

XXIII ЕЖЕГОДНАЯ МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ИБХФ РАН-ВУЗЫ  
“БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА”

НАУЧНАЯ ПРОГРАММА

20 ноября 2023г.



10<sup>30</sup>-10<sup>40</sup>

**Открытие конференции, вступительное слово**

Курочкин Илья Николаевич, д.х.н., директор ИБХФ РАН

10<sup>40</sup>-11<sup>15</sup>

**Приглашенный доклад**

Чугреев Андрей Львович, д.ф.-м.н.

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

Новая концепция полуэмпиризма в химии и науках о материалах. Философия, предпосылки и текущее положение

Секция: **Компьютерное моделирование биомолекулярных систем и наноматериалов**  
памяти д.х.н., профессора Александра Владимировича Немухина

Председатель – Поляков Игорь Вадимович



11<sup>15</sup>-11<sup>45</sup>

**Приглашенный доклад**

Хренова Мария Григорьевна, д.х.н., профессор РАН

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

Развитие комбинированных методов квантовой и молекулярной механики для моделирования биохимических реакций

11<sup>45</sup>-12<sup>00</sup>

**Кофе-брейк**

12<sup>00</sup>-12<sup>15</sup>

Поляков Игорь Вадимович, МГУ, ИБХФ РАН

**Поверхности потенциальной и свободной энергии в реакции гидролиза гуанозинтрифосфата белковым комплексом RAS-GAP**

В рамках комбинированного метода квантовой и молекулярной механики рассчитан механизм реакции гидролиза гуанозинтрифосфата белковым комплексом RAS-GAP. Расчёты производились различными способами: поверхности свободной энергии (ПСЭ) были получены с помощью TeraChem/NAMD; поверхности потенциальной энергии-Turbomole/ChemShell, используя при этом за начальное приближение точки на ПСЭ в различных окнах реакционного профиля.

12<sup>15</sup>-12<sup>30</sup>

Одинцов Константин Викторович, МГУ

**Применение многоконфигурационных расчетов для описания реакций переноса электрона в фотолиазах**

Для получения оценок скоростей прямого и обратного переноса электрона проведены квантово-химические расчеты возбужденных состояний в моделях активного центра фермента 6-4 фотолиазы методом XMCQDPT2. Представлен подход к оценке влияния заряженных молекулярных фрагментов на скорости фотоиндуцированной починки ДНК и регенерации кофактора ФАДН.

12<sup>30</sup>-12<sup>45</sup>

Блинова Анастасия Романовна, МГУ

**Моделирование механизма ферментативной активности N-ацетилглутаматсинтазы**

В работе охарактеризован фермент N-ацетилглутаматсинтаза методами молекулярного моделирования и квантовой химии: уточнены сайты связывания субстратов и их форма существования в белке, предложен трехстадийный механизм ферментативной реакции, а также дана функциональная интерпретация для некоторых структурных мотивов белка.

12<sup>45</sup>-13<sup>00</sup>

Кусочек Павел Александрович, МГУ

**Исследование влияния белкового окружения на фотодинамику возбужденных состояний хромофорных групп светочувствительных белков родопсинов**

Хромофор родопсинов - протонированное основание Шиффа ретиналя, изомеризующееся при поглощении фотона. В исследовании с помощью комбинированных методов квантовой и

молекулярной механики установлено, что белковое окружение разных родопсинов обеспечивает возбуждение определенных колебательных мод в хромофоре, что способствует фотоизомеризации.

13<sup>00</sup>-13<sup>15</sup>

**Мулашкина Татьяна Игоревна, МГУ**

**Сверточная нейронная сеть для определения активации субстрата ферментом по картам лапласиана электронной плотности**

Для протекания химических реакций, катализируемых ферментами, необходимо, чтобы произошла активация субстрата в активном центре фермента. Её наличие можно определить по анализу карт лапласиана электронной плотности, рассчитанных в реакционной области. В данной работе была разработана свёрточная нейронная сеть, способная различать реакционноспособные и нереакционноспособные фермент-субстратные комплексы.

13<sup>15</sup>-13<sup>30</sup>

**Степанюк Роман Алексеевич, МГУ**

**Механизм превращения аденозинтрифосфата в циклический аденозинмонофосфат в активном центре аденилатциклазы**

Для изучения механизма реакции превращения аденозинтрифосфата (АТФ) в циклический аденозинмонофосфат (сАМР) в активном центре аденилатциклазы использовался подход молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами (КМ/ММ МД) с добавлением смещающего потенциала методом umbrella sampling. Получен профиль энергии Гиббса и описан молекулярный механизм реакции.

13<sup>30</sup>-14<sup>00</sup>

**Обед**

**Секция: Новые материалы, наноструктуры, квантовая химия**

**Председатели – Квашнин Дмитрий Геннадьевич, Куркина Ирина Ивановна, Демин Виктор Александрович**

14<sup>00</sup>-14<sup>15</sup>

**Куркина Ирина Ивановна, СВФУ**

**Получение и исследование гибридных наносистем графен/ферромагнетик/металл и дисульфид молибдена/ферромагнетик/металл**

В работе будут обсуждаться преимущества использования графена и дисульфида молибдена для спинтроники, продемонстрированы результаты получения пленок двумерных материалов, а также исследование их влияния на магнитные свойства структур с ферромагнетиком.

14<sup>15</sup>-14<sup>30</sup>

**Квашнин Александр Геннадьевич, СколТех**

**Поиск многокомпонентных и высокоэнтропийных соединений методами глобальной оптимизации и искусственного интеллекта**

В данной работе были использованы методы глобальной оптимизации и квантовохимические вычисления для поиска стабильных структур и составов в системе Hf-Ta-C. Стабильные составы затем были синтезированы в виде порошков и покрытий. Кроме того, использование методов машинного обучения позволило предсказать область стабильности много- и однофазных соединений карбида HfTaZrTiNbC<sub>5</sub>, которые затем были успешно синтезированы.

14<sup>30</sup>-14<sup>45</sup>

**Токсумаков Адилет Нурланбекович, МФТИ, ИБХФ РАН**

**Хиральные фотонные суперкристаллы на основе спиральных структур Ван-дер-Ваальса**

Хиральность, пожалуй, самое загадочное из всех преобразований симметрии. Он очень легко разрушается в биологических системах, практически отсутствует в встречающихся в природе неорганических материалах, и его очень сложно создать искусственно. В этой работе мы использовали технологию Ван-дер-Ваальса для сборки спиральных гомоструктур с киральными свойствами (например, кругового дихроизма).

14<sup>45</sup>-15<sup>00</sup>

**Новосадов Николай Иванович, ФИЦ ХФ РАН**

**Направленная функционализация одностенных углеродных нанотрубок**

Разработан метод окисления ОУНТ до высоких степеней окисления без нарушения структуры трубок. Установлен количественный состав образующихся групп и построены зависимости содержания кислородсодержащих групп от типа и количества окислителя.

15<sup>00</sup>-15<sup>15</sup>

**Петрова Василиса Ильинична, ИБХФ РАН**

**Оптимизация технологии создания солнечных элементов на основе неорганических перовскитов на открытом воздухе**

В настоящем исследовании разработана оптимизированная методика нанесения фотоактивных слоев на основе цезиевых перовскитов на открытом воздухе с использованием в качестве добавки ацетата свинца и дополнительной химической обработки нанесенных перовскитных слоев. Были исследованы структурные, оптические и морфологические характеристики полученных пленок неорганических перовскитов, а также фотоэлектрические характеристики перовскитных солнечных элементов на их основе.

15<sup>15</sup>-15<sup>30</sup>**Радина Александра Денисовна, СколТех****Фазовые переходы в материалах AIIIIVI при повышенных давлениях**

В ходе рассмотрения фазовых переходов в материалах группы AIIIIVI (GaSe, GaTe, InSe), вызванных давлением, приложенным вдоль одной оси, выявлены связи, которые являются движущей силой данного перехода, а также изменения в положении Ван-дер-Ваальсовой щели между слоями.

15<sup>30</sup>-15<sup>45</sup>**Смирнов Сергей Артёмович, НИУ МЭИ****Расчёты адсорбции и спилл-овер эффекта протонов и H<sub>2</sub>O на поверхность нанокластеров Pt-1,13,14, адсорбированных на поверхность монослоя графена: первопринципное исследование**

Наночастицы платины на графене являются удобным материалом, используемым для протон-обменных мембран. Были проведены расчёты энергии реакции адсорбции и спилл-овер эффекта протона и H<sub>2</sub>O из оптимизации геометрий. Строились изменения DOS (Density of states) в ходе прохождения реакций. Сделан анализ энергий адсорбции протона и H<sub>2</sub>O со спектрами комбинационного рассеяния.

15<sup>45</sup>-16<sup>00</sup>**Кофе-брейк**16<sup>00</sup>-16<sup>15</sup>**Костюченко Татьяна Сергеевна, СколТех****Применение машинно-обучаемых потенциалов "на решётке" в исследовании сложных сплавов**

Машинно-обучаемые потенциалы LRP (Low-rank potential) предназначены для исследований многокомпонентных систем на решётке. Данный класс потенциалов позволяет в считанные часы получить модели межатомного взаимодействия и оценить температурный диапазон стабильности твёрдого раствора, исследовать химический порядок и кристаллическую структуру сложного материала.

16<sup>15</sup>-16<sup>30</sup>**Новиков Иван Сергеевич, СколТех****Применение магнитных машинно-обучаемых потенциалов для теоретических исследований магнитных материалов**

В докладе речь пойдёт о машинно-обучаемых потенциалах (МОПах), включающих магнитные моменты в функциональную форму. Эти потенциалы обучаются на данных ТФП расчетов. Мы демонстрируем, что энергии образования, параметры решетки и полные магнитные моменты элементарных ячеек различных структур Fe-Al, рассчитанных с помощью магнитных МОПов, согласуются с данными ТФП расчетов.

16<sup>30</sup>-16<sup>45</sup>**Федоров Даниил Александрович, НИТУ МИСИС****Определение температуры плавления материала с помощью моделирования молекулярной динамики**

Использование пакета MLIP для получения машиннообучаемых потенциалов, чтобы провести моделирование молекулярной динамики и определить температуру плавления исследуемого материала.

16<sup>45</sup>-17<sup>00</sup>**Козлан Тимофей Александрович, НИТУ МИСИС****Расчёт фононных спектров карбидов тантала-гафния с использованием искусственного интеллекта**

В работе проведено обучение нейронной сети на данных фононной плотности состояний из DFT ряда карбидов тантала-гафния различной стехиометрии. В итоге была построена модель искусственного интеллекта, позволяющая предсказывать фононные спектры материалов на основе его структуры без применения квантово-химических методов.

17<sup>00</sup>-17<sup>15</sup>**Фаткулина Эвелина Эдуардовна, НИТУ МИСИС****Исследование стабильности высокоэнтропийных карбонитридов методами DFT**

В данной работе проводилось изучения образования высокоэнтропийного карбонитрида (HfTaTiNbZr)C<sub>x</sub>N<sub>y</sub> посредством расчета энтальпии образования, энтальпии смешивания в зависимости от содержания азота в структуре методами теории функционала электронной плотности.

17<sup>15</sup>-17<sup>30</sup>**Назарова Виктория Игоревна, МГУ****Моделирование спектров двухфотонного поглощения индикаторных красителей в растворе**

В работе представлен метод молекулярного моделирования нелинейных фотофизических свойств и установлении основных факторов, влияющих на форму и положение спектров поглощения конформационно нежестких флуоресцентных индикаторов при нелинейном двухфотонном возбуждении в растворе. Актуальность тематики обусловлена необходимостью поиска эффективных стратегий для направленной разработки флуоресцентных индикаторов, характеризующихся большими сечениями двухфотонного поглощения.

17<sup>30</sup>-17<sup>45</sup>

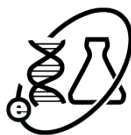
Лукано Михаил Михайлович, ИХР РАН, Сколково

**Применение графовых нейронных сетей к предсказанию энергии ячеек**

В данной работе будет представлена идея описания кристаллических структур с помощью графовых нейронных сетей. Будет описан подход, методология, а также особенности представления молекулярных структур в виде графов.

**СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ**

21 ноября 2022г.



**Специальная секция: Школа**

**Председатели – Лобанов Антон Валерьевич, Тertyшная Юлия Викторовна**

11<sup>00</sup>-11<sup>10</sup>

**Тertyшная Ева Алексеевна, ГБОУ школа 1583**

**Влияние фотостимуляции на посевные свойства сои**

Предпосевная обработка семян ультрафиолетовым излучением относится к "зеленым технологиям" и позволяет увеличить урожайность различных культур. В данной работе семена сои сорта Волма различных фракций облучали ультрафиолетом в течение 15 и 30 минут, после чего определяли посевные свойства.

11<sup>10</sup>-11<sup>20</sup>

**Моложавых Олег Викторович, ГБОУ школа 2098**

**Влияние хлоридного и сульфатного засоления на прорастание и рост проростков семян Brassica napus L**

В ходе исследования изучали влияние хлоридного и сульфатного засоления на прорастание и рост проростков сортов ярового рапса и установили, что семена рапса сорта таврион более устойчивы к обоим видам засоления, сульфатное засоление оказывает большее влияние на семена, чем хлоридное.

11<sup>20</sup>-11<sup>30</sup>

**Хусяинова Камилла Рамилевна, ГБОУ школа 2098**

**Ополаскиватель для полости рта – здоровье и красота улыбки. Миф или правда?**

В ходе исследования мы познакомились с историей создания ополаскивателей. В условиях школьной лаборатории изучали состав ополаскивателей и их влияние на микробиологическую флору полости рта.

**Секция: Биохимия, биофизика, лекарственные ферментативные препараты**

**Председатель – Никольская Елена Дмитриевна, Яббаров Никита Григорьевич**

11<sup>30</sup>-11<sup>45</sup>

**Бершадский Ефим Сергеевич, ИБХФ РАН**

**Компьютерное моделирование лазер-индуцированного артериального тромбоза**

Для описания процесса роста артериального тромба была разработана компьютерная модель, учитывающая ключевые явления в росте тромба- влияние на тромбоциты тромбина и АДФ, секрецию плотных гранул, различие в упаковке ядра и оболочки тромба, и другие. Модель показала хорошее сходство с результатами экспериментов по лазер-индуцированному тромбозу в микрососудах.

11<sup>45</sup>-12<sup>00</sup>

**Даничкина Ксения Викторовна, ИБХФ РАН, СколТех**

**Накопление фосфорилированной протеоформы бета-амилоида в мозге мышей 5xFAD**

В работе исследовалась амилоидная фракция мозга трансгенных мышей 5xFAD, являющихся модельным организмом для исследования болезни Альцгеймера. При помощи вестерн-блот анализа была исследована динамика накопления протеоформы p-Ser-8-A $\beta$  с возрастом. На основании предыдущих работ в области масс-спектрометрического анализа фосфо-пептидов была предложена улучшенная матричная смесь для оценки физиологического содержания p-Ser-8-A $\beta$  методами MALDI-TOF масс-спектрометрии.

12<sup>00</sup>-12<sup>15</sup>

**Мазина Людмила Михайловна, ФИЦ ПХФ и МХ**

**Действие нитрозильных комплексов железа с ароматическими тиолигандами на ферментативную активность аденилатциклазы и растворимой гуанилатциклазы**

Нарушение выработки монооксида азота (NO) является причиной ряда сердечно-сосудистых заболеваний. Один из подходов к их терапии - это разработка перспективных NO-доноров, нитрозильных комплексов железа. В данной работе было исследовано их влияние на ферментативную активность аденилатциклазы и растворимой гуанилатциклазы.

12<sup>15</sup>-12<sup>30</sup>

**Торопцева Анна Валентиновна, ИБХФ РАН; РХТУ**

**Модификация поверхности частиц, включающих наночастицы магнетита и сывороточный альбумин, фолевой кислотой для нацеленной доставки в клетки-**

## **мишени**

Были апробированы различные стратегии получения наносистем на основе магнитных наночастиц (МНЧ) оксидов железа, человеческого сывороточного альбумина (ЧСА) и N-гидроксисукцинимидного эфира фолиевой кислоты (мФК). Наносистемы, полученные путем образования конъюгата ЧСА и мФК на поверхности МНЧ, характеризовались стабильностью и агрегативной устойчивостью. Гибридные системы успешно показали себя при тестировании на клетках и имеют перспективы использования для рецептор-опосредованной доставки лекарств к опухолям.

12<sup>30</sup>-12<sup>45</sup>

## **Кофе-брейк**

12<sup>45</sup>-13<sup>00</sup>

**Капралова Мария Андреевна, ИБХФ РАН**

### **Изучение связи полиморфных маркеров генов репарации ДНК, клеточного цикла и транспорта с ответом на лечение и акушерскими параметрами у беременных с онкологическими заболеваниями**

Изучены образцы крови беременных пациенток с онкологическими заболеваниями, получавших химиотерапию с использованием препаратов платины и/или другие повреждающие ДНК препараты. В выделенных образцах ДНК исследованы полиморфные маркеры генов репарации ДНК, клеточного цикла и транспорта лекарственных веществ. Результаты были сопоставлены с клиническим ответом, степенью патоморфологической регрессии опухоли и акушерскими параметрами.

13<sup>00</sup>-13<sup>15</sup>

**Белецан Олег Богданович, МГУ**

### **Механизм и кинетика окислительной фотоконверсии белка EGFP в зависимости от длины волны возбуждения**

В данной работе разработан и реализован метод расчета константы скорости переноса электрона в электронно-возбужденном состоянии в зависимости от длины волны возбуждения с учетом неравновесной заселенности колебательных уровней.

13<sup>15</sup>-13<sup>30</sup>

**Душина Анастасия Олеговна, НИЯУ МИФИ**

### **Получение гибридных органо-неорганических наноструктур на основе апконвертирующих нанокристаллов для биомедицинских исследований**

В настоящее время растет устойчивость бактерий к классическим противомикробным препаратам, поэтому появилась необходимость в разработке новых подходов к лечению. Апконвертирующие наночастицы благодаря особым свойствам могут лечь в основу создания методов терапии. В работе предлагается получение наноструктур с флуоресцентными и противомикробными свойствами.

13<sup>30</sup>-13<sup>45</sup>

**Молоткова Екатерина Андреевна, МГУ**

### **Роль стохастических процессов в колебаниях концентрации кальция в тромбоцитах**

В данной работе рассматривается механизм генерации импульсов концентрации ионов кальция в процессе кальциевой сигнализации в тромбоците человека с использованием стохастического моделирования.

13<sup>45</sup>-14<sup>00</sup>

**Соколова Вера Вадимовна, ИБХФ РАН, ФИАН, МФТИ**

### **Ультразвуковая регистрация возрастных и миопических изменений глаз птенцов японского перепела сформировавшихся при разных спектральных условиях повседневного освещения**

Прогрессирующий рост детской близорукости является следствием изменения спектрального состава повседневного освещения. Лабораторно создавая условия для стимуляции развития патологии, используя перепела, успешную биологическую модель для подобного эксперимента, можно получить результат за относительно короткий промежуток времени — полтора месяца. Метод акустической микроскопии позволяет быстро проанализировать как возрастные изменения так и возникшие отклонения.

14<sup>00</sup>-14<sup>30</sup>

## **Обед**

14<sup>30</sup>-14<sup>45</sup>

**Гуляев Иван Александрович, ИБХФ РАН, РХТУ**

### **Разработка технологии получения наночастиц PLGA/PLGA-PEG, содержащих комбинацию вориностата и доксорубина, для применения в комбинированной терапии опухолей молочной железы**

Данная работа посвящена разработке технологии и оптимизации условий получения полимерных наночастиц на основе сополимеров PLGA/PLGA-PEG, содержащих комбинацию ингибитора гистондеацетилаз - вориностат, и противоопухолевый антибиотик - доксорубин; для комбинированной терапии онкологических заболеваний.

14<sup>45</sup>-15<sup>00</sup>

**Гаврилина Елизавета Сергеевна, ИБХФ РАН**

### **Влияние гипохлорит- индуцированного окисления плазминогена на его структуру и термодинамические свойства**

В работе представлены результаты изучения гипохлорит- индуцированного окисления плазминогена методами масс-спектрометрического анализа и дифференциальной

сканирующей калориметрии. Будет обсуждаться влияние некоторых обнаруженных ПТМ на термодинамическую стабильность белка.

15<sup>00</sup>-15<sup>15</sup>

**Черняк Дмитрий Михайлович, МГУ**

**Исследование перспективного материала из экзины плюща *Hedéra hélix***

В данной работе рассматривается метод получения перспективного материала (спорополленина) из внешней оболочки (экзины) плюща *Hedéra hélix*. Также рассмотрены некоторые химические свойства полученного материала и изучена топология поверхности методом сканирующей электронной микроскопии. Сделан вывод о возможностях применения спорополленина в различных областях.

15<sup>15</sup>-15<sup>30</sup>

**Лаптева Анна Романовна, МГУ**

**Синтез и свойства трис(дибензилиденацетон)дипалладия(0)**

Одним из наиболее удобных источников нульвалентного палладия является комплекс  $\text{Pd}2(\text{dba})3$ . Цель работы - синтез  $\text{Pd}2(\text{dba})3 \cdot \text{CHCl}_3$ , изучение стабильности данного комплекса в растворах и изучение его взаимодействия с фосфиновыми лигандами - *rac*-BINAP, XantPhos, DavePhos, и *t*BuDavePhos методом ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>31</sup>P.

15<sup>30</sup>-15<sup>45</sup>

**Харченко Нина Витальевна, РХТУ**

**Биосинтез наночастиц серебра облигатно метилотрофными бактериями**

Проведен скрининг облигатно метилотрофных микроорганизмов, способных синтезировать стабильные длительное время наночастицы серебра. Для наиболее перспективного продуцента наночастиц серебра установлены значимые компоненты питательной среды для выхода наносеребра. Синтезированные наночастицы серебра охарактеризованы по размеру и степени дисперсности, а также установлена их способность подавлять рост патогенных микроорганизмов.

15<sup>45</sup>-16<sup>00</sup>

**Кофе-брейк**

16<sup>00</sup>-16<sup>15</sup>

**Новикова Вероника Олеговна, ФИЦ ПХФ и МХ**

**Перспективы энтеральной доставки нитрозильного комплекса железа с тиосульфатными лигандами *in vivo***

Муцин (основной белок слизи ЖКТ, содержащий богатый цистеинами домен) может вступать в реакции с нитрозильными комплексами железа (НКЖ). Целью нашей работы явилось исследование влияния имитированной желудочной жидкости (SGF, pH 1.2) и муцина на биотрансформацию НКЖ с тиосульфатными лигандами, при энтеральной доставке НКЖ, а также его биораспределение *in vivo*.

16<sup>15</sup>-16<sup>30</sup>

**Кривошей Александр Владимирович, МБЦ МГУ**

**Механизм ингибирования циклооксигеназы несубстратными жирными кислотами**

Показано, что для олеиновой и стеариновой кислот, в отличие от ряда НПВП, есть только быстрая обратимая стадия ингибирования циклооксигеназы, а медленная стадия в механизме ингибирования отсутствует. Взаимодействие фермента со стеариновой кислотой (в отличие от олеиновой) не описывается простой моделью, но может быть описано с учётом кооперативных взаимодействий.

16<sup>30</sup>-16<sup>45</sup>

**Воронков Михаил Викторович, ИБХФ РАН**

**Структурные закономерности проявления антирадикальных свойств фуллереном C60 и его аминокислотными производными в водных коллоидных системах**

Водорастворимые формы фуллеренов, в частности фуллерена C60, являются перспективными соединениями с точки зрения их применения в различных областях медицины и сельского хозяйства. Одними из таких водорастворимых форм являются N-монозамещенные аминокислотные производные фуллерена C60. В многочисленных исследованиях было показано, что они обладают широким спектром биологической активности. При этом их биологическая активность связана с регуляторным действием на окислительно-восстановительные процессы в клетках. Что делает актуальным исследование антирадикальных свойств N-монозамещенных аминокислотных производных фуллерена C60.

16<sup>45</sup>-17<sup>00</sup>

**Мезенцев-Черкес Иван Викторович, МГУ**

**Изучение механизма фотоактивации реакций гидридного сдвига**

В данной работе исследуется механизм образования спиросоединений в условиях фотоиндуцированной реакции на примере фотоциклизации 2-(2-(диметиламино)бензилиден)малоновой кислоты. Образующиеся при таких превращениях спиросоединения часто проявляют биологическую активность и весьма востребованы в области медицинской химии. Изучение механизма реакции позволяет расширить методологию синтеза биологически активных веществ.

17<sup>00</sup>-17<sup>15</sup>

**Кулиев Рауф Гаджиага оглы, МГУ**

**Механизм и кинетика фотоиндуцированной фрагментации ретиналя**

В работе проведен анализ кинетической схемы фотоиндуцированной фрагментации ретиналя и рассчитано среднее время жизни изолированной молекулы после возбуждения в

видимом диапазоне.

17<sup>15</sup>-17<sup>30</sup>

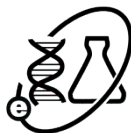
**Мальцев Александр Андреевич, ИБХФ РАН**

**Комплексное исследование состава препарата «экопероксид водорода» методами УФ-спектроскопии и спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния**

«Экопероксид водорода» – стимулятор роста растений, получаемый путем воздействия переменных электрических полей на воду. В настоящей работе методами УФ-спектроскопии и спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния исследуется состав препарата.

## **СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ**

**22 ноября 2022г.**



**Секция: Высокомолекулярные соединения, полимерные материалы, пищевая химия**

**Председатели – Тертышная Юлия Викторовна, Додина Екатерина Петровна**

11<sup>00</sup>-11<sup>15</sup>

**Елагин Даниил Ильич, ИБХФ РАН**

**Синтез полимеров 9-(тиран-2-ил) метил-9Н-карбазола. Свойства. Применение**

Был получен политиранилметилкарбазол с использованием иницирующей системы на основе трибутиламина, а также впервые с использованием иницирующей системы на основе анионного инициатора n-BuLi. Величина молекулярной массы продуктов составила до 23000. Созданы КПЗ на основе политиранилметилкарбазола и допантов. Вольт-амперные характеристики были измерены, величина фототока составляет до 300 мкА при напряжении 6В.

11<sup>15</sup>-11<sup>30</sup>

**Куковьякина Екатерина Владимировна, РХТУ**

**Наночастицы на основе амфифильных полимеров N-винилпирролидона, с инкапсулированным куркумином, для лечения злокачественных опухолей**

Работа посвящена получению наночастиц на основе амфифильных полимеров N-винилпирролидона с последующей инкапсуляцией куркумина с целью улучшения его физико-химических свойств и фармакокинетики. Наночастицы, с инкапсулированным куркумином, проявляют высокую цитотоксическую активность по отношению к злокачественным опухолям.

11<sup>30</sup>-11<sup>45</sup>

**Гаспарян Кристина Гагиковна, РЭУ**

**Комплексное исследование воздействия α-трикальцийфосфата на полигидроксibuтират, синтез нетканых волокнистых наноматериалов.**

Получены нетканые наноматериалы на основе ПГБ с α-ТКФ. Изучены морфология, кристалличность, механические свойства и химический состав. Материал обладает потенциалом для применения в костной инженерии.

11<sup>45</sup>-12<sup>00</sup>

**Терлеева Владлена Юрьевна, РТУ МИРЭА**

**Структурные особенности и антибактериальные свойства порфиринопolyмерных систем на основе полилактида**

Методом физической абсорбции получены порфиринопolyмерные системы на основе полилактида и мезо-арилзамещенных порфиринов с различными боковыми заместителями. Изучено влияние порфиринов на матрицу полилактида и показана биоактивность полученных композиционных материалов.

12<sup>00</sup>-12<sup>15</sup>

**Семенова Анастасия Владимировна, ВНИИСБ; ВНИИК**

**Сравнительная оценка способов извлечения крахмала при глубокой переработке зерна тритикале**

Работа посвящена исследованию ферментативных и неферментативных способов извлечения крахмала из зерна тритикале.

12<sup>15</sup>-12<sup>30</sup>

**Масленникова Дарья Алексеевна, РЭУ**

**Методы анализа в оценке показателей качества молока**

В последнее время всё большую актуальность приобретает тема качества продуктов питания, а именно их безопасность. Проблема фальсификации молока и молочных продуктов затрагивает всех жителей России. Развитие отечественного молочного животноводства напрямую зависит от того, насколько оперативно осваивается система управления качеством молока.

12<sup>30</sup>-12<sup>45</sup>

**Абросимов Станислав Дмитриевич, РЭУ**

**Методы и исследования молока**

Работа посвящена исследованию молока, его свойств, составу, полезных свойств. В работе

освещаются такие темы, как хранение, переработка, химический, биохимический состав самого продукта. После ознакомления с данной работой, можно узнать множество полезной и новой информации касательно молока.

12<sup>45</sup>-13<sup>15</sup>

Кофе-брейк

## СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ



## СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ

20 ноября 2022г.

Секция: Новые материалы, наноструктуры, квантовая химия, физическая химия

**Ильиных Анастасия Андреевна, ИБХФ РАН**

**Детекция агрегации при взаимодействии иммуноглобулина G с наночастицами как способ оценки целостности белковых покрытий на наночастицах**

С применением методов динамического светорассеяния и спектрофотометрии исследована агрегация в системах, содержащих магнитные наночастицы (МНЧ) оксида железа и иммуноглобулин G (IgG), в зависимости от pH среды, концентраций МНЧ и иммуноглобулина G, времени. По образованию агрегатов в ходе взаимодействия иммуноглобулина G с поверхностью МНЧ проведена оценка целостности покрытий из сывороточного альбумина на МНЧ, полученных в различных условиях.

**Клименко Максим Александрович, ИБХФ РАН РХТУ**

**Создание новой селективной наноразмерной системы доставки для бор-нейтронозахватной терапии онкологических заболеваний**

В данной работе была проведена разработка технологии синтеза наночастиц PLGA с 1,2-дикарболлидом кобальта для использования данной системы доставки в лечении методом бор-нейтронозахватной терапии.

**Мальцев Александр Андреевич, ИБХФ РАН**

**Посеребренные ценосферы летучей золы как субстрат для гигантского комбинационного рассеяния**

Алюмосиликатные ценосферы летучей золы - крупнотоннажный продукт сгорания ископаемого топлива. Металлизированные ценосферы находят применение в различных отраслях науки и техники. В данной работе рассматривается применение ценосфер с серебряным покрытием в качестве субстрата для гигантского комбинационного рассеяния.

**Мальцев Александр Андреевич, ИБХФ РАН**

**Комплексное исследование частиц плавущего золота месторождений Хлебопёк и Большая Дабиха методами электронной микроскопии, рентгено-фазового анализа и гигантского комбинационного рассеяния**

В данной работе впервые применен комплекс физических методов для анализа частиц плавущего золота. Подтверждена гипотеза, что плавучесть мелких золотых частиц обусловлена наличием тонких слоев адсорбированного органического вещества на его поверхности. Проведено сравнение органических веществ на поверхности золотых частиц месторождений Большая Дабиха и Хлебопёк.

**Петрова Полина Александровна, МГУ**

**Иммуноанализ на нитроцеллюлозных мембранах и его оптимизация**

Обработка поверхности плазмой может использоваться для ее гидрофилизации и улучшения ее сорбционных свойств. В данной работе показано, что обработка нитроцеллюлозных мембран в тлеющем разряде улучшает адсорбцию антител в 15–17 раз, а также приблизительно на порядок повышает чувствительность иммуноанализа (дот-блоттинга), выполняемого на таких мембранах.

**Беляева Наталья Олеговна, РЭУ**

Изучение влияния галогенсодержащих добавок на окислительную стабильность эластомерных материалов

Цель данного исследования заключается в получении композиционных эластомерных материалов, имеющих в своем составе модифицирующие добавки на основе галогенов и металлов переменной валентности. Необходимо изучить, какое влияние оказывает концентрация введенных добавок на комплексную окислительную стабильность материала.

**Булучевская Анастасия Дмитриевна, РЭУ**

Исследование трибологических и теплопроводящих свойств эластомерных композиционных материалов на основе этилен-пропилен-диенового каучука и алюмосиликатных ценосфер

Для исследования изготавливались эластомерные композиционные материалы на основе этилен-пропилен-диенового каучука и алюмосиликатных ценосфер. В рамках данной работы изучались трибологические свойства с помощью машины для испытаний на истирание, а методом горячего провода анализировалась теплопроводность полученных композитов.

**Золотарева Анастасия Сергеевна, МФТИ**

**Исследование локальной гипертермии в карциноме на основе лазерного излучения**

Проведены серии экспериментов лазерной термотерапии на материалах, являющихся аналогами к нашей целевой части (ткани и жидкости человека): соевом соусе — а также непосредственно на исследуемых образцах надпочечников, содержащих раковые опухоли. Для решения проблемы, связанной с эффектом тепловой линзы, нами была предложена методика компенсации объемных искажений, в основе которой лежит создание на компенсирующем устройстве профиля искажений, повторяющего профиль изображения в активном элементе, но с обратным знаком. Для исследования свойств материала, являющегося аналогом основного материала, была изучена взаимосвязь между отдельными компонентами СПЭ методом Ван-Осс-Гуда (тестовых жидкостей), а также написана программа, позволяющая осуществлять расчет свободной поверхностной энергии по данному методу

**Чернобривец Варвара Андреевна, МГПУ**

**Спектральные свойства гибридных комплексов на основе 11-вольфрамодицикобальтата аммония и фталоцианинов**

гибридный материал на основе фталоцианина цинка и 11-вольфрамодицикобальтата аммония исследован методом электронной абсорбционной спектроскопии. При взаимодействии фталоцианинов с гетерополианионом наблюдается уширение полосы Соре, что свидетельствует об образовании комплекса.

**21 ноября 2022г.**

**Секция: Биохимия, биофизика, лекарственные ферментативные препараты**

**Балахонкин Юрий Олегович, РХТУ**

**Возможные механизмы появления антиоксидантных свойств наночастиц серебра**

Изучена антиоксидантная активность (по ДФПГ) некоторых аминокислот, дипептидов, белков и различных соединений серебра, в том числе наночастиц. Определена антиоксидантная активность наночастиц серебра. Изучено влияние пероксида водорода на антиоксидантные свойства изученных аминокислот, дипептидов и белков.

**Капралова Мария Андреевна, ИБХФ РАН**

**Изучение связи экспрессии генов системы глутатиона и транспорта лекарственных веществ в ткани плаценты с акушерскими параметрами у беременных с онкологическими заболеваниями**

Изучены образцы ткани плаценты беременных пациенток с онкологическими заболеваниями, получавших химиотерапию с использованием препаратов платины. В выделенных образцах РНК исследована экспрессия генов системы глутатиона и транспорта лекарственных веществ. Результаты были сопоставлены с акушерскими параметрами.

**Ломскова Полина Константиновна, ИБХФ РАН**

**Методологический подход к определению циркулирующей опухолевой ДНК при раке молочной железы (клиническое наблюдение)**

В ходе работы был отработан методологический подход к определению циркулирующей опухолевой ДНК при раке молочной железы. Дальнейшая разработка этого подхода позволит индивидуализировать лечение больных раком молочной железы.

**Ломскова Полина Константиновна, ИБХФ РАН**

**Разработка методологического подхода для анализа экспрессии транскриптов маркерных генов молекулярного профилирования рака молочной железы**

Был отработан методологический подход для анализа экспрессии транскриптов маркерных генов молекулярного профилирования рака молочной железы. Это может помочь в дальнейшем получить тест-системы для молекулярного профилирования рака молочной железы.

**Попов Даниил Юрьевич, ОГУ**

**Исследование роли антиатерогенных мутаций мтДНК в метаболических изменениях в клеточных моделях атеросклероза**

Комплексное исследование метаболизма модельных цитоплазматических гибридов показывает, что антиатерогенный эффект ряда мутаций митохондриальной ДНК проявляется преимущественно в формате компенсации дисфункции митохондрий, а также нарушений баланса между образованием и нейтрализацией активных форм кислорода, возникающих в результате влияния других мутаций митохондриальной ДНК

**Сидорова Анастасия Евгеньевна, МГУ**

**Сравнение адсорбции растворимых аналитов на электроформованные мембраны при направленном переносе**

Микропористые и нетканые мембраны - перспективные компоненты биосенсоров, так как для них характерна большая сорбционная емкость. Однако сложная пространственная структура мембран приводит к диффузионному ограничению скорости образования комплексов. В нашей работе мы исследовали варианты преодоления этого ограничения для специфического и неспецифического связывания.

**Смолина Анастасия Максимовна, РХТУ**

#### **Хитозан-цистеиновые композиты**

Исследовано влияние на антиоксидантную активность растворов цистеина различных концентраций хитозана, условий хранения и способов иммобилизации. Изучена кинетика выхода иммобилизованного цистеина в модельную среду.

**Федорова Екатерина Викторовна, ИТЭБ РАН**

#### **Влияние модуляции сигнального пути трансформирующего фактора бета1 на морфофункциональные изменения гиппокампа мозга крыс при экспериментальной нейродегенерации**

Токсическую модель нейродегенерации, вызванную введением крысам нейротоксиканта хлорида триметилолова (TMT) использовали для исследования вовлечения TGF $\beta$ 1 и его рецепторов в патологические механизмы. Применение после индукции нейродегенерации ингибитора киназной активности рецептора TGF $\beta$ 1 первого типа SB431542 привело к снижению когнитивного дефицита у животных, снижению нейровоспаления, однако не способствовало значимому снижению гибели нейронов в гиппокампе.

**Хакимова Эмилия Ильдаровна, ИБХФ, Первый МГМУ**

#### **Комбинированная терапия онкологических заболеваний с использованием вориноста и доксорубина**

Использование математической модели Loewe для поиска эффективного соотношения доксорубина (DOX) и вориноста (SAHA) при лечении HER2-позитивного рака молочной железы. Комбинированное лечение вориностом (SAHA) в сочетании с другими химиотерапевтическими агентами (доксорубин, DOX) обеспечивает синергетический эффект, основанный на различных механизмах действия препаратов. При поиске оптимального соотношения лекарственных препаратов возникают проблемы выбора их наиболее эффективных комбинаций и учета возможных эффектов взаимодействия. С помощью модели Loewe можно оценить степень синергизма лекарств, используя данную математическую модель, мы смогли оценить эффективность комбинации SAHA и DOX, а также подобрать оптимальное соотношение между ними.

**Виноградова Любовь Владимировна, МИРЭА-РТУ**

#### **Синтез и антибактериальная активность новых 5-нитрофурановых производных 1,2,4-оксадиазола**

Предложен дизайн и осуществлен синтез новых 5-нитрофурановых производных 1,2,4-оксадиазола, несущих на периферии молекулы первичные и вторичные амины. Изучена их активность против различных типов патогенов, в частности, возбудителя туберкулеза *Mycobacterium tuberculosis* и инфекций так называемой ESKAPE-панели (резистентных к основным антибиотикам штаммов).

**Денискин Дмитрий Алексеевич, МИРЭА-РТУ**

#### **Одностадийный метод получения новых спироциклических соединений с противотуберкулезной активностью**

Предложен удобный одностадийный метод синтеза спироциклических соединений по реакции Принса, показана высокая активность продуктов против возбудителя туберкулеза *Mycobacterium tuberculosis*.

**Журавлев Максим Евгеньевич, МИРЭА-РТУ**

#### **Пиримидины спироциклического ряда, синтез и антибактериальная активность**

Разработан синтез новых пиримидинов спироциклического ряда, получены их 5-нитрофуранкарбоксамидные производные. Изучена активность соединений против различных типов патогенов, в частности, возбудителя туберкулеза *Mycobacterium tuberculosis* и инфекций так называемой ESKAPE-панели (резистентных к основным антибиотикам штаммов).

**22 ноября 2022г.**

**Секция: *Высокомолекулярные соединения, полимерные материалы, пищевая химия***

**Храмкова Анастасия Викторовна, Politecnico di Milano, Italy**

#### **Impact of aged polyethylene on ternary blends with polylactide**

Polymer mixtures of polyethylene and polylactide were obtained, to which aged polyethylene was added in the amount of 10 wt.%. to 30 wt.%. The structure, morphology of film samples, as well as the effect of aged polyethylene on the process of photodegradation were studied.

**Захаров Максим Сергеевич, ИБХФ РАН**

#### **Влияние ионов марганца на структуру и свойства композиций полилактид-мезо-замещенный порфири**

Порфириполимерные системы имеют большую актуальность в современной науке благодаря их уникальным свойствам. Такие системы могут применяться в качестве катализаторов в химических реакциях, также порфириполимерные системы имеют большой потенциал в области медицинской диагностики и терапии.

**Мальцев Александр Андреевич, ИБХФ РАН**

#### **Использование метода гигантского комбинационного рассеяния для оценки восстановительной способности лигносульфоната по отношению к соединениям благородных металлов**

Лигносульфонат - крупнотоннажный побочный продукт лесоперерабатывающей промышленности, используемый в качестве поверхностно-активного вещества и комплексообразователя. В настоящей работе методами

гигантского комбинационного рассеяния исследованы наночастицы серебра и золота, стабилизированные лигносульфонатом.

**Танделов Артемий-Татуш Таймуразович, ИБХФ РАН**

**Определение совместимости высокомолекулярных соединений методом анализа химической структуры и физико-механических свойств**

Методика включает определение функциональных групп, аддитивных мольных функций, физических показателей и термодинамических параметров совместимости, что позволяет оценить адгезионную прочность и возможность применения полимеров и древесины в различных областях промышленности.

**Энгельс Елена Эдуардовна, РЭУ, ППК РЭО**

**Экологический мониторинг с помощью беспилотных летательных аппаратов: новые возможности для охраны окружающей среды**

В 2023 году были приняты изменения в федеральный закон “Об охране окружающей среды”. Согласно изменениям нормативно-правовых актов предполагается создание к 1 марту 2025 г. ФГИС “Экологический мониторинг”. Одним из методов анализа окружающей среды для внесения данных во ФГИС “Экомониторинг” может стать использование беспилотных летательных аппаратов (БПЛА). Данный вид мониторинга можно отнести к локальному или импактному. Таким образом, анализируются особо загрязненные зоны (города и иные населенные пункты, природные объекты, НВОС, полигоны и другие).

**Баранюк Денис Михайлович, РЭУ**

**Методы анализа в оценке показателей качества сыров**

Данная работа нацелена на раскрытие современных методов анализа, применяемых для анализа сыров с опорой на соответствующие нормативные документы и статьи.

**Конакова Елизавета Дмитриевна, РЭУ**

**Методы анализа в оценке показателей качества цикория**

В настоящее время получили широкое распространение пищевые продукты растительного происхождения, применяющиеся для приготовления напитков, которые несколько напоминают по вкусу и внешне напиток кофе, но не содержат кофеина. Одним из таких кофезаменителей является корень цикория. Строгий контроль качества цикория обеспечивает безопасность употребления, пользу. Рассмотрим варианты современных методов анализа качества цикория растворимого.

**Харитонов Максим Олегович, РЭУ**

**Методы анализа в оценке показателей качества шоколада**

Доклад рассматривает методы анализа качества шоколада, включая сенсорное оценивание, физико-химические и химические методы, а также микробиологические аспекты. Данная работа подчеркивает важность соблюдения стандартов качества и роли научных исследований в улучшении производства и разнообразия шоколада.