фотозащитных белков PSBS и LHCSR в клетках зеленой микроводоросли *Lobosphaera incisa* IPPAS C-2047 под действием низкой положительной температуры, *Биохимия* **2022**, 87(12)



ЛАБОРАТОРИЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОНКОЛОГИИ

РЕЗИСТЕНТНЫЕ К ЦИСПЛАТИНЕ И АДРИАМИЦИНУ КЛЕТКИ ОПУХОЛИ ЧЕЛОВЕКА (MCF-7)
СОХРАНЯЮТ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К ЦИТОТОКСИЧЕСКОМУ ДЕЙСТВИЮ АУРУМАКРИЛА И АРГАКРИЛА

ГИБЕЛЬ ПОД ВЛИЯНИЕМ ПРЕПАРАТОВ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ (MCF-7)
И РЕЗИСТЕНТНЫХ К ЦИСПЛАТИНЕ (MCF-7/CP) И К АДРИАМИЦИНУ (MCF-7/ADR) КЛЕТОК

АУРУМАКРИЛ $(-CH_2-CHSOOH)_n(-CH_2CHSOO AuCl_3H)_m$



АРГАКРИЛ $(-CH_2-CHSOOH)_n(-CH_2CHSOO AgCl_3H)_m$



ОБНАРУЖЕНО ОТСУТСТВИЕ ПЕРЕКРЁСТНОЙ РЕЗИСТЕНТНОСТИ У ПОЛИАКРИЛАТОВ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА С ЦИСПЛАТИНОЙ И С АДРИАМИЦИНОМ

ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЦИТОТОКСИЧНОСТИ IC_{50}
(В ПЕРЕСЧЁТЕ НА СОДЕРЖАНИЕ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА)
В ОТНОШЕНИИ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ (MCF-7)
И РЕЗИСТЕНТНЫХ К ЦИСПЛАТИНЕ (MCF-7/CP) И К АДРИАМИЦИНУ (MCF-7/ADR)
КЛЕТОК ОПУХОЛИ ЧЕЛОВЕКА

ПРЕПАРАТ	КУЛЬТУРА КЛЕТОК		
	MCF-7	MCF-7/CP	MCF-7/ADR
	IC_{50} , мкг/мл		
АУРУМАКРИЛ	10	9,6	6
АРГАКРИЛ	4	3,2	3,2

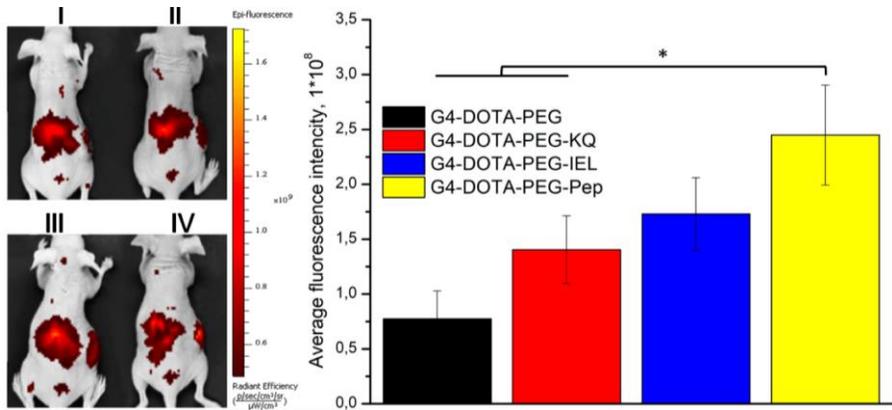
ПОКАЗАТЕЛЬ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ IC_{50} ПРЕПАРАТОВ ИМЕЕТ БЛИЗКИЕ ЗНАЧЕНИЯ
ДЛЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ И РЕЗИСТЕНТНЫХ К ЦИСПЛАТИНЕ И К АДРИАМИЦИНУ КЛЕТОК

Л.А. Островская, Д.Б. Корман, Е.И. Некрасова, Ю.А. Хоченкова, Н.В.Блюхтерова, К.А. Абзаева
«Полиакрилаты благородных металлов – цитотоксичность в отношении резистентных
к цисплатине и доксорубину опухолевых клеток» Биофизика, 2022, т.67, №5, 947-955.

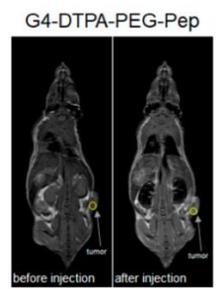
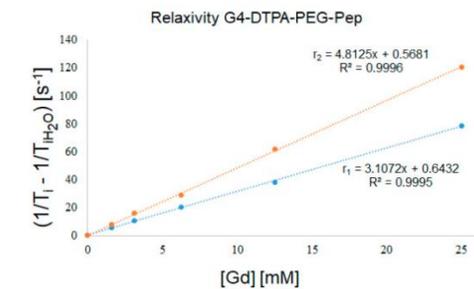
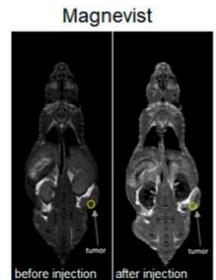
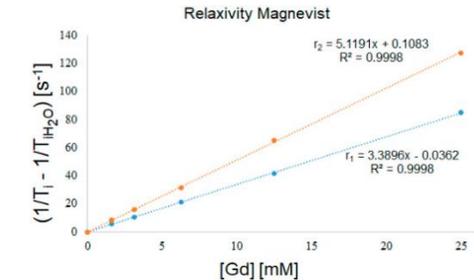
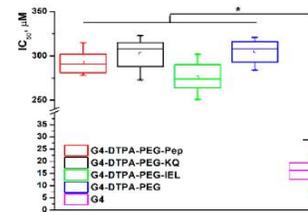
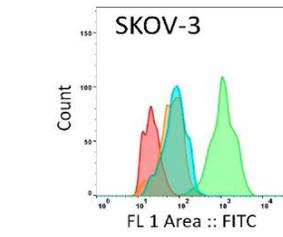
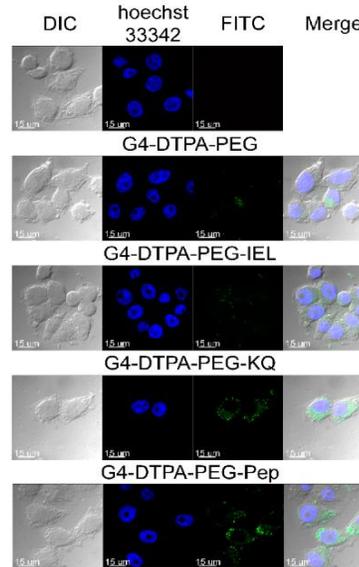
Синтез и исследование свойств наноразмерных систем доставки на основе дендримеров адресного действия для тераностики онкологических заболеваний

Была продемонстрирована стратегия одновременного двойного нацеливания на два разных участка опухолевой ткани: опухолевый эндотелий и рецепторы клеточной поверхности, для проведения тераностики онкологических заболеваний.

В качестве мишеней были выбраны Р-селектин, маркер воспаленной сосудистой сети, также характерный для опухолевой ткани, и рецептор альфа-фетопротейна человека (АФПР), являющийся маркером широкого спектра опухолей. Дендримеры были функционализированы пептидом, обладающим сродством к селектину и пептидом к АФПР.



Было показано увеличение противоопухолевого эффекта по сравнению с монотаргетными конъюгатами



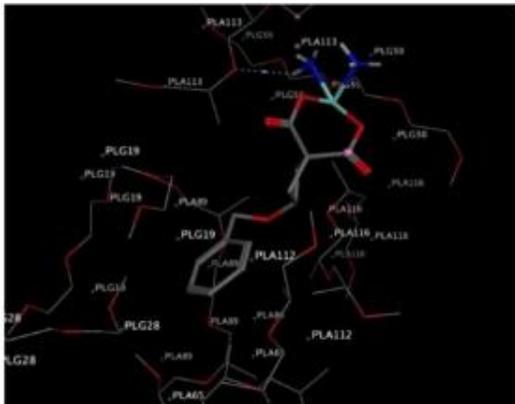
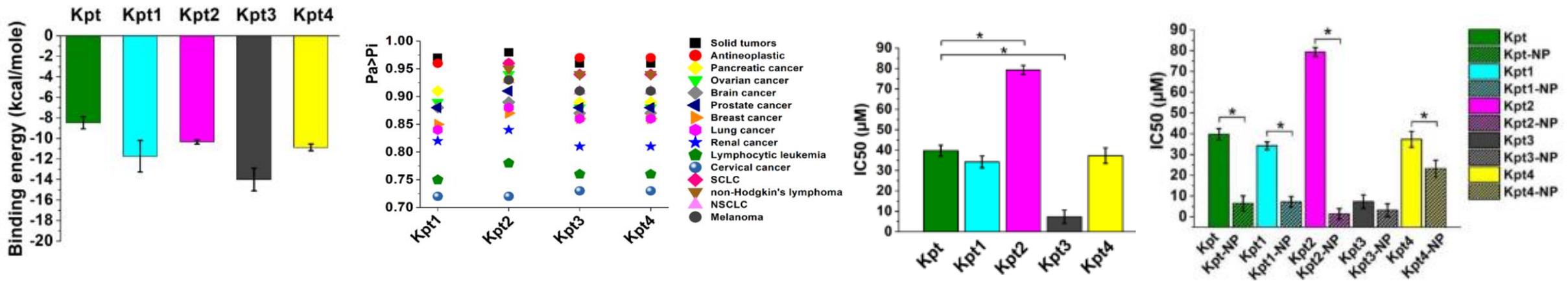
По результатам работы была опубликована статья:

Yabbarov N, Nikolskaya E, Sokol M, Mollaeva M, Chirkina M, Seregina I, Gulyaev M, Pirogov Y, Petrov R. «Synergetic Enhancement of Tumor Double-Targeted MRI Nano-Probe». *International Journal of Molecular Sciences*. 2022; 23(6):3119. IF 6.208 (Q1)

В экспериментах in vitro и in vivo полученный конъюгат адресного действия на основе дендримеров продемонстрировал МРТ-контрастирующую способность и четкую локализацию в опухолевых клетках и тканях

Оптимизации инкапсуляции и противоопухолевой эффективности новых структурных производных карбоплатина в составе наночастиц PLGA с применением методов in silico

Полученные наночастицы проявили более высокий уровень цитотоксической активности в отношении нескольких линий опухолевых клеток по сравнению с неинкапсулированными производными карбоплатина. Таким образом, **наночастицы продемонстрировали высокий потенциал**, а полученные результаты продемонстрировали применимость комбинации методов in silico и in vitro при разработке новых полимерных систем доставки лекарственных соединений.



Был применен сервис PASS для прогнозирования биологической активности новых производных карбоплатина. Молекулярное моделирование выявило зависимость между энергией связывания соединений с полимером (PLGA), химической структурой производных платины (Kpt), эффективностью их инкапсуляции.

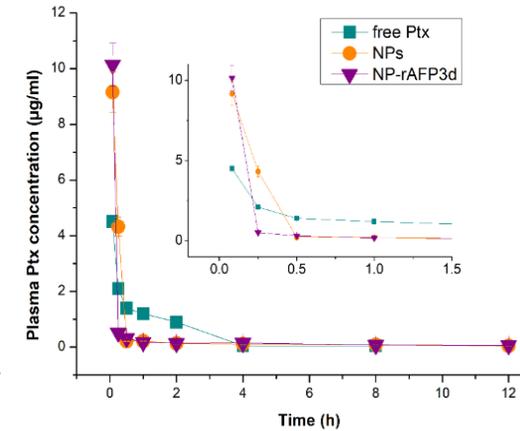
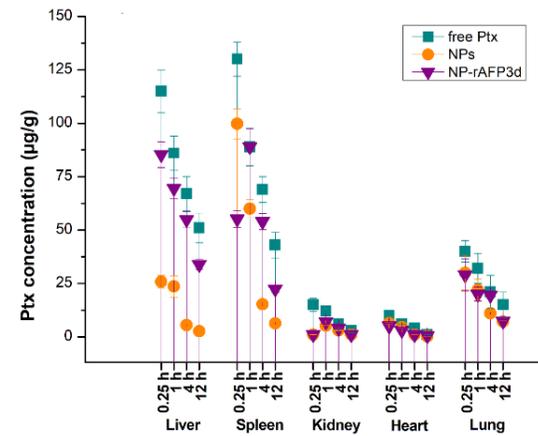
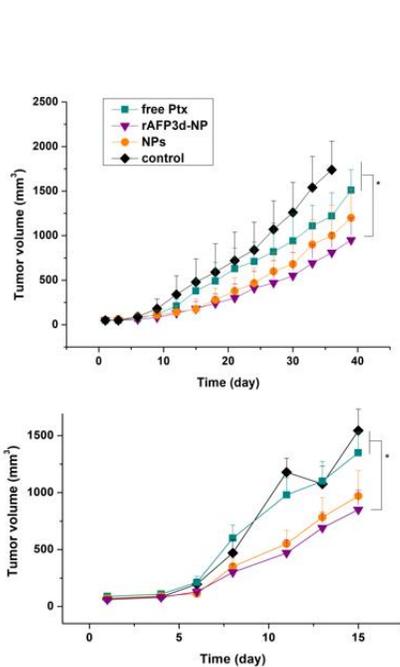
По результатам работы была опубликована статья:

Sokol MB, Chirkina MV, Yabbarov NG, Mollaeva MR, Podrugina TA, Pavlova AS, Temnov VV, Hathout RM, Metwally AA, **Nikolskaya ED**. Structural Optimization of Platinum Drugs to Improve the Drug-Loading and Antitumor Efficacy of PLGA Nanoparticles. *Pharmaceutics*. 2022; 14(11):2333. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14112333>. **IF 6.525 (Q1)**



Получение полимерных наночастиц паклитаксела адресного действия и исследование их биологической активности для лечения солидных опухолей

Цель данной работы заключалась в разработке новой лекарственной формы паклитаксела – наночастиц из сополимера молочной и гликолевой кислот (PLGA), конъюгированных с третьим доменом альфа-фетопротейна (rAFP3d-NP), для повышения профиля безопасности паклитаксела.



Увеличение площади под кривой при исследовании биораспределения и времени полувыведения после введения rAFP3d-NP подтвердило длительную циркуляцию в крови по сравнению с субстанцией паклитаксела.

Конъюгат rAFP3d-NP продемонстрировал значительное ингибирование роста опухоли на моделях линии 4T1 и SKOV-3

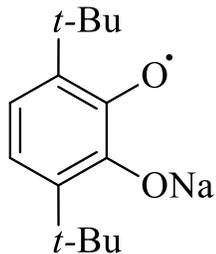
Было доказано, что синтезированный конъюгат является перспективной системой доставки и может быть использован в качестве модельной системы для эффективной доставки других гидрофобных препаратов в опухолевые клетки и ткани.

По результатам работы была опубликована статья:

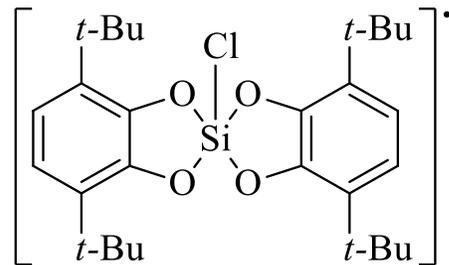
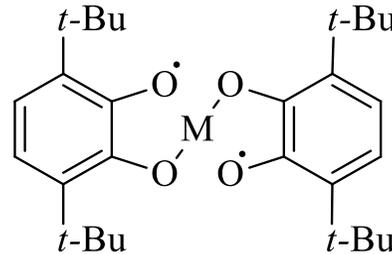
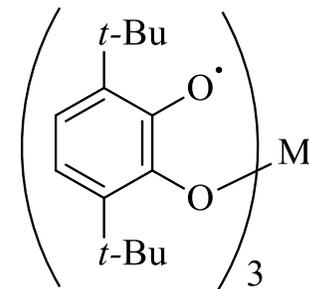
Mariya B Sokol, Nikita G Yabbarov, Mariia R Mollaeva, Margarita V Chirkina, Murad D Mollaev, Artur I Zabolotsky, Sergey L Kuznetsov, Elena D Nikolskaya. Alpha-fetoprotein mediated targeting of polymeric nanoparticles to treat solid tumors // *Nanomedicine*. 2022. Volume 17, issue 18. P.: 1217–1235 <https://doi.org/10.2217/nnm-2022-0097>
IF 6.096 (Q1)

NaCl – АКТИВНАЯ СРЕДА ДЛЯ ТВЕРДОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

✓ NaCl использован в качестве среды для твердофазного окисления экранированных фенолов. Обнаружено его химическое участие в процессе, включающее гомолиз с образованием атомов Na^\bullet и Cl^\bullet . Свидетельством этого явилась регистрация парамагнитных частиц при окислении редокс-пары 3,6-ди-трет-бутилпирокатехин (Cat) – 3,6-ди-трет-бутил-ортобензохинон (Q) в среде NaCl под воздействием давления и сдвиговых деформаций в шнековых устройствах и на поворотных наковальнях Бриджмена. Парамагнитные частицы методом ЭПР идентифицированы как 3,6-ди-трет-бутил-ортобензосемихинолят натрия (SQNa) (триплет от двух эквивалентных протонов кольца a_{H} 3.3 Э, каждая компонента триплета содержит квадруплет от магнитных ядер катиона натрия J 3/2). Атом хлора идентифицирован в виде его парамагнитного аддукта с ортокремневым эфиром $(\text{Cat})_2\text{Si}$ как радикал $(\text{Cat})_2\text{SiCl}^\bullet$. Количество регистрируемых парамагнитных частиц составляет $\sim 0.1\%$, однако они, по-видимому, выполняют функцию активных интермедиатов в образовании семихинолятных металлокомплексов в превращениях пары Cat-Q в NaCl в присутствии порошков металлов. Получены 2-х и 3-х-лигандные металлокомплексы $(\text{SQ})_2\text{M}$ ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Zn}$) и $(\text{SQ})_3\text{M}$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{Al}, \text{W}, \text{V}$).



SQNa

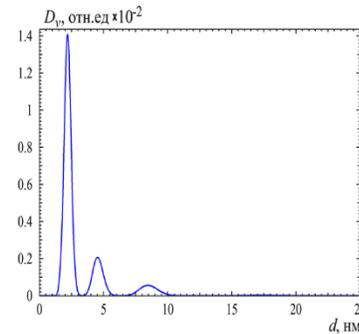
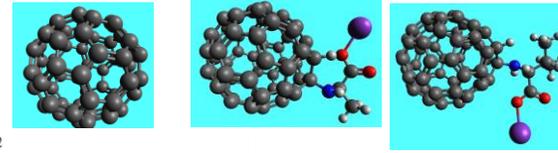
 $(\text{Cat})_2\text{SiCl}^\bullet$  $(\text{SQ})_2\text{M}, \text{M} = \text{Cu}, \text{Zn}$  $(\text{SQ})_3\text{M}, \text{M} = \text{Cr}, \text{Al}, \text{W}, \text{V}$

✓ Комплексы стабильны, не претерпевают изменений при хранении, могут использоваться в качестве парамагнитных зондов.

Лаборатория химии антиоксидантов

Структура, свойства и биологическое действие коллоидных растворов монозамещенных фуллеренов C₆₀ (В.А. Волков, М.В. Воронков)

МАЛОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЙАНИЕ выявило, что наночастицы аланиновых производных фуллерена в водной среде состоят из небольшого числа молекул, однако, эти наночастицы способны упорядоченно агрегировать по типу фрактальных структур с соотношением размеров агрегатов 1:2:4:8.



СТИМУЛЯЦИЯ НАКОПЛЕНИЯ БИОМАССЫ ЛЕКАРСТВЕННЫХ БАЗИДИОМИЦЕТОВ

Данный эффект солюбилизированных форм фуллерена C₆₀ выявлен впервые. Наибольшее увеличение биомассы при введении назких доз АПФ в среду культивирования наблюдается у грибов с исходно высоким уровнем окислительного метаболизма.

Образец	Биомасса, % к контролю	ТБК-РП, мкМ/г (контроль)	ТБК-РП, % к контролю
F. vel. with C ₆₀	119,6±3,6	8,5±0,5	74,7±4,8
F. vel. with H-C ₆₀ -L-Ala-OK	113,2±5,6	9,4±0,6	96,0±6,1
F. vel. with H-C ₆₀ -D-Ala-OK	104,2±2,8	6,4±0,4	91,2±5,8
F. vel. with H-C ₆₀ -D-Val-OK	109,4±1,6	9,4±0,6	98,4±6,3
G. app. with H-C ₆₀ -D-Ala-OK	118,4±4,5	15,9±1,0	134,7±7,8
L. sulph. with C ₆₀	217,4±7,6	69,3±4,4	59,6±3,8
L. sulph. with H-C ₆₀ -L-Ala-OK	196,7±12,3	57,6±3,7	55,6±3,6
L. sulph. with H-C ₆₀ -D-Ala-OK	240,1±12,6	57,6±3,7	51,9±3,3

ИНДУКЦИЯ БИОСИНТЕЗА АНТИБИОТИКОВ

В присутствии водорастворимых производных фуллерена культивируемые погруженным способом базидиомицеты продуцируют экзометаболиты с выраженными антибактериальными свойствами:

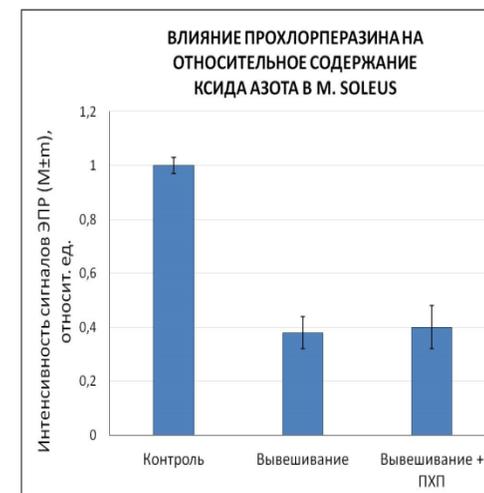
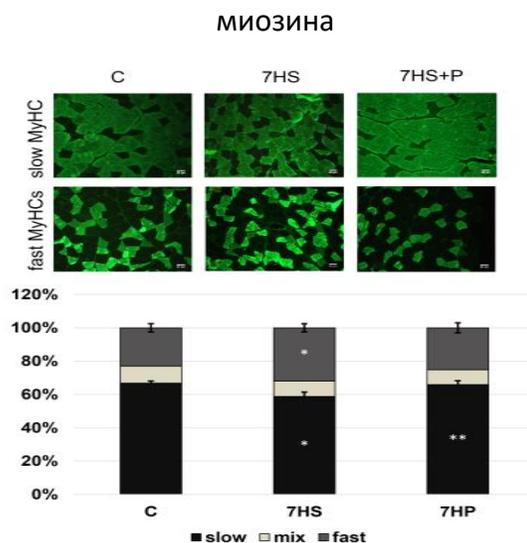
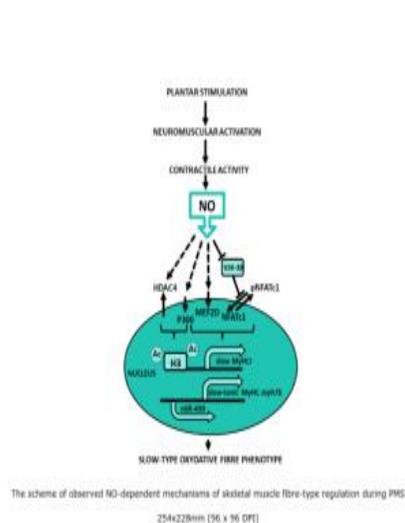
Штамм гриба базидиомицеты	Фуллерен C ₆₀ -содержащая добавка		Результаты тестирования на бактерицидную активность	
	Соединение	Концентрация в питательной среде, моль/л	Тест-микроорганизм	Ширина зоны ингибирования, не менее, мм
Laetiporus sulphureus 120707	H-C ₆₀ -D-Ala-OK	1×10 ⁻⁶	Micrococcus luteus B-109	12
			Pectobacterium atrosepticum 1043	12
			Pectobacterium carotovorum subsp. carotovorum 603	14
			Pseudomonas fluorescens EL-2.1	12
			Xanthomonas campestris B-610	10
	H-C ₆₀ -D-Val-OK	1×10 ⁻⁶	Pseudomonas fluorescens EL-2.1	8
			H-C ₆₀ -ε-ACA-OK	1×10 ⁻⁶
	Отсутствует (контроль)			

По результатам проведенных работ Роспатент зарегистрировал 2 заявки на изобретения:

1. Способ стимуляции роста мицелия грибов базидиомицетов. Регистрационный № 2022115122 от 03.06.2022 г.
2. Способ получения продуктов с антибактериальной активностью из мицелия базидиомицетов. Регистрационный № 2022125592 от 30.09.2022 г.

Продолжена разработка предложенной модели транскрипции мРНК цепей миозина в условиях мышечной разгрузки, ключевым медиатором в которой является оксид азота. С помощью блокатора ионных каналов парахлорперозина, показана важная роль калий-хлоридного ко-транспортера КСС-2 в изменении соотношения быстрых и медленных МИОЗИНОВЫХ ВОЛОКОН

- Влияние прхлоперозина на соотношение быстрых и медленных мышечных волокон

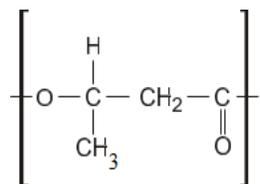


Kristina A. Sharlo , Inna I. Paramonova 1, Irina D. Lvova , Ekaterina P. Mochalova , Vitaliy E. Kalashnikov ,Natalia A. Vilchinskaya , Sergey A. Tyganov , Tatyana S. Konstantinova , Tatiana F. Shevchenko ,Grigoriy R. Kalamkarov/ Plantar mechanical stimulation maintains slow myosin expression in disused rat soleus muscle via NO-dependent signaling *Int. J. Mol. Sci.* (2021) 22, 1372. <https://doi.org/10.3390/ijms22031372> (Q1)

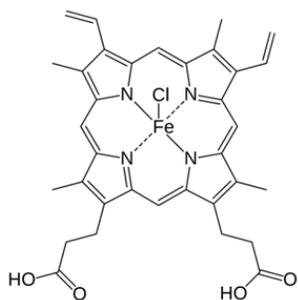
Kristina S. Sharlo, Irina D. Lvova, Sergey A. Tyganov, Xenia V. Sergeeva, Vitaly Y. Kalashnikov, Ekaterina P. Kalashnikova, Timur M. Myrzoev, Tatiana F. Sevchenko Boris S. Shenkman, and Grigoriy R. Kalamkarov The prochlorperazine-induced decrease of the autonomous muscle activity during hindlimb unloading is accompanied by the preserved slow myosin mRNA expression *Int. J. Mol. Sci.* (2022) **subm.(Q1)**

Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров

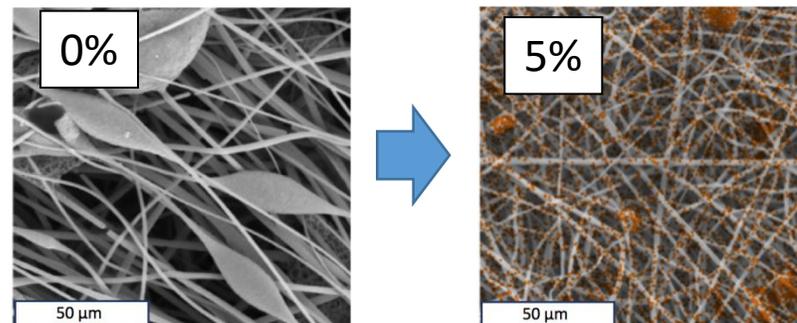
Создание биосовместимых материалов на основе поли-3-гидроксибутирата и гемина для регенеративной медицины.



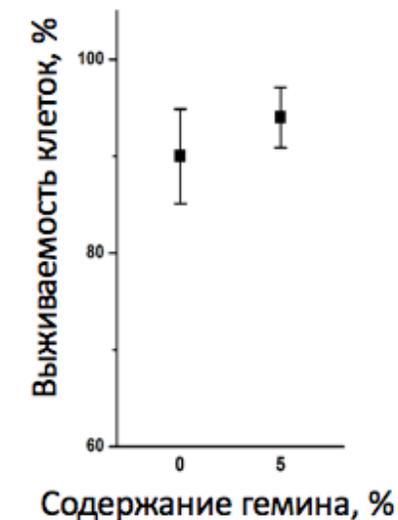
поли-3-гидроксибутират



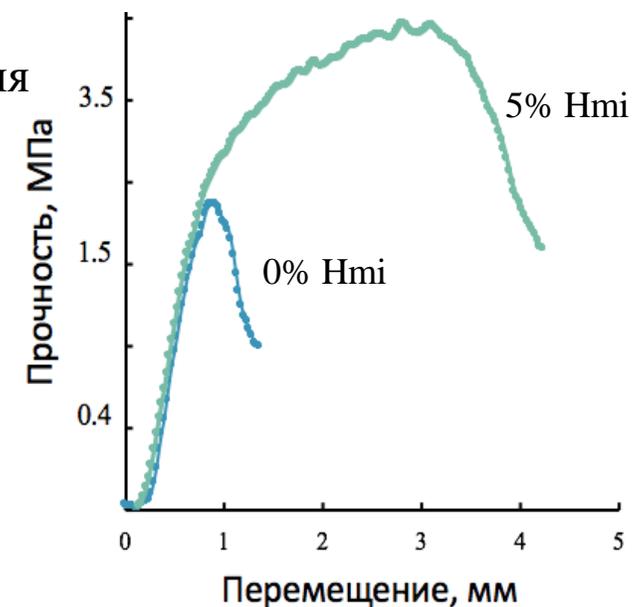
Гемин (Hmi)



- Улучшение морфологии волокон, равномерное распределение добавки в структуре материала.
- Увеличение прочности и удлинения более, чем в 3 раза.
- Высокая антимикробная активность в отношении *S. aureus*, *E. Coli*, *S. typhimurium*.



- Высокая биосовместимость.



[1] Tyubaeva P.; Varyan I.; et al. Bioinspired Electrospun Fibrous Materials Based on Poly-3-Hydroxybutyrate and Hemin: Preparation, Physicochemical Properties, and Weathering.

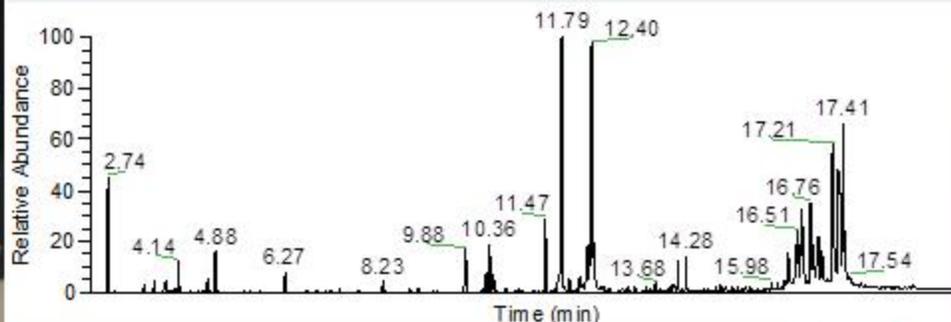
Polymers 2022, 14, 4878. **Q1, IF 4.3**

[2] Tyubaeva P.; Popov A.; et al. The Comparison of Advanced Electrospun Materials Based on Poly(-3-hydroxybutyrate) with Natural and Synthetic Additives. **J. Funct. Biomater.** 2022, 13, 23. **Q1, IF 4.5**

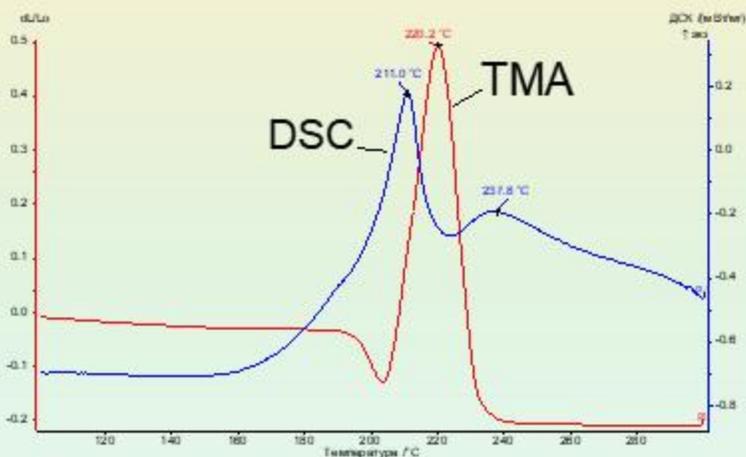
Разработка огнезащитных покрытий для металлических конструкций на основе окисленных производных природных полисахаров. Синтез и изучение свойств интумесцентных составов



Хроматограмма производных продуктов окисления крахмала



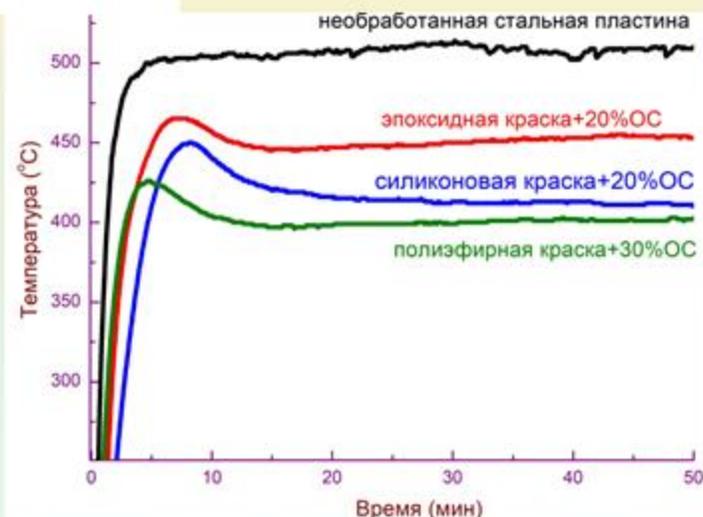
Производные продуктов окисления	Содержание (%)
карбоновые кислоты	2.2
лактоны	5.8
моносахариды (пиранозы)	51.1
дисахариды	39.9



← 2-я секунда

Время от начала испытаний

1-я минута →



Термический анализ разработанных покрытий по металлу показал высокие значения термических и огнестойких характеристик для всех разработанных огнезащитных составов.

Разработанные покрытия обеспечивают 3-ю группу огнезащитной эффективности металлических конструкций, соответствующую параметру R90, при сохранении адгезионных характеристик исходных красок по металлу.

УЛЬТРАВОЛОКНИСТЫЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА (ПЛА) И ОЗОНИДА ТРИГЛИЦЕРИДА ОЛЕИНОЙ КИСЛОТЫ (ОТОК)

Разработаны композиционные материалы на основе ПЛА с различным содержанием ОТОК, которые обладают бактерицидным эффектом и позволяют получить высокоэффективные, биodeградируемые и биорезорбируемые средства дезинфекции и гигиены в отношении условно-патогенных и патогенных микроорганизмов

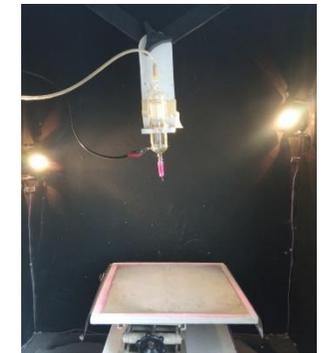
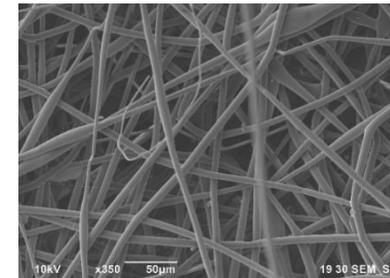
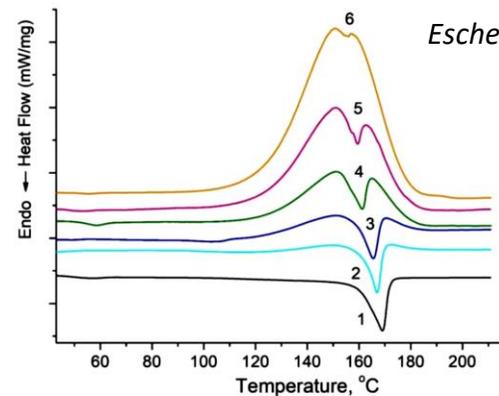
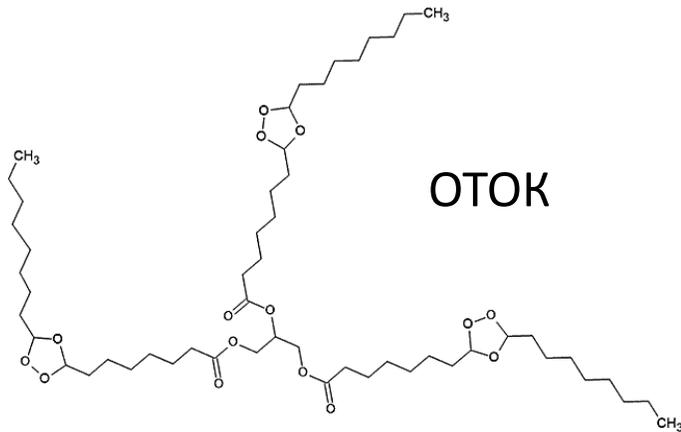
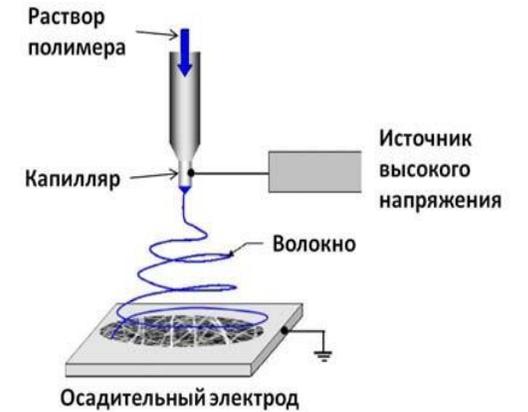


Тест-культуры:

Staphylococcus aureus P209 (золотистый стафилококк)

S. typhimurium (сальмонелла)

Escherichia coli 1257 (кишечная палочка)



Термограммы ДСК первого нагрева для образцов пленок исходного ПЛА и ПЛА/ОТОК (1–70%).

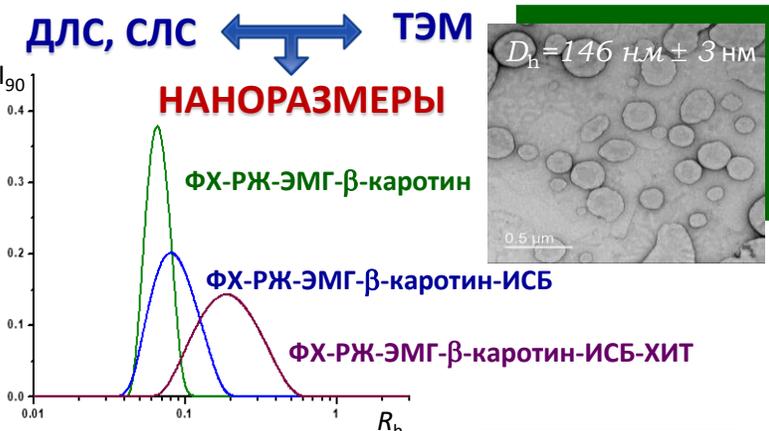
Лаборатория функциональных свойств биополимеров

ВОДОРАСТВОРИМЫЕ БИОПОЛИМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ ФОРМ РАЗЛИЧНЫХ КОМБИНАЦИЙ ГИДРОФОБНЫХ НУТРИЦЕВТИКОВ

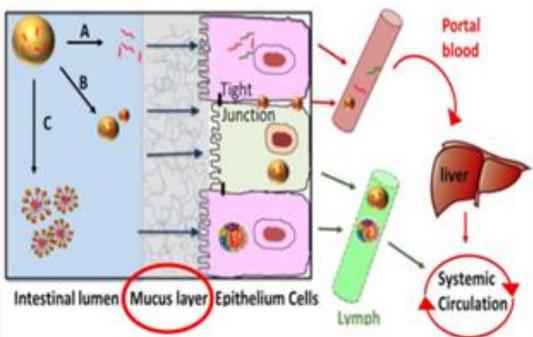
ЭПР: СОСТОЯНИЕ БИСЛОЯ ЛИПОСОМ

ОБРАЗЕЦ	$\tau_{c1} \times 10^{10}$ (сек)	$\tau_{c2} \times 10^{10}$ (сек)
ФХ	9.3 ± 0.1 ^a	8.7 ± 0.2 ^a
ФХ-РЖ	6.1 ± 0.3 ^b	6.0 ± 0.2 ^b
ФХ-РЖ-ЭМГ	5.8 ± 0.1 ^{bc}	5.4 ± 0.1 ^{bc}
ФХ-РЖ-ЭМГ-ДЗ-ГАМК	5.7 ± 0.1 ^c	5.6 ± 0.1 ^c
ФХ-РЖ-ЭМГ-ДЗ	6.3 ± 0.3 ^b	6.2 ± 0.3 ^b
ФХ-РЖ-куркумин	6.5 ± 0.3 ^b	6.2 ± 0.1 ^b
ФХ-РЖ-ЭМГ-β-каротин	6.8 ± 0.3 ^b	6.4 ± 0.2 ^b

РЖ: 27.6% ЭПК + 20% ДГК; ЭМГ: 72% эвгенол

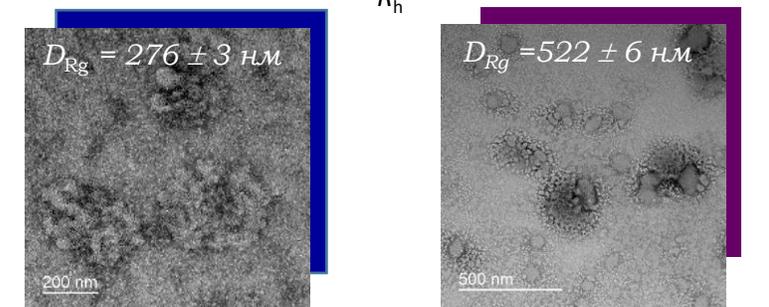


Моделирование переваривания в ЖКТ in-vitro: БИОДОСТУПНОСТЬ И БИОУСВОЕНИЕ



Образец	ζ-потенциал (мВ)
КОМПЛЕКС*	+ 18.3 ± 0.4 ^a
МУЦИН	- 2.5 ± 0.3 ^b
МУЦИН + КОМПЛЕКС*	- 1.5 ± 0.1 ^c

КОМПЛЕКС *	$M_w \times 10^{-6}$ (Да)	$d \times 10^3$ (г см ⁻³)	ζ-потенциал (мВ)	количество выпущенных липидов (%)
До гидролиза	700 ± 72 ^a	5.5 ± 0.7 ^a	+ 19.9 ± 0.9 ^a	0 ± 0.06 ^c
Желудок	5.87 ± 0.28 ^b	1.50 ± 0.11 ^b	+ 18.3 ± 0.4 ^b	40 ± 7 ^b
Кишечник – надосадочная жидкость	0.27 ± 0.07 ^c	0.010 ± 0.004 ^c	- 12.7 ± 1.3 ^c	100 ± 4 ^a



Окисление ПНЖК ↔ Дегградация нутрицевтика



*[ИСБ-(ФХ-РЖ-ЭМГ-ГАМК-Д3)]-ХИТ, гидролизованый

2 статьи - Q1, 1 статья - Q2

1. Semenova M.G., Antipova A.S., Martirosova E.I., Chebotarev S.A., Palmira N.P., Bogdanova N.G., Krikunova N.I., Zelikina D.V., Anokhina M.S., Kasparov V.V. The relationship between the structure and functionality of essential PUFA delivery systems based on sodium caseinate with phosphatidylcholine liposomes without and with a plant antioxidant: an in vitro and in vivo study. *Food & Function*, 2022, 13, 2354-2371. **Q1, IF = 6.317**

2. Chebotarev S.A., Antipova A.S., Martirosova E.I., Palmira N.P., Zelikina D.V., Anokhina M.S., Bogdanova N.G., Kasparov V.V., Balakina E.S., Komarova A.P., Semenova M.G. Innovative food ingredients based on the milk protein-chitosan complex particles for the fortification of food with essential lipids. *International Dairy Journal*, 2022, 132, 105402. **Q1, IF = 3.572**

3. Zelikina D.V., Chebotarev S.A., Komarova A.P., Balakina E.S., Antipova A.S., Martirosova E.I., Anokhina M.S., Palmira N.P., Bogdanova N.G., Lysakova E.V., Borisova M.M., Semenova M.G. Efficiency of an oral delivery system based on a liposomal form of a combination of curcumin with a balanced amount of n-3 and n-6 PUFAs encapsulated in an electrostatic complex of WPI with chitosan. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2022, Volume 651, 129630, **Q2, IF = 5.518**

ТЕМА: Структурные и термодинамические аспекты взаимодействий биополимеров в растворе

КЛЮЧЕВЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ, 2022 г:

- **Роль межмолекулярных взаимодействий в формировании структуры и фазового поведения смесей биополимеров в растворе. Энергетика и механизм комплексообразования.**
- **Влияние типа взаимодействий и состава смеси полисахарид/белок на третичную и четвертичную структуру белка:**
 - **сегрегативные**
 - **ассоциативные (“заряд-заряд” и “заряд-диполь”)**

ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

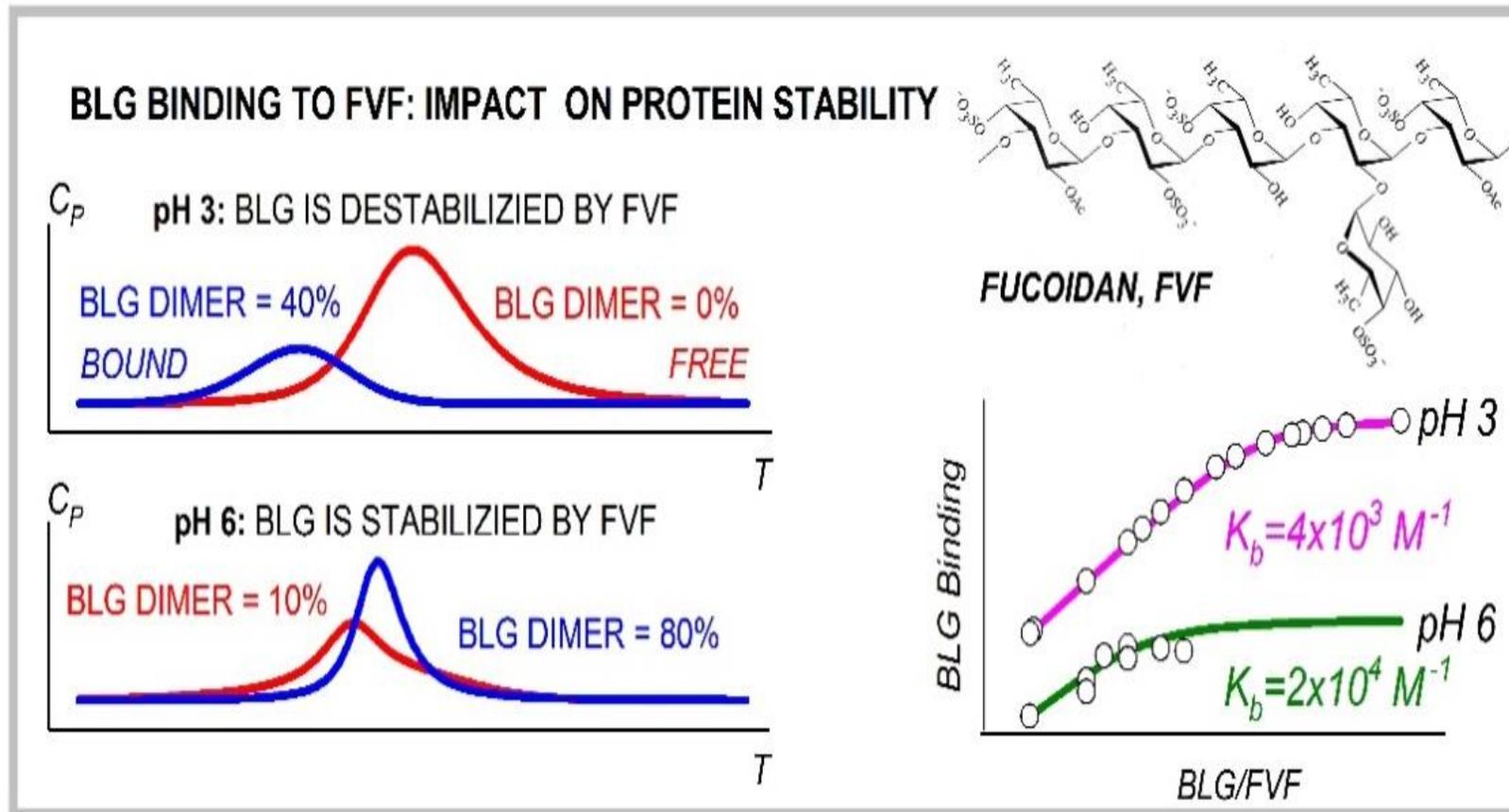
- β - лактоглобули- декстрансульфат
- β - лактоглобулин- фукоидан
- β - лактоглобулин- олигохитозан
- Казеинат натрия – олигохитозан

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

- DSC, ITC, DLS
- скоростная седиментация, нефелометрия
- фазовый анализ

Пример:

β -Lactoglobulin–fucoidan nanocomplexes: Energetics of formation, stability and oligomeric structure of the bound protein

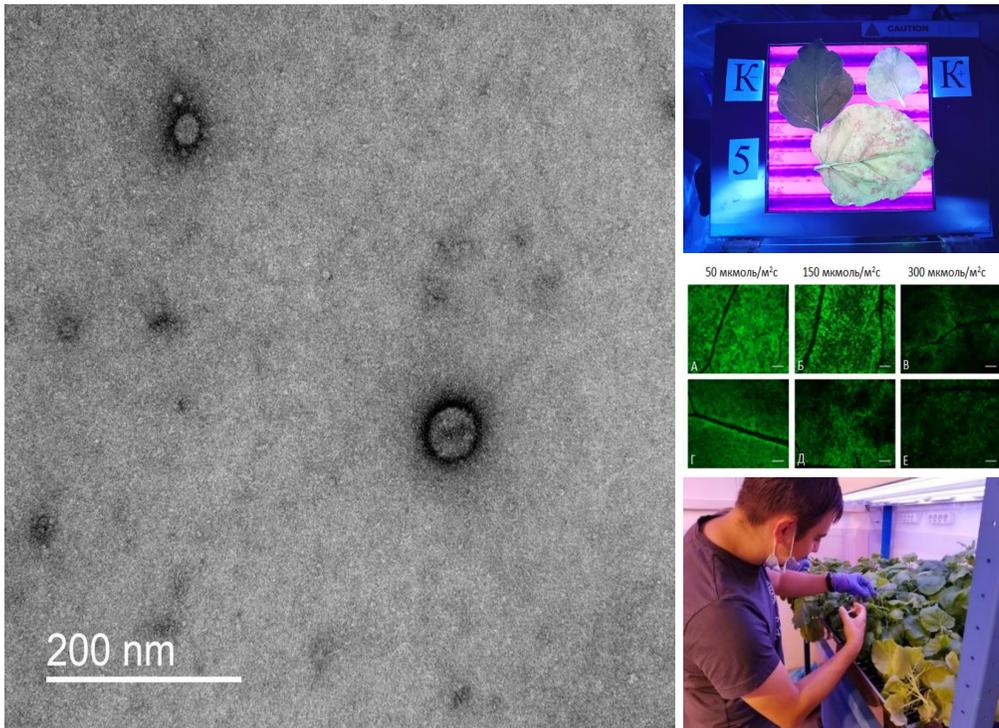


Food Hydrocolloids, 129 (2022), 107666

(IF = 11.504). DOI: 10.1016/j.foodhyd.2022.107666

Основные выводы:

- 1.** Изменения конформационной стабильности БЛГ, индуцированные комплексообразованием с заряженным полисахаридом (ЗПС), определяются типом взаимодействий белок-полисахарид и составом смеси макрокомпонентов.
- 2.** ЗПС не влияет на конформационную стабильность БЛГ, когда оба биополимера одноименно (положительно) заряжены и термодинамически несовместимы.
- 3.** Диполь-заряд (вблизи рI БЛГ) и заряд-заряд ассоциативные взаимодействия промотируют образование стабильных, преимущественно растворимых комплексов БЛГ-ЗПС. В этом случае сродство ЗПС к БЛГ имеет энтальпийную природу и высокую константу связывания (порядка 10^6 M^{-1}).
- 4.** Обратимое связывание БЛГ с ЗПС имеет место в условиях низкой ионной силы, тогда как необратимая стехиометрическая интерполиэлектролитная реакция наиболее вероятно реализуется при довольно высокой ионной силе.
- 5.** Комплексообразование промотирует изменения четвертичной структуры белка в направлении образования димерных и тетрамерных форм. Результаты фиттинга показывают, что свободный белок и при низком содержании ЗПС в смеси ($q_w \sim 0.4$), представлен исключительно в форме мономера, а димеры и тетрамеры доминируют при избытке ЗПС ($q_w \sim 8$).
- 6.** Третичная структура связанного БЛГ дестабилизирована при низких концентрациях полисахарида и стабилизирована при высоких. Эти изменения в стабильности БЛГ имеют энтропийную природу.



Получение вирусоподобных частиц в растениях

Вирусоподобные частицы под электронным микроскопом. Проведение агроинфильтрации табака, конструкция с целевым и репортерным генами.

Заключены и выполнены договоры:

1. Договор № 360/2022 от «01» июля 2022 г. «Разработка условий инокуляции слабым штаммом вируса пепино (PerMV) растений *N. benthamiana*, выращиваемых методом aeropоники, в контролируемых условиях фитотрона, с целью наработки вирусных частиц (PerMV) для нужд ФГБУ «ВНИИКР»
2. Договор № 275-16 от 10 октября 2016 г. «Разработка технологии выращивания каучуконосных культур в условиях фитотрона». 10.10.2016 - 03.04.2022.
3. Договор № 223-ЕП-2022-77/102 на выполнение научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ «Разработка способов получения модифицированной культуры *Taraxacum kok-saghyz* для увеличения ее продуктивности по каучуку и углеводам; исследование возможности интродукции на территории РФ сортов модифицированной культуры *Taraxacum kok-saghyz* и разработка основ агротехнологии их выращивания». 17.10.2022 - 09.06.2025

Результаты интеллектуальной деятельности

1. Способ aeropонного выращивания каучуконосного растения кок-сагыз, *Taraxacum kok-saghyz* R. **RU 2779988**. ИБХФ РАН, ПАО «ТАТНЕФТЬ», ООО «НТЦ ТАТНЕФТЬ».
2. Устройство для измерения веса растений в фитотроне в режиме реального времени **RU 212577**. Патентообладатель ИБХФ РАН.
3. Способ определения содержания каучука в тканях каучуконосных растений. **RU 2022127307**. Патентообладатель ИБХФ РАН.

Лаборатория биохимической физики и инженерии метаболизма растений 0510

Зав. лаб. Ю.Ц. Мартиросян

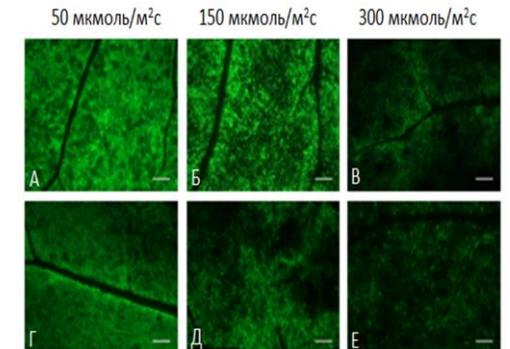
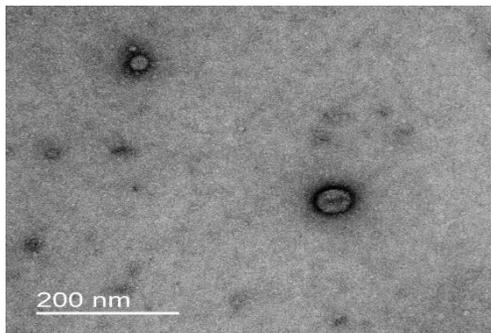
Заключены и выполнены договоры:

1. Договор № 360/2022 от «01» июля 2022 г. «Разработка условий инокуляции слабым штаммом вируса пепино (PerMV) растений *N. benthamiana*, выращиваемых методом aeropоники, в контролируемых условиях фитотрона, с целью наработки вирусных частиц (PerMV) для нужд ФГБУ «ВНИИКР»
2. Договор № 275-16 от 10 октября 2016 г. «Разработка технологии выращивания каучуконосных культур в условиях фитотрона». 10.10.2016 - 03.04.2022.
3. Договор № 223-ЕП-2022-77/102 на выполнение научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ «Разработка способов получения модифицированной культуры *Taraxacum kok-saghyz* для увеличения ее продуктивности по каучуку и углеводам; исследование возможности интродукции на территории РФ сортов модифицированной культуры *Taraxacum kok-saghyz* и разработка основ агротехнологии их выращивания». 17.10.2022 - 09.06.2025

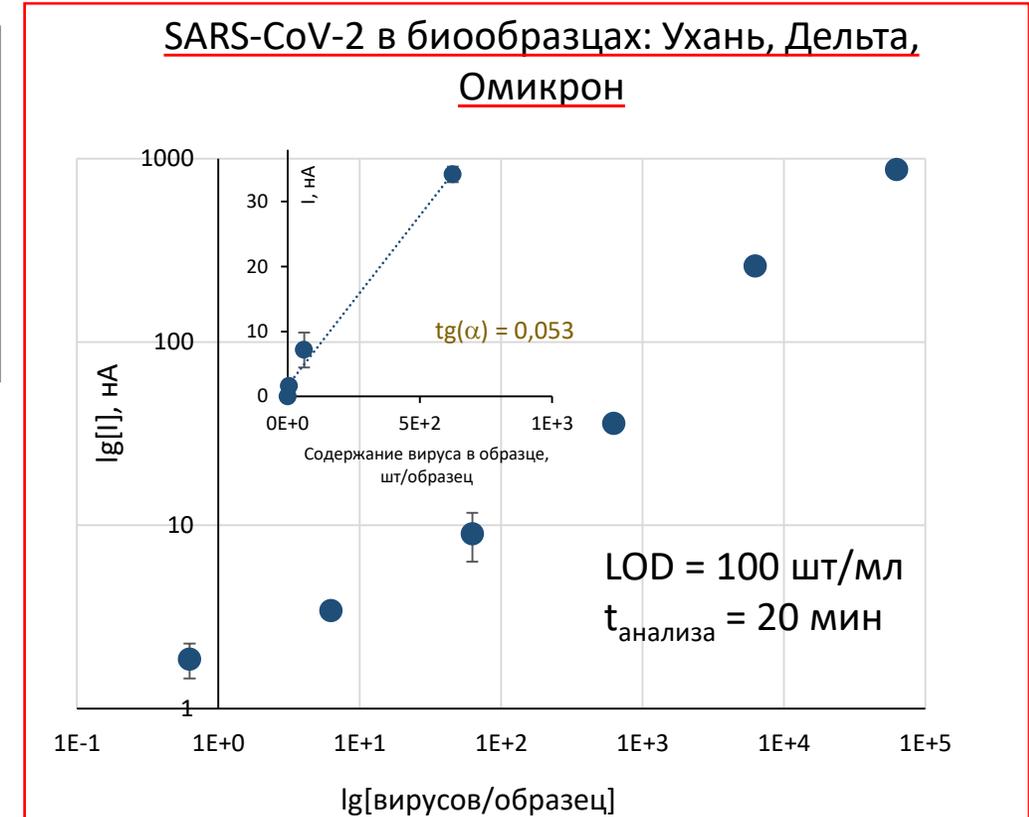
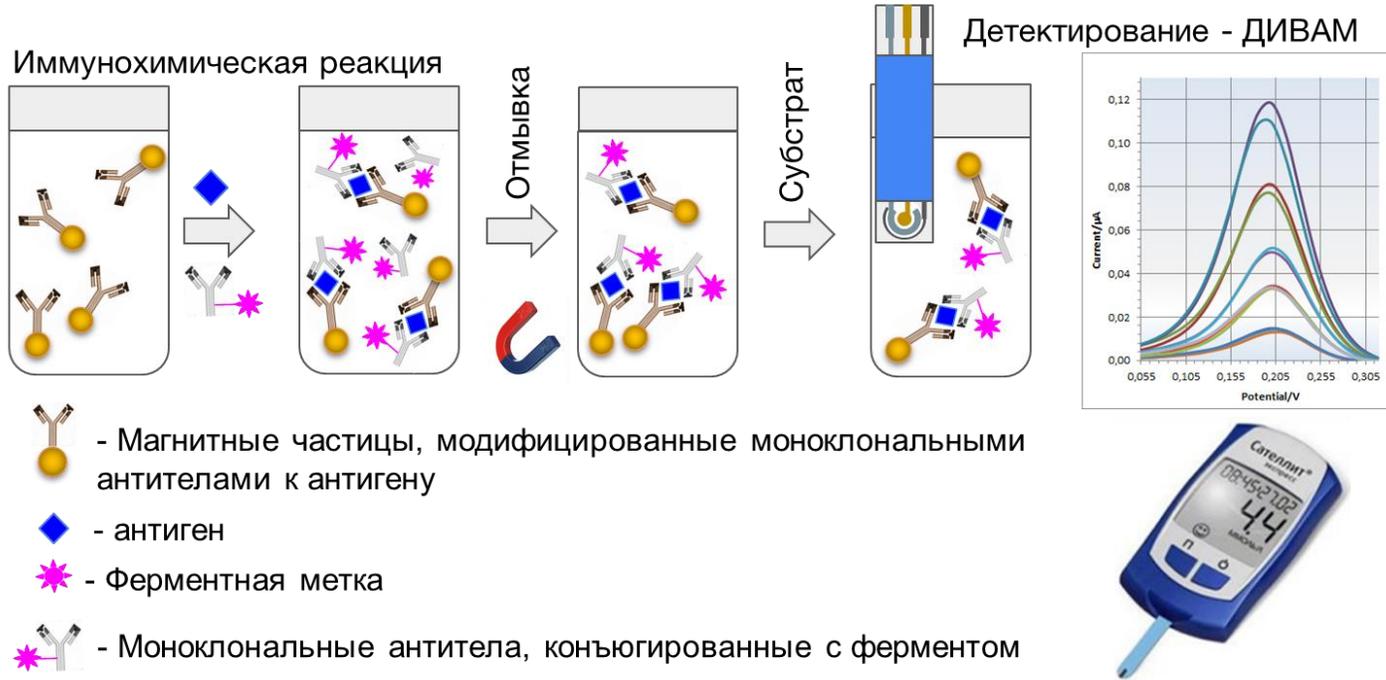
Результаты интеллектуальной деятельности

1. Способ aeropонного выращивания каучуконосного растения кок-сагыз, *Taraxacum kok-saghyz* R. **RU 2779988**. ИБХФ РАН, ПАО «ТАТНЕФТЬ», ООО «НТЦ ТАТНЕФТЬ».
2. Устройство для измерения веса растений в фитотроне в режиме реального времени **RU 212577**. Патентообладатель ИБХФ РАН.
3. Способ определения содержания каучука в тканях каучуконосных растений. **RU 2022127307**. Патентообладатель ИБХФ РАН.

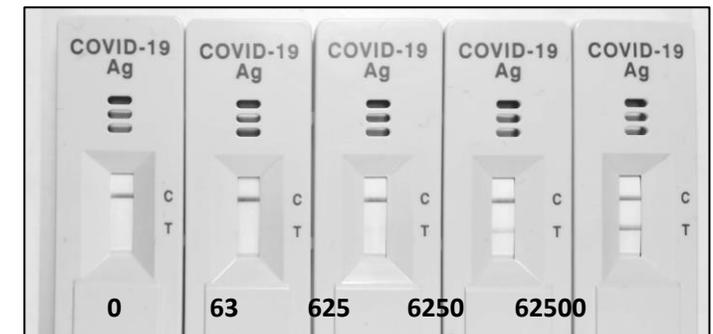
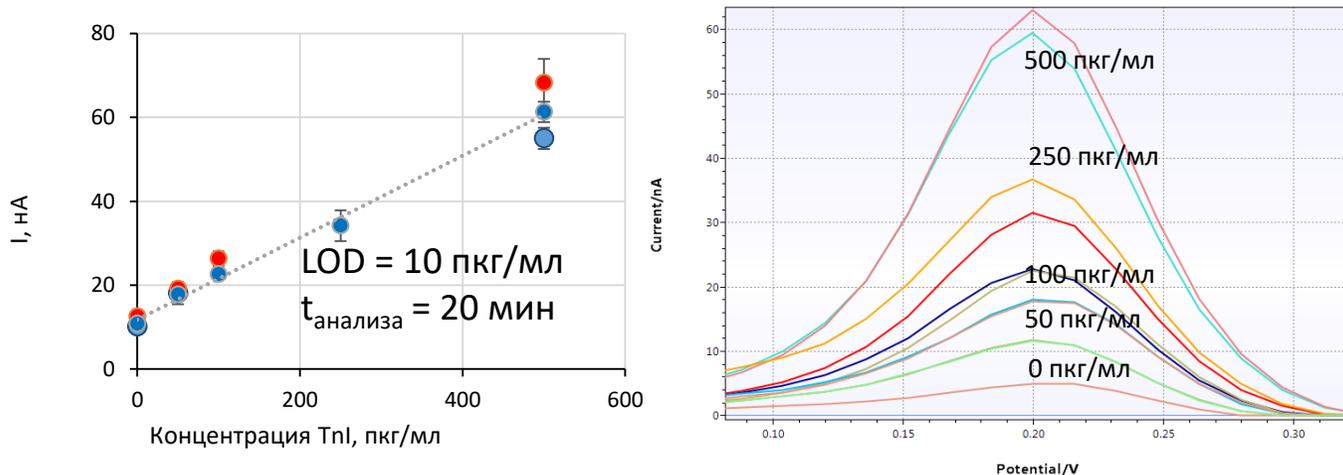
Вирусоподобные частицы под электронным микроскопом. Проведение агроинфильтрации *Nicotiana benthamiana*, конструкция с целевым и репортерным генами.



Универсальная платформа иммуноферментного анализа антигенов на магнитных частицах с электрохимическим детектированием сигнала (лаб. 0111)



Тропонин I в сыворотке крови человека



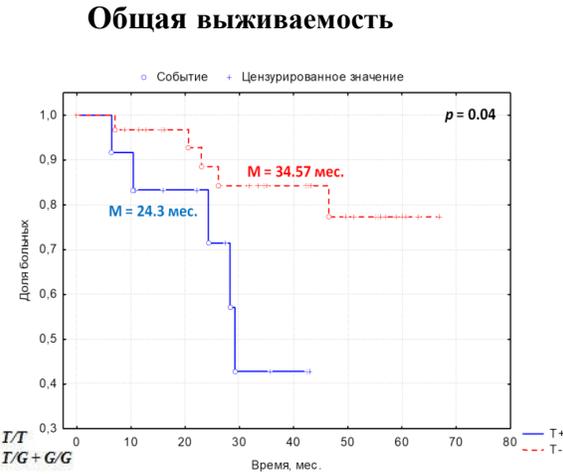
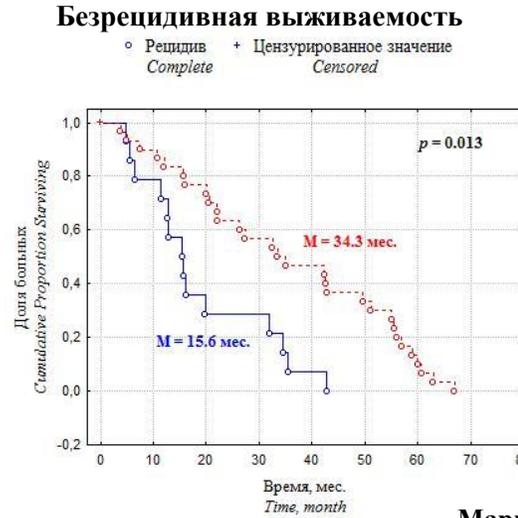
Изучение молекулярно-генетических маркеров при онкологических заболеваниях (лаб. 0111)

Связь молекулярно-генетических маркеров с эффективностью платиносодержащей химиотерапии у больных тройным негативным подтипом рака молочной железы

Связь полиморфных маркеров генов с ответом на платиносодержащую химиотерапию у беременных женщин с онкологическими заболеваниями

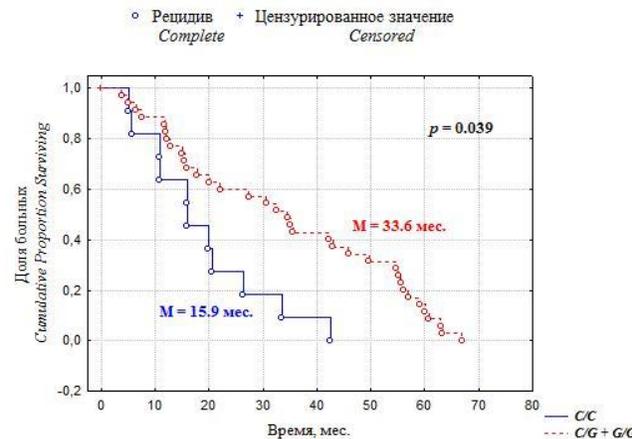
Больные ТНРМЖ n=67

Маркер rs25487 гена XRCC1



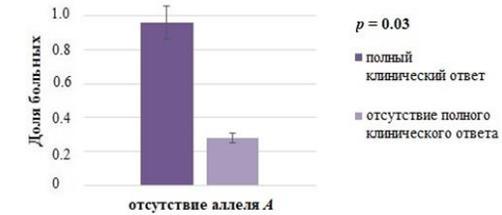
Маркер rs17655 гена ERCC5

Безрецидивная выживаемость

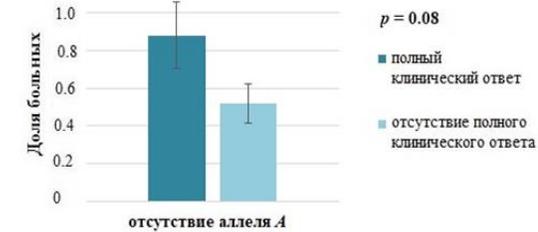


Больные n=31

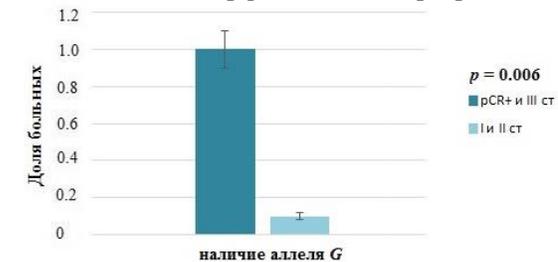
Маркер rs2032582 гена ABCB1 и степень клинического ответа



Маркер rs1045642 гена ABCB1 и степень клинического ответа



Маркер rs1045642 гена ABCB1 и степень патоморфологической регрессии опухоли



маркер	показатель	значение p
rs17655 ERCC5	масса плаценты	0.011
rs2032582 ABCB1	масса плаценты	0.10
rs13181 ERCC2	масса новорожденного	0.08

Т.М. Заварыкина, М.А. Капралова, П.К. Бреннер, О.О. Гордеева, И.П. Ганьшина, Д.С. Ходырев, С.В. Хохлова, И.В. Колядина Связь полиморфных маркеров генов XRCC1, ERCC5, TP53, cdkn1a1 с выживаемостью больных после платиносодержащей химиотерапии при тройном негативном раке молочной железы. Опухоли женской репродуктивной системы. Подана в печать

УЧАСТИЕ ЦЕРАМИДОВ В ПАТОГЕНЕЗЕ БОКОВОГО АМИОТРОФИЧЕСКОГО СКЛЕРОЗА (лаб. 0111)

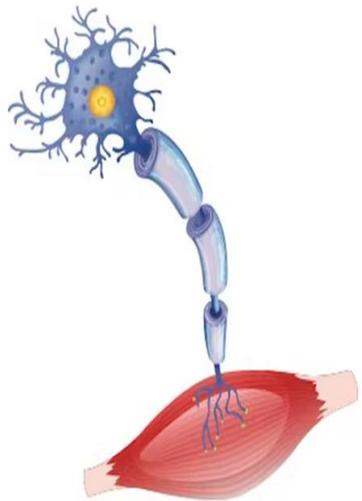
БОКОВОЙ АМИОТРОФИЧЕСКИЙ СКЛЕРОЗ (БАС) - неизлечимое нейродегенеративное заболевание характеризуется прогрессирующим поражением двигательных нейронов, сопровождаемым параличом (парезом) конечностей и атрофией мышц. Сфинголипиды участвуют в патогенезе БАС, индуцируя апоптоз нейронов. ЦЕРАМИД и его метаболит – СФИНГОЗИН являются активными индукторами апоптоза. На модели БАС (FUS- протеинопатии) у мышей показано методом МС снижение уровня ЦЕРАМИДА за счет его превращения в СФИНГОЗИН в результате повышения экспрессии церамидазы (ПЦР анализ). Данный фермент может использоваться в качестве мишени для тестирования инновационных препаратов, предлагаемых для лечения БАС.

БОКОВОЙ АМИОТРОФИЧЕСКИЙ СКЛЕРОЗ

Amyotrophic Lateral Sclerosis (ALS)

normal nerve cell

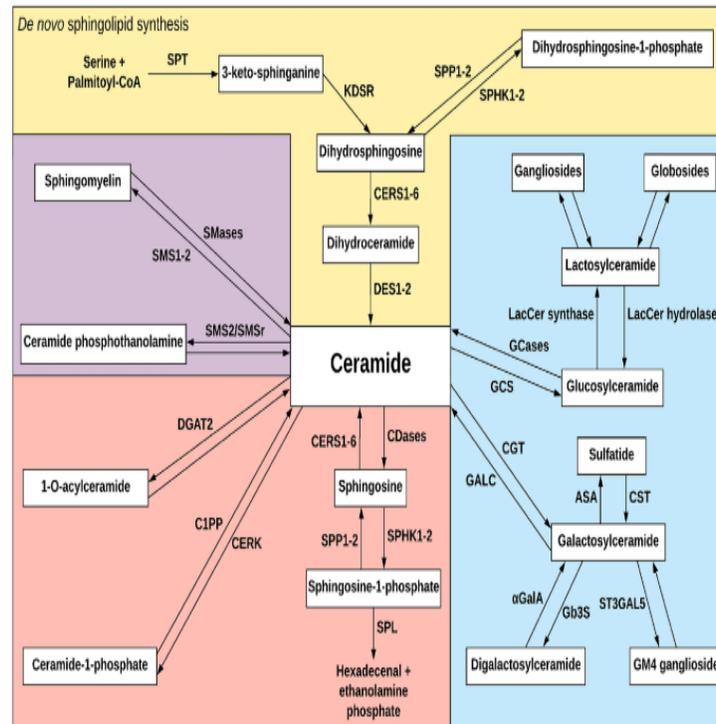
nerve with sclerosis



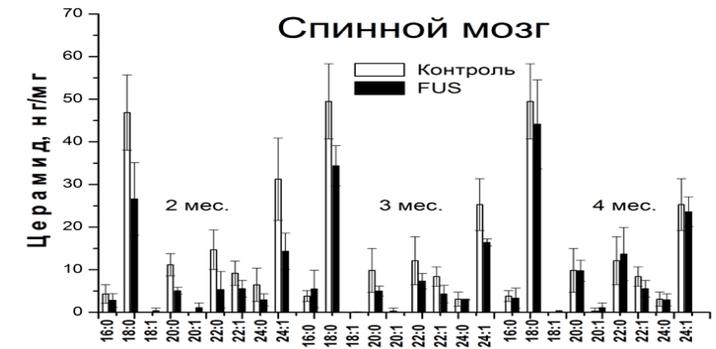
muscle contracts

muscle unable to contract

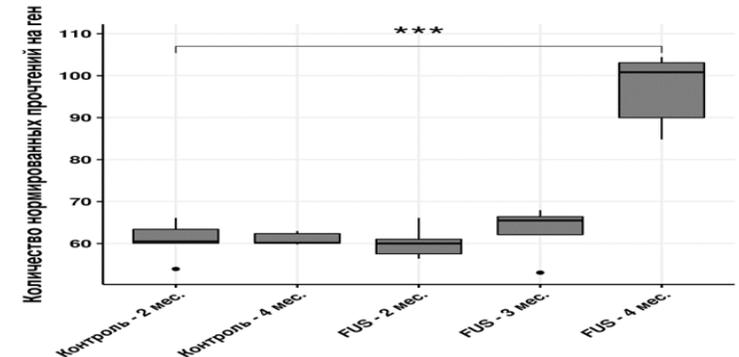
ЦЕРАМИДНЫЙ ЦИКЛ



МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВИДЫ ЦЕРАМИДОВ ПРИ БАС



ЭКСПРЕССИЯ КИСЛОЙ ЦЕРАМИДАЗЫ ПРИ БАС



УЧАСТИЕ ЦЕРАМИДОВ В ПАТОГЕНЕЗЕ БОКОВОГО АМИОТРОФИЧЕСКОГО СКЛЕРОЗА

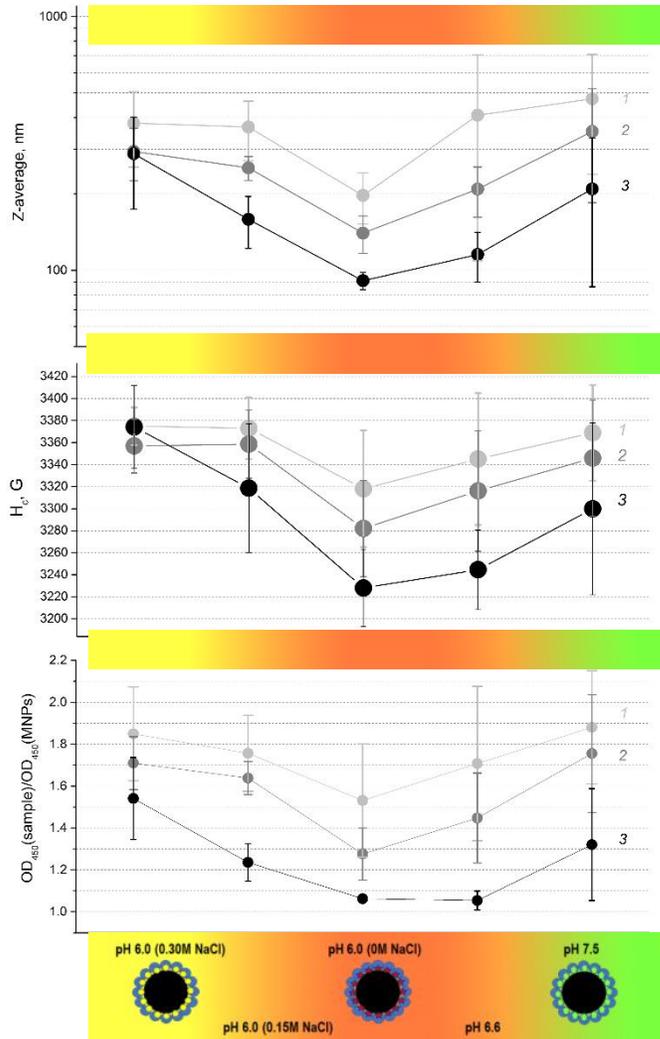
Было проведено определение изменений метаболизма сфингомиелина и церамида в структурах головного мозга (гиппокампе, коре и мозжечке) и в спинном мозге трансгенных мышей линии FUS(1-359), моделирующих боковой амиотрофический склероз (БАС). Методом МС было изучено содержание общих и молекулярных видов церамидов (от 14-0 до 26-1), сфингомиелинов(от 14-0 до 26-1) и моногексозилцерамидов.

Методом ПЦР проведена оценка экспрессии генов ферментов, контролирующих их метаболизм (сфингомиелиназ, церамидсинтаз 1, 3, 5, церамидаз 1, 2, церамид глюкозилтрансферазы) в структурах головного мозга и в спинном мозге животных. Получены доказательства того, что прогрессирующее развитие БАС сопровождается деградацией всех изученных молекулярных видов церамида в результате повышения экспрессии церамидазы, которая приводит к накоплению сфингозина, вызывающего гибель клеток ЦНС. Полученные данные могут быть использованы в диагностических целях, а фермент -кислая церамидаза в качестве мишени для замедления или, возможно, лечения БАС, который в настоящее время относится к неизлечимым заболеваниям.

ЦЕНТР МАГНИТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ (лаб. 1101)

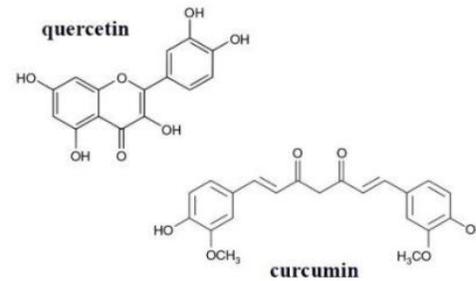
Разработка гибридных белок-содержащих систем на основе магнитных наночастиц (МНЧ)

✓ Оценка влияния состава среды (рН, ионной силы и др.) на устойчивость покрытий из ЧСА на поверхности магнитных наночастиц (МНЧ, IONzyme) с применением методов динамического светорассеяния, электронного магнитного резонанса, спектрофотометрии УФ/видимой области

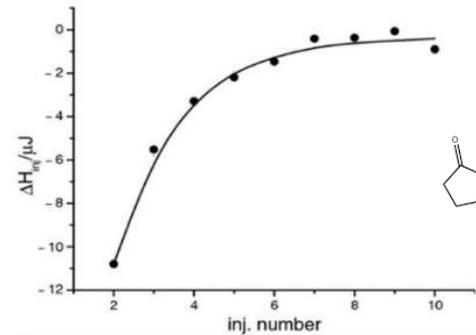


Bychkova AV, Lopukhova MV, Wasserman LA, Degtyarev YN, Kovarski AL, Chakraborti S, Mitkevich VA. The influence of pH and ionic strength on the interactions between human serum albumin and magnetic iron oxide nanoparticles. *International Journal of Biological Macromolecules* (IF 8.025; Q1), 2022 Jan 1;194:654-665.

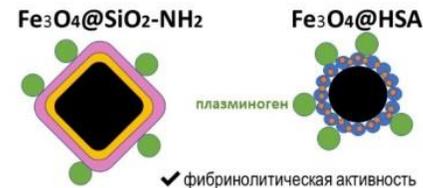
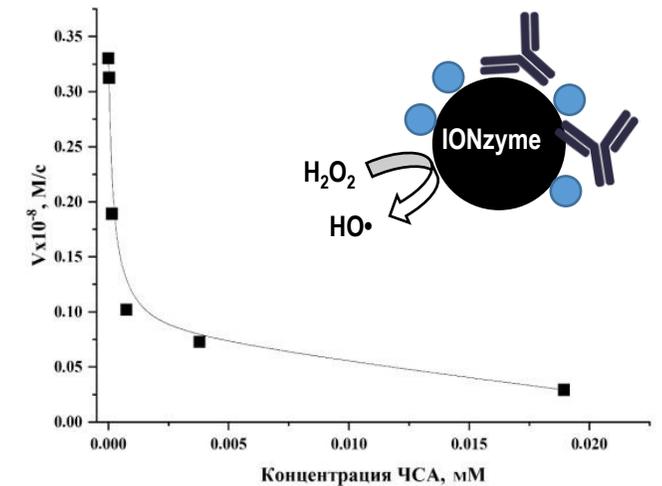
✓ Оценка параметров связывания лигандов с ЧСА



Usacheva T, Gamov G, Bychkova A, Anufrikov Y, Shasherina A, Alister D, Kuranova N, Sharnin V. Binding of quercetin and curcumin to human serum albumin in aqueous dimethyl sulfoxide and in aqueous ethanol. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* (IF 4.775; Q1). 2022;147(9):5511-5518.



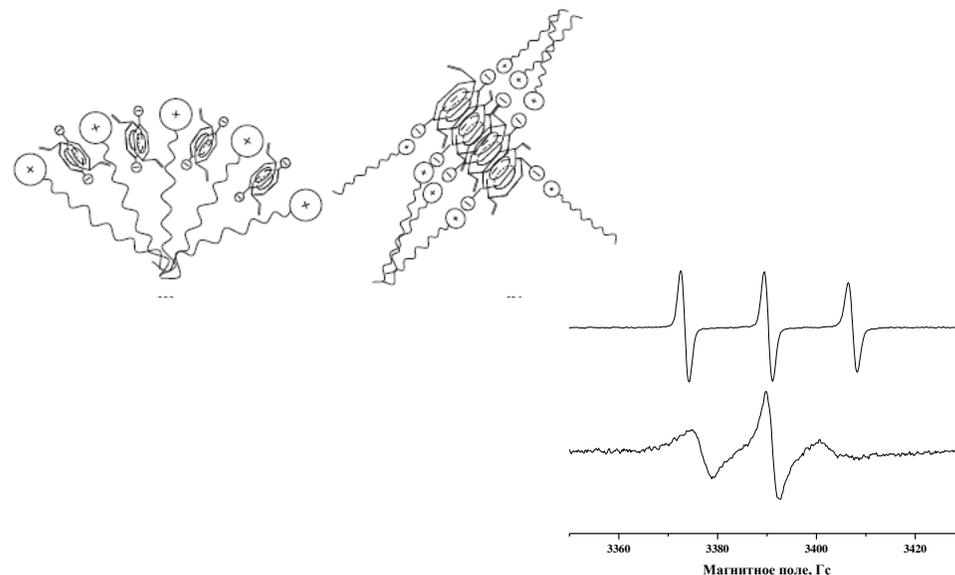
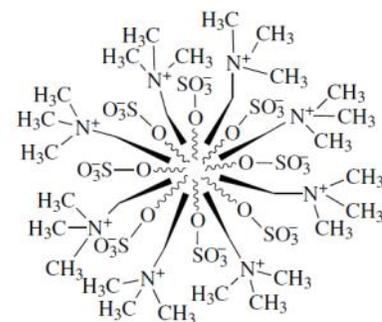
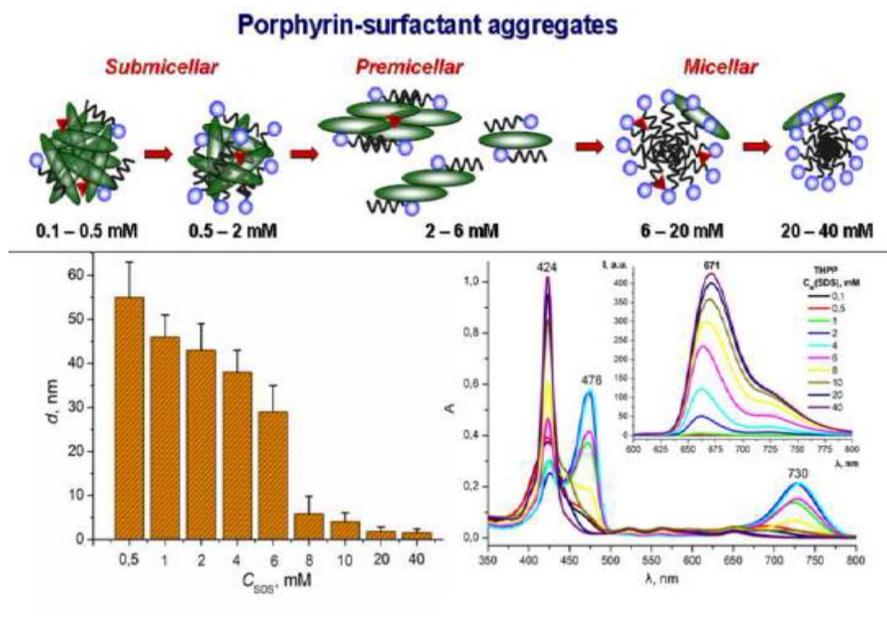
✓ Охарактеризована IONzyme-активность наночастиц, в том числе, в присутствии белков крови (ЧСА, IgG), с применением спиновых ловушек и субстратов для колориметрического анализа



✓ Подтверждено связывание плазминогена с поверхностью наночастиц с различной модификацией поверхности и сохранение его фибринолитической функции на поверхности

Bychkova AV, Kostanova EA, Sadykova EZ, Biryukova MI, Muradova AG, Sharapaev AI, Degtyarev EN, Kovarski AL. Nonspecific interaction between plasminogen and modified magnetic iron oxide nanoparticles. *Preparative Biochemistry & Biotechnology* (IF 3.141). 2022;52(7):800-808.

Работы группы поддержаны РНФ по конкурсу 2022 года «Проведение исследований научными группами под руководством молодых ученых» Президентской программы исследовательских проектов, реализуемых ведущими учеными, в том числе молодыми учеными



Определены особенности взаимодействия порфирина с додецилсульфатом натрия. Установлены концентрации реагентов, при которых формируются J-агрегаты порфирина и происходит bathochromный сдвиг основной УФ полосы их поглощения.

Обобщены результаты ЭПР исследований взаимодействия мицелл ПАВ с противоположно заряженными мономерами. Установлена структура комплексов. Определены перспективные соотношения мономер/ПАВ для реализации матричного механизма полимеризации.

M.A. Gradova, A.V. Bychkova, M.V. Motyakin et al, Interaction between *meso*-tetra-(4-hydroxyphenyl)porphyrin and SDS in aqueous solutions: Premicellar porphyrin-surfactant J-aggregate formation, *Chemical Physics*, 2022, V. 562, p. 111655

Ю. В. Шулевич, Ю. А. Захарова, М. В. Мотыкин и др., Мицеллы ПАВ как возможная матрица для радикальной полимеризации: Оценка методом спектроскопии ЭПР, *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2022, № 8, с. 1593

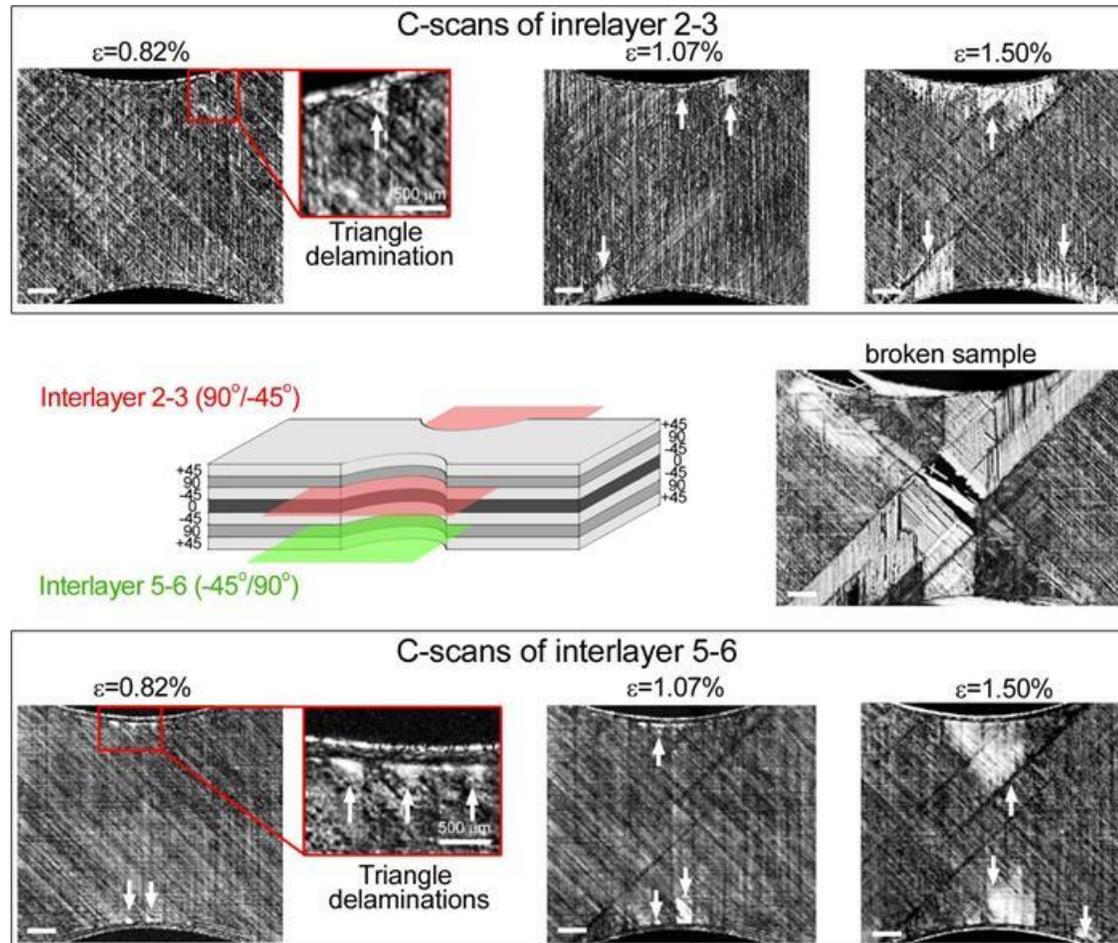
Центр рентгенодифракционного анализа (2022 г.)

№	Тема исследования	Соисполнители
1.	Структура волокон из полигидроксибутирата с добавками геммина.	Тюбаева П.М., Варьян И.А., Попов А.А., Ольхов А.А.
2.	Структура модифицированных крахмалов.	Вассерман Л.А., Плещина И.Г., ВНИИК
3.	Влияние метода получения пленок полилактида на их структуру.	Тертышная Ю.В. (лаб. Попова А.А.)
4.	Структура пленок полилактида с добавками восстановленного оксида графита.	Ломакин С.М., ФИЦ ХФ РАН
5.	Структура наночастиц на основе полилактид-ко-гликолида с производным хлорина.	Никольская Е.Д. (лаб. Кормана Д.Б.)
6.	Влияние озона на структуру полиэтилена.	Тюбаева П.М. Подмастерьев В.В. Попов А.А.
7.	Анализ структурных превращений полимерных композиций в условиях биодegradации.	Шеленков П.Г., Попов А.А.
8.	Структура фотосенсибилизирующих систем на полимерных носителях.	ФИЦ ХФ РАН
9.	Структура тонкопленочных нанокомпозитов ППК-CdS.	Иванова О.П. (лаб. Виноградова Г.А.), ФИЦ "Курчатовский институт"
10.	Анализ структуры пленок поливинилиденфторида.	Мальцев А.А. (лаб. Бибилова С.Б.)
11.	Рентгенофазовый анализ сепарированных образцов руды Карийского месторождения.	Калиниченко В.Н., Кузнецов Ю.А., Варфоломеев С.Д.

Важнейшие достижения ИБХФ – 2022 год

Разработка установки для высокочастотной ультразвуковой визуализации микроструктуры в объеме композитных углепластиков

Руководитель работы: к.ф.-м.н. В.М. Левин; исп. – к. ф.-м.н. Е.С. Мороков, к.ф.-м.н. С.А.Титов



Ультразвуковые изображения развития расслоений в объеме углепластика при растяжении.

Для изучения и визуализации процессов разрушения углепластиков на микро-уровне в лаборатории акустической микроскопии ИБХФ РАН была разработана специализированная установка, позволяющая изучать механизмы разрушения в объеме различных материалов. Для визуализации микроструктуры в объеме материалов применяется высокочастотная ультразвуковая микроскопия, которая, не разрушая материал, позволяет увидеть в его объеме элементы размером в несколько микрометров. Любые повреждения, возникающие в результате механических нагрузок, являются пустотами или разрывами, которые хорошо отражают ультразвуковые лучи и легко отображаются на ультразвуковых изображениях. В результате исследований был найден, визуализирован и описан ряд механизмов зарождения, развития и роста повреждений при растягивающих нагрузках углепластиков. Результаты опубликованы журнале *Composites Part B: Engineering* [10.1016/j.compositesb.2022.110360](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.110360)

Муаровые алмазы: *ab initio* квантово-химическое моделирование атомной структуры, электронных и механических свойств

Руководитель работ – д.ф.-м.н., проф. Л.А. Чернозатонский;
исп. – д.ф.-м.н. Д.Г. Квашнин, А.Г. Квашнин, В.А. Демин

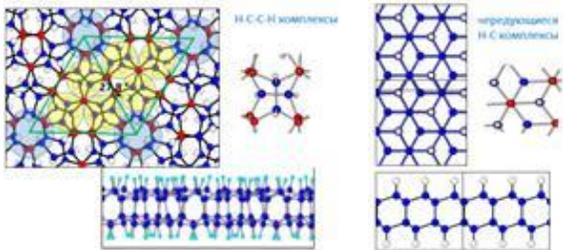


Рис. 1

Муаровые алмазы на основе скрученных графеновых слоев под углом около 30° , покрытых парами атомов водорода (Рис.1 H-C-C-H комплексы в алмазе Dn27.8- слева) – **новые структуры твистроники** – существенно **отличаются от обычного алмаза**, (из нескрученного биграфена укладки Бернала, существующей в графите, с чередующимися H-C комплексами – Рис.1 справа).

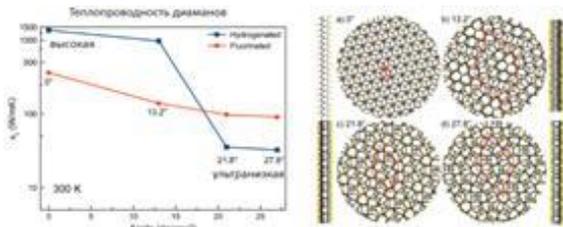


Рис. 3

Такие пленки с «квази-аморфной» структурой (алмазы Dn21.8 и Dn27.8) могут служить **эффективными теплоизоляторами** в различных гетероструктурных устройствах нанoeлектроники. III/ 2D Алмазоподобный слой, названный **диаманом**, представляет собой гидрированный с верхней поверхности скрученного под близким к 30° углом биграфена, молекулярно связанного с подложкой в виде третьего слоя. Гетероструктура обладает **спиновой сверхрешеткой с периодом муаровой структуры** из-за перетекания электронной плотности с негидрированной стороны алмаза (Рис.4 формирование алмаза и вид снизу на интерфейс алмаз-графен, атомы со спином вверх - красные, и спином вниз - синие). Такая система является перспективной в устройствах **полупроводниковой спинтроники**. Результаты работы опубликованы в 3-х журналах 1-го квартала Q1.

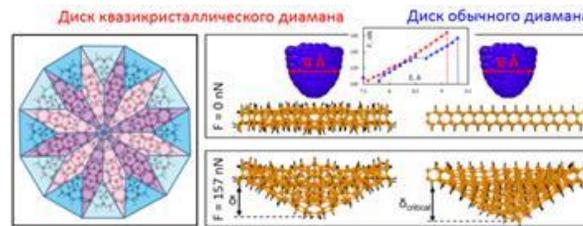


Рис. 2

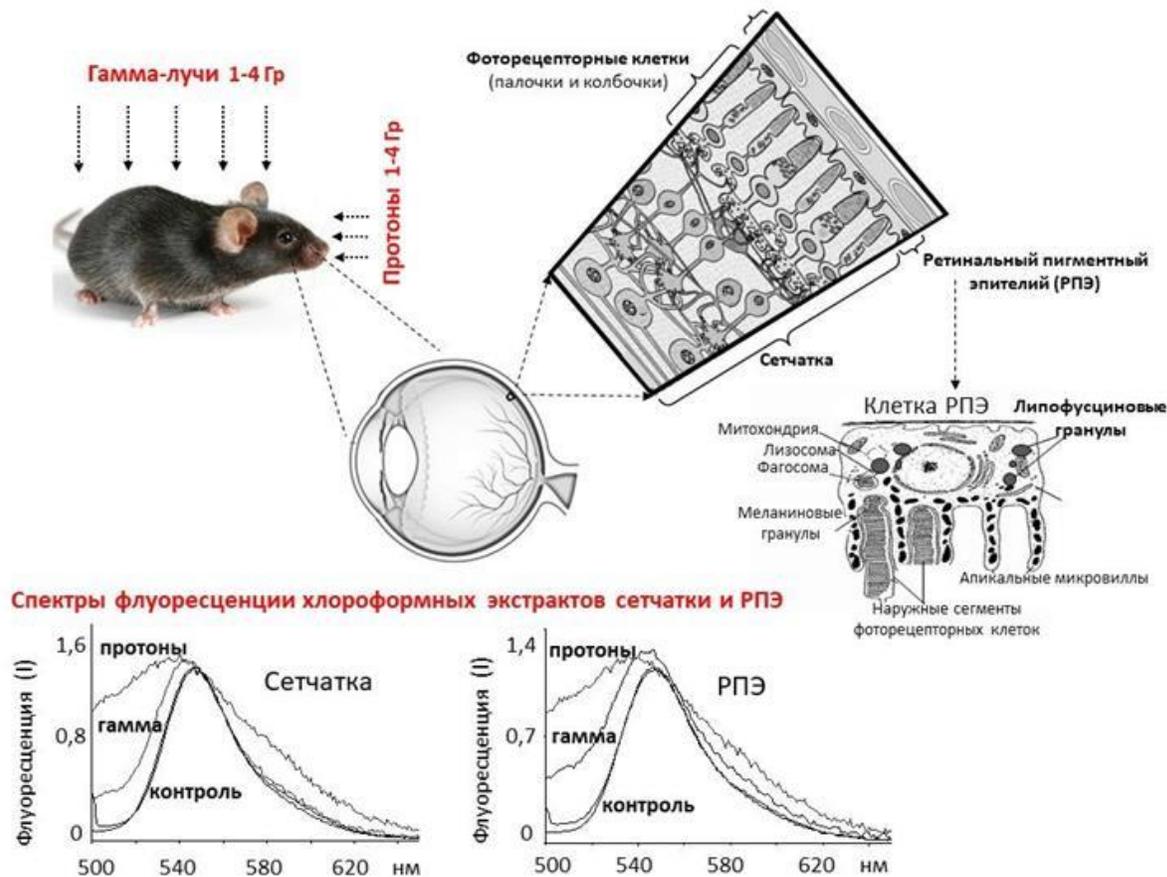
I/ 2D квазикристаллы алмаза на основе функционализации квазикристаллического скрученного под углом 30° биграфена (Рис.2), **обладающие высокой твердостью и ультра-широкой диэлектрической щелью, сравнимыми с характеристиками объемного (3D) алмаза**. Эти же свойства присущи и муаровым алмазам, скрученным под близким к 30° углом. Метод формирования таких алмазоподобных пленок защищен **Патентом РФ**.



Рис. 4

Радиационно-индуцированное окисление ретиноидов в структурах глаза и перспективы неинвазивного определения радиационного воздействия на организм

Руководитель – академик М.А. Островский, исполнители – к.б.н. М. Яковлева и др. (совместно с лабораторией радиационной биологии Объединённого Института Ядерных Исследований, Дубна)



Впервые обнаружено действие протонного и гамма-ионизирующего излучения на структуры глаза мыши. Показано, что радиационное воздействие вызывает в структурах глаза – сетчатке и ретинальном пигментном эпителии – окисление ретиноидов, которое регистрируется по изменению спектров их флуоресценции. Обнаруженное явление может позволить, используя диагностический метод регистрации аутофлуоресценции глазного дна, неинвазивно оценить уровень радиационного воздействия как на глаз, так и на весь организм непосредственно после воздействия ионизирующего излучения. Возможно также прогнозировать отдалённый результат радиационного воздействия – развитие возрастной макулярной дегенерации сетчатки.